

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Modelación hidrogeológica del acuífero kárstico de Yucatán con MODFLOW 6: calibración, sensibilidad e integración de aprendizaje automático

TESIS

Que para obtener el título de

Ingeniero Geofísico

P R E S E N T A

Sebastián López Juárez

DIRECTOR DE TESIS

Dr. José Carlos Ortiz Alemán



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2026

PROTESTA UNIVERSITARIA DE INTEGRIDAD Y HONESTIDAD ACADÉMICA Y PROFESIONAL
(Titulación con trabajo escrito)

De conformidad con lo dispuesto en los artículos 87, fracción V, del Estatuto General, 68, primer párrafo, del Reglamento General de Estudios Universitarios y 26, fracción I, y 35 del Reglamento General de Exámenes, me comprometo en todo tiempo a honrar a la institución y a cumplir con los principios establecidos en el Código de Ética de la Universidad Nacional Autónoma de México, especialmente con los de integridad y honestidad académica.

De acuerdo con lo anterior, manifiesto que el trabajo escrito titulado MODELACION HIDROGEOLOGICA DEL ACUIFERO KARSTICO DE YUCATAN CON MODFLOW 6: CALIBRACION, SENSIBILIDAD E INTEGRACION DE APRENDIZAJE AUTOMATICO. que presenté para obtener el titulo de INGENIERO GEOFÍSICO es original, de mi autoría y lo realicé con el rigor metodológico exigido por mi Entidad Académica, citando las fuentes de ideas, textos, imágenes, gráficos u otro tipo de obras empleadas para su desarrollo.

En consecuencia, acepto que la falta de cumplimiento de las disposiciones reglamentarias y normativas de la Universidad, en particular las ya referidas en el Código de Ética, llevará a la nulidad de los actos de carácter académico administrativo del proceso de titulación.



SEBASTIAN LOPEZ JUAREZ
Número de cuenta: 317023884

Dedicatoria

Dedico este trabajo a mi familia, especialmente a mis padres, Rómulo López Pliego y Eva Juárez Guevara, quienes con su esfuerzo, amor y ejemplo, día tras día han hecho mejor mi vida y me han impulsado a convertirme en alguien de bien. Agradezco profundamente sus consejos, sus enseñanzas, las risas compartidas y, sobre todo, su apoyo incondicional en los momentos buenos y en los difíciles; son un pilar fundamental en mi vida.

Asimismo, dedico este logro a mi hermana, Leidy Marian López Juárez, por su compañía, su cariño y por estar siempre presente. De igual manera, dedico este trabajo a Giselle Maya Valentin, quien fue alguien muy importante durante toda la carrera, y sigue siendo, agradezco todos los momentos buenos y malos que he vivido contigo hasta ahora, que esto quede plasmado para el futuro.

De igual manera, dedico este trabajo a las personas que amé y conocí, y que ya no están en esta realidad: mis abuelos Santiago y Rómulo, mi tío Noé y mi primo Jossimar. Si siguieran aquí, estoy seguro de que les habría alegrado verme culminar y entregar este trabajo.

Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas que, de una u otra forma, han contribuido a mi formación y me han acompañado para hacer posible la realización de este trabajo.

Agradezco profundamente a mi familia por el apoyo incondicional que me han brindado desde el inicio de mi vida. En especial, a mis tíos Adán, Marín, Kaín, Elvira, Hugo y Artemio, a mi abuela Francisca, así como a Citlali, Brenda, Janos y a toda mi familia. De cada uno de ustedes he aprendido algo valioso; llevo una parte de ustedes conmigo y procuro honrarlo esforzándome siempre por ser mejor.

Agradezco de manera muy especial a mi asesor, el Dr. José Carlos Ortíz Alemán, por su guía, su apoyo y su paciencia durante el desarrollo de esta tesis. Sus consejos y enseñanzas han sido imprescindibles no solo para concluir este trabajo, sino también para mi crecimiento e inspiración profesional. Le tengo un profundo respeto y admiración. Asimismo, agradezco al Dr. Carlos, a su esposa Rocío y a su hijo Sebastián, por abrirme las puertas de su hogar, por su trato y por permitirme convivir con ustedes; gracias también por enseñarme lugares hermosos del estado de Yucatán. Les deseo larga vida y lo mejor.

Agradezco a mis sinodales por aceptar formar parte del jurado de mi examen profesional. Admiro a cada uno de ustedes; su trayectoria y calidad humana representan una auténtica inspiración y motivación, tanto en lo profesional como en lo personal.

Agradezco también a las personas importantes que conocí a lo largo de la carrera: Jorge, Yusuri, Daniela, Natalia, Gaby, Emiliano, Uriel, Jacqueline, Paula, Karen, y a todas y todos con quienes compartí esta etapa. En especial, a mis amigas Giselle y Cecilia, con quienes conviví desde el inicio y con quienes construí recuerdos que valoro profundamente. Todo lo vivido, ya hayan sido momentos buenos o difíciles, hoy forma parte de mi historia y lo guardo con aprecio.

Sé que me faltan personas por mencionar. A todas y todos quienes han sido importantes en mi camino, gracias. Estoy seguro de que saben cuánto los valoro. Les deseo salud, amor y felicidad; lo mejor en esta vida y en las que sigan.

Resumen

El acuífero kárstico de la Península de Yucatán constituye el principal reservorio de agua subterránea de la región y presenta tres principales heterogeneidades geológicas, la zona elevada del suroeste (Sierra de Ticul), la región del Anillo de Cenotes y la zona costera, el dominio restante del terreno de Yucatán es plano. En esta tesis se desarrollarón y evaluarón diferentes modelos numéricos regionales del flujo de agua subterránea en estado estacionario del estado de Yucatán mediante MODFLOW 6, implementado en Python mediante FloPy, con los objetivos de cuantificar la incertidumbre numérica asociada a la discretización, evaluar escenarios conceptuales de conductividad hidráulica zonificada y la integración de un esquema de calibración y análisis de sensibilidad automático mediante la herramienta PEST++, asi como también un esquema de calibración y análisis de sensibilidad asistido por aprendizaje automático (Artificial Intelligence - AI/Machine Learning - ML) que permite acelerar la exploración paramétrica y mejorar la interpretabilidad. Los modelos poseen dos capas y se emplearon cuatro mallas diferentes a través de tres discretizaciones: malla estructurada (Discretización estructurada - DIS), malla triangular y Voronoi (discretización por vértices - DISV) y malla quadtree (Discretización no estructurada - DISU). Sobre cada discretización se simularon cuatro casos conceptuales: A) Caso homogéneo, B) Caso de alta conductividad en la región del Anillo de Cenotes, C) Caso de baja conductividad en la zona elevada y D) Caso donde se combinan los casos A, B y C. El conjunto de datos observados se integró a partir de registros piezométricos de CONAGUA ($N = 135$ pozos) del periodo 1996-2024, convirtiendo niveles piezométricos medidos a cargas hidráulicas (m.s.n.m.), agregando estadísticos robustos (mediana) en un periodo reciente (2010-2024), con ponderaciones según la disponibilidad de mediciones. La calibración automática se realizó para cada uno de los casos conceptuales utilizando PEST++ (pestpp-glm), empleando la malla quadtree como malla de referencia; y ajustando multiplicadores zonales de conductividad hidráulica, recarga y control de evapotranspiración, por capa y región. De forma complementaria, se incorporó una restricción costera basada en descarga de agua subterránea al mar (Submarine Groundwater Discharge - SGD) segmentada, usada como restricción suave para evaluar la mejora en la plausibilidad del

balance costero. Los modelos calibrados alcanzaron errores del orden de ~ 0.8 [m] (RMSE) y mostraron consistencia al transferir los parámetros calibrados en la malla de referencia a las otras mallas, respaldando la independencia práctica de discretización. El análisis de sensibilidad fue realizado mediante sensibilidad local (CSS) y global (Morris y Sobol), a través de la evaluación del Jacobiano generado por PEST++ (pestpp-glm), permitiendo identificar los parámetros dominantes, dichos parámetros estan asociados al balance regional de recarga y a la transmisividad efectiva en la capa 2 de la zona plana de Yucatán. La contribución de IA/ML se integró en tres aspectos: (1) automatización de muestreo y ejecución masiva del modelo de referencia (Caso D - malla quadtree) para la exploración eficiente del espacio paramétrico; (2) construcción y evaluación de modelos sustitutos (surrogates) para aproximar métricas de desempeño y reducir el costo computacional; y (3) formulación de un enfoque inverso basado en ML para apoyar la estimación de parámetros y el diagnóstico de identifiabilidad. Bajo las condiciones definidas en este trabajo, los resultados de calibración indican que el modelo presenta un nivel de confiabilidad adecuado, sustentado en el buen ajuste entre los datos disponibles de cargas hidráulicas observadas y las simuladas, así como en el comportamiento favorable de las métricas complementarias empleadas (RMSE, MAE, bias). En consecuencia, el modelo puede utilizarse como base para futuras actualizaciones y análisis prospectivos del comportamiento del acuífero, aunque todavía existe margen para reducir la incertidumbre estructural y paramétrica en trabajos futuros.

Abstract

The karstic aquifer of the Yucatán Peninsula constitutes the region's main groundwater reservoir and features three primary geological heterogeneities: the elevated southwestern zone (Sierra de Ticul), the Ring of Cenotes region, and the coastal zone; the remaining domain of the Yucatán terrain is flat. In this thesis, different regional numerical models of steady-state groundwater flow for the state of Yucatán were developed and evaluated using MODFLOW 6, implemented in Python via FloPy. The objectives were to quantify numerical uncertainty associated with discretization, evaluate conceptual scenarios

of zoned hydraulic conductivity, and integrate an automatic calibration and sensitivity analysis scheme using the PEST++ tool, as well as a machine learning-assisted (Artificial Intelligence - AI/Machine Learning - ML) calibration and sensitivity analysis scheme to accelerate parametric exploration and improve interpretability.

The models consist of two layers, and four different meshes were employed across three discretizations: structured mesh (Structured Discretization - DIS), triangular and Voronoi mesh (Discretization by Vertices - DISV), and quadtree mesh (Unstructured Discretization - DISU). Four conceptual cases were simulated for each discretization: A) Homogeneous case, B) High conductivity case in the Ring of Cenotes region, C) Low conductivity case in the elevated zone, and D) A case combining cases A, B, and C.

The observed dataset was integrated from CONAGUA piezometric records ($N = 135$ wells) from the 1996-2024 period, converting measured piezometric levels to hydraulic heads (m.a.s.l.) and adding robust statistics (median) for a recent period (2010-2024), with weights based on measurement availability.

Automatic calibration was performed for each conceptual case using PEST++ (pestpp-glm), employing the quadtree mesh as the reference mesh and adjusting zonal multipliers for hydraulic conductivity, recharge, and evapotranspiration control by layer and region. Complementarily, a segmented coastal constraint based on Submarine Groundwater Discharge (SGD) was incorporated as a soft constraint to evaluate improvements in the plausibility of the coastal balance.

The calibrated models achieved errors on the order of ~ 0.8 [m] (RMSE) and showed consistency when transferring calibrated parameters from the reference mesh to the other meshes, supporting practical discretization independence. Sensitivity analysis was conducted using local sensitivity (CSS) and global sensitivity (Morris and Sobol) by evaluating the Jacobian generated by PEST++ (pestpp-glm), allowing for the identification of dominant parameters. These parameters are associated with the regional recharge balance and the effective transmissivity in layer 2 of the flat Yucatán zone.

The AI/ML contribution was integrated into three aspects: (1) automation of sampling and massive execution of the reference model (Case D - quadtree mesh) for efficient exploration of the parametric space; (2) construction and evaluation of surrogate models to

approximate performance metrics and reduce computational cost; and (3) formulation of an ML-based inverse approach to support parameter estimation and identifiability diagnosis.

Under the conditions defined in this work, the calibration results indicate that the model presents an adequate level of reliability, supported by the good fit between available observed hydraulic head data and simulated values, as well as the favorable behavior of the complementary metrics employed (RMSE, MAE, bias). Consequently, the model can serve as a basis for future updates and prospective analyses of aquifer behavior, although there remains room to reduce structural and parametric uncertainty in future work.

Índice general

1 INTRODUCCIÓN **21**

§1.1 Características geológicas e hidrogeológicas del acuífero kárstico de Yucatán 22

§1.2 Vulnerabilidad y presiones antropogénicas del acuífero 24

§1.3 Antecedentes de la modelación del flujo subterráneo en Yucatán 27

§1.4 Objetivo de la investigación 29

2 MARCO TEÓRICO HIDROGEOLÓGICO **31**

§2.1 Conceptos básicos de hidráulica aplicados a la Geohidrología 31

§2.1.1 Características del medio poroso 31

2.1.1.1 Homogeneidad/heterogeneidad 32

2.1.1.2 Isotropía/anisotropía 32

§2.2 Parámetros que caracterizan las condiciones de los acuíferos 34

§2.2.1 Porosidad 36

§2.2.2 Permeabilidad 38

§2.2.3 Coeficiente de almacenamiento 40

§2.2.4 Nivel de Agua Freática (NAF) 41

§2.2.5 Carga hidráulica y gradiente de flujo 43

§2.2.6 Ley de Darcy 45

2.2.6.1 Conductividad hidráulica y permeabilidad intrínseca . . . 46

§2.3 Sistemas de flujo subterráneo 47

§2.3.1 Ecuación de conservación de la masa 47

§2.3.2 Ecuación general del flujo de agua subterránea 49

§2.4 Formaciones geológicas subterráneas 49

§2.4.1 Estratos confinantes 49

2.4.1.1 Acuífugo 50
2.4.1.2 Acuitardo 50
2.4.1.3 Acuícludo 51
§2.4.2 Acuíferos 51
2.4.2.1 Acuífero libre 52
2.4.2.2 Acuífero semiconfinado 53
2.4.2.3 Acuífero confinado 55

3 MODELO NUMÉRICO DEL ACUÍFERO KÁRSTICO DE YUCATÁN 58
§3.1 Marco de trabajo del modelo 58
§3.1.1 Propósito del modelo y alcance 58
§3.1.2 Definición de escenarios y matrices de simulaciones 59
§3.1.3 Descripción del dominio y sistema de referencia 60
§3.1.4 Modelo hidroestratigráfico 60
3.1.4.1 Ajuste de la discretización vertical para evitar cargas no físicas 62
§3.1.5 Discretización espacial y tipos de malla 63
3.1.5.1 Malla estructurada (DIS) 64
3.1.5.2 Malla no-estructurada por vértices (DISV) 64
3.1.5.3 Malla triangular y Voronoi 64
3.1.5.4 Malla no-estructurada (DISU) 69
§3.1.6 Discretización temporal 82
§3.1.7 Condiciones Iniciales 82
§3.1.8 Condiciones de frontera 82
§3.1.9 Zonificación y parametrización 83
§3.2 Calibración de los modelos y sensibilidad 85
§3.2.1 Experimento de calibración: Submarine Groundwater Discharge (SGD) 87
§3.2.2 Asignación de datos observados a las mallas 88
§3.2.3 Parámetros evaluados 89
§3.2.4 Métricas de error 91

§3.2.5 Diseño del análisis de sensibilidad 92
§3.2.6 Fundamentos del análisis de sensibilidad local: Jacobiano y sensibilidad compuesta (CSS) 92
3.2.6.1 Matriz Jacobiana de sensibilidades 93
3.2.6.2 Sensibilidad compuesta del parámetro (CSS) 94
§3.2.7 Fundamentos del análisis de sensibilidad global: métodos de Morris y Sobol empleados por PEST++ 95
3.2.7.1 Método de Morris (Efectos elementales) 95
3.2.7.2 Análisis de Sobol (descomposición de varianza) 96
3.2.7.3 Consideraciones prácticas e interpretación en el presente estudio 98
3.2.7.4 Sensibilidad local (Jacobian/CSS) 100
§3.2.8 Sensibilidad global (Morris y Sobol) 100
§3.3 Discusión de la simulación numérica (control de calidad) 101
§3.3.1 Convergencia del solucionador y estabilidad 101
§3.3.2 Balance hídrico y coherencia física 102
§3.3.3 Verificación de independencia de malla 103
§3.3.4 Limitaciones e incertidumbre 103

4 METODOLOGÍA 105

§4.1 Flujo de trabajo reproducible 105
§4.2 Datos de entrada y preprocesamiento 106
§4.2.1 Generación del insumo de evapotranspiración (EVT) a partir de ERA5118
§4.2.2 Interpolación espacial de variables mediante IDW. 122
§4.3 Estrategia de calibración y sensibilidad 124
§4.3.1 Definición del problema de calibración 124
§4.3.2 Métricas y criterios de ajuste 126
§4.3.3 Restricción de descarga subterránea al mar (SGD) 126
§4.3.4 Prueba de independencia de malla 128
§4.3.5 Prueba de sensibilidad local (derivadas, CSS, leverage) 129

§4.3.6 Prueba de sensibilidad global (Morris y Sobol) 129

5 RESULTADOS Y DISCUSIÓN 131

§5.1 Verificación numérica y consistencia de las simulaciones 131

§5.2 Resultados de los casos A/B/C/D: consistencia e independencia de discretización 133

§5.2.1 Cargas hidráulicas simuladas iniciales por caso conceptual y discretización 134

§5.2.2 Vectores específicos de descarga por Caso y discretización 142

§5.3 Resultados de calibración 151

§5.3.1 Calibración automática con PEST++ (malla de referencia: quadtree) 151

§5.3.2 Restricción costera mediante SGD 166

§5.3.3 Transferencia de parámetros y consistencia entre mallas 169

§5.4 Resultados del análisis de sensibilidad 170

§5.4.1 Sensibilidad local con PEST++ (CSS) por grupo (`head` vs. `SGD`) . . 170

§5.4.2 Sensibilidad global tipo Morris (screening) 172

5.4.2.1 (a) Morris sobre RMSE_{head} 173

5.4.2.2 (b) Morris sobre RMSE_{sgd} 176

§5.4.3 Sensibilidad global tipo Sobol (descomposición de varianza) 179

§5.4.4 Comparación de sensibilidad global: `head` vs. `head+sgd` 183

§5.5 Discusión e implicaciones hidrogeológicas 184

§5.5.1 Parámetros dominantes e identificabilidad 184

§5.5.2 Rol de SGD y experimentos metodológicos 185

§5.6 Limitaciones e incertidumbres 185

6 CALIBRACIÓN ASISTIDA POR APRENDIZAJE AUTOMÁTICO 187

§6.1 Motivación y alcance del componente de Inteligencia Artificial en Modelación Hidrogeológica 187

§6.1.1 Justificación del uso de emuladores (modelos sustitutos) en hidrogeología computacional 188

§6.1.2 Relación con la calibración clásica (PEST++/pyEMU) 189

§6.1.3 Objetivos del capitulo de Inteligencia Artificial 190
6.1.3.1 Emulador directo (*forward-emulator*) 190
6.1.3.2 Calibración/inversa basada en emulador 191
6.1.3.3 Comparación con `PEST++` y verificación con MODFLOW 6 191
§6.2 Fundamentos y marco conceptual 192
§6.2.1 Emulación y modelado sustituto 192
6.2.1.1 Emulador adoptado y consideraciones prácticas 193
§6.2.2 Generalización y sobreajuste 194
§6.2.3 Incertidumbre e identificabilidad 195
§6.3 Metodología del problema para el modelo hidrogeológico de Yucatán 195
§6.3.1 Contexto del modelo numérico 196
§6.3.2 Zonas de refinamiento 196
§6.3.3 Parámetros de calibración considerados 197
6.3.3.1 Conductividad hidráulica zonal por capa (K) 198
6.3.3.2 Recarga meteórica efectiva (RCH) por zona 198
6.3.3.3 Evapotranspiración (EVT) mediante fracción de agua subterránea (FGW) 198
6.3.3.4 Restricción costera basada en SGD (grupo de observación) 199
§6.3.4 Generación de datos para aprendizaje automático 200
6.3.4.1 Definición del espacio de parámetros 200
6.3.4.2 Diseño de muestreo y construcción del conjunto $\mathcal{D}$ 201
6.3.4.3 Muestreo tipo LHS y punto ancla (*baseline*) 201
6.3.4.4 Ejecución masiva de MODFLOW 6 y extracción de vector de salida 202
§6.3.5 Entrenamiento del emulador directo (*forward emulator*) 202
6.3.5.1 Arquitectura del emulador directo e implementación . . . 202
6.3.5.2 Formulación del problema multisalida 203
§6.3.6 Calibración acelerada basada en el emulador (problema inverso) . . 204
6.3.6.1 Experimentos con y sin prior (regularización tipo PEST++) 205
§6.3.7 Verificación final con MODFLOW 6 205

§6.4 Resultados, comparación y discusión 206
6.4.0.1 Mejor ejecución del muestreo y diagnóstico inicial 209
6.4.0.2 Emulador directo y su precisión (error de aproximación) . 209
6.4.0.3 Calibración basada en el emulador (inversa) y efecto del prior 209
6.4.0.4 Verificación final con MF6 (criterio definitivo) 211
6.4.0.5 Análisis de residuales: observaciones dominantes en la función objetivo 212
§6.4.1 Síntesis 212
§6.5 Conclusiones del capitulo y trabajo futuro 213

7 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES 214
§7.1 Conclusiones generales 214
§7.2 Conclusiones específicas por componente 216
§7.3 Recomendaciones 217
§7.3.1 Recomendaciones técnicas y metodológicas 217
§7.3.2 Recomendaciones hidrogeológicas y de datos 218
§7.3.3 Recomendaciones para el componente de IA 219

A MODFLOW 6 y FloPy 221
§A.0.1 MODFLOW-NWT 222
§A.0.2 MODFLOW-USG 222
§A.0.3 Modelo GWF 222
§A.0.4 Modelo GWT 223
§A.0.5 Modelo GWE 224
§A.0.6 Modelo PRT 224
§A.1 Estructura general de MODFLOW 6 224
§A.1.1 Paquete IMS (Iterative Model Solver) 225
A.1.1.1 No linealidad y control de convergencia 225
§A.1.2 Paquete TDIS (Time Discretization) 226
§A.1.3 Paquete NPF (Node Property Flow) 226
§A.1.4 Paquete IC (Initial Conditions) 226

§A.1.5 Paquete RCH (Recharge) . . . 226
§A.1.6 Paquete EVT (Evapotranspiración) . . . 227
§A.1.7 Paquete CHD (Constant Head) . . . 227
§A.1.8 Otros paquetes usados . . . 227
§A.1.9 Integración de paquetes en la simulación mediante FloPy . . . 228
§A.2 Condiciones iniciales . . . 229
§A.3 Condiciones iniciales . . . 230
§A.3.1 Condiciones de frontera . . . 231

B Datos de ERA5 **234**

C Repositorio de código (GitHub) **241**

Índice de figuras

1.1 Mapa de localización del estado de Yucatán, México. El contorno estatal se delimita en rojo sobre una imagen satelital, e incluye flecha de norte, barra de escala y referencias de coordenadas. Fuente: elaboración propia con base en *Google Earth*. . . . 24

2.1 Esquema de la porosidad. . . . 36
2.2 Esquema de la permeabilidad . . . 38
2.3 Esquema de representación del Nivel de Aguas Freáticas (NAF). . . . 43
2.4 Cubo diferencial elemental. . . . 47
2.5 Balance de masa en un elemento diferencial de volumen (REV). . . . 48
2.6 Esquema conceptual de un acuífero libre o freático. . . . 53
2.7 Representación de un acuífero semiconfinado o acuífero con fuga. . . . 55
2.8 Esquema de un acuífero confinado. . . . 57

3.1 Zonificación espacial de los principales rasgos geológicos de Yucatán. . . . 59

3.2 Diagrama que muestra la configuración del acuífero por medio de la sección transversal A-A'. 62
3.3 Malla estructurada de 400 × 400 celdas utilizada en los modelos A, B, C y D. 64
3.4 Malla triangular y de Voronoi, respectivamente, de las capas 1 y 2 del modelo A. (a) Malla triangular con 3970 nodos de la capa 1 y 2; (b) malla Voronoi con 3044 nodos en las capas 1 y 2, respectivamente. 65
3.5 Malla triangular y de Voronoi, respectivamente, de las capas 1 y 2 del modelo B. (a) Malla triangular con 42640 nodos en las capas 1 y 2; (b) Malla Voronoi con 22413 nodos en las capas 1 y 2. 66
3.6 Malla triangular y de Voronoi, respectivamemne, de las capas 1 y 2 del modelo C. (a) Malla triangular con 22677 nodos en las capas 1 y 2; (b) Malla Voronoi con 13650 nodos en las capas 1 y 2. 67
3.7 Malla triangular y de Voronoi, respectivamente, de las capas 1 y 2 del modelo D. (a) Malla triangular con 56575 nodos en las capas 1 y 2; (b) Malla Voronoi con 25566 nodos en las capas 1 y 2. 68
3.8 Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo A. 70
3.9 Acercamiento a la malla quadtree de la capa 1 del modelo A que muestra el refinamiento de la malla. 71
3.10 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo A que muestra el refinamiento de la malla. 72
3.11 Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo B. 73
3.12 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 1 del modelo B que muestra el refinamiento de la malla. 74
3.13 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo B que muestra el refinamiento de la malla. 75
3.14 Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo C. 76

3.15 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 1 del modelo C que muestra el refinamiento de la malla. 77
3.16 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo C que muestra el refinamiento de la malla. 78
3.17 Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo D. 79
3.18 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 1 del modelo D que muestra el refinamiento de la malla. 80
3.19 Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo D que muestra el refinamiento de la malla. 81
3.20 Franja costera de 1.5 [km] de ancho, utilizada para definir el paquete de condición de frontera (CHD) en ambas capas de los modelos. 83
3.21 Tipo de acuífero asignado en capa 1 y 2 de los modelos. 85

4.1 Modelo Digital de Elevación del estado de Yucatán. 107
4.2 Cargas hidráulicas iniciales de las capas 1 y 2, para todos los modelos. . . . 108
4.3 165 pozos piezométricos (puntos amarillos) de observación en el estado de Yucatán, CONAGUA. 109
4.4 Recarga en diferentes unidades de medida, la recarga solo fue aplicada en la capa 1 de los modelos. 111
4.5 Evapotranspiración anual del estado de Yucatán, aplicada a la capa 1 de los modelos. 113
4.6 Linea de costa de la República Mexicana, CONABIO. 114
4.7 Ráster de densidad de población del estado de Yucatán. 115
4.8 Shapefile de anillo de cenotes. 116
4.9 Shapefile de la zona elevada del estado de Yucatán. 117
4.10 Mapa de velocidades de descarga de agua subterránea marina, Figura obtenida de Murgulet et al. [2020]. 118
4.11 Mapa de los puntos centrales observados de SGD que fueron calculados en cada segmento de linea de costa del estado de Yucatán. 127

5.1 Cargas hidráulicas simuladas del caso A en todas las mallas, capa 1. 135
5.2 Cargas hidráulicas simuladas del caso A en todas las mallas, capa 2. 136
5.3 Cargas hidráulicas simuladas del caso B en todas las mallas, capa 1. 137
5.4 Cargas hidráulicas simuladas del caso B en todas las mallas, capa 2. 138
5.5 Cargas hidráulicas simuladas del caso C en todas las mallas, capa 1. 139
5.6 Cargas hidráulicas simuladas del caso C en todas las mallas, capa 2. 140
5.7 Cargas hidráulicas simuladas del caso D en todas las mallas, capa 1. 141
5.8 Cargas hidráulicas simuladas del caso D en todas las mallas, capa 2. 142
5.9 Vectores específicos de descarga del caso A en todas las mallas, capa 1. . . 144
5.10 Vectores específicos de descarga del caso A en todas las mallas, capa 2. . . 145
5.11 Vectores específicos de descarga del caso B en todas las mallas, capa 1. . . 146
5.12 Vectores específicos de descarga del caso B en todas las mallas, capa 2. . . 147
5.13 Vectores específicos de descarga del caso C en todas las mallas, capa 1. . . 148
5.14 Vectores específicos de descarga del caso C en todas las mallas, capa 2. . . 149
5.15 Vectores específicos de descarga del caso D en todas las mallas, capa 1. . . 150
5.16 Vectores específicos de descarga del caso D en todas las mallas, capa 2. . . 151
5.17 Caso A, B, C y D, respectivamente, en malla quadtree para calibración, capa 1. 153
5.18 Casos A, B, C y D, respectivamente, en malla quadtree para calibración, capa 2. 154
5.19 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso A calibradas, capa 1. 155
5.20 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso B calibradas, capa 1. 156
5.21 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso C calibradas, capa 1. 157
5.22 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso D calibradas, capa 1. 158
5.23 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso A calibradas, capa 2. 159

5.24 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso B calibradas, capa 2. 160
5.25 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso C calibradas, capa 2. 161
5.26 Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso D calibradas, capa 2. 162
5.27 Diagrama de sensibilidad global tipo Morris para el RMSE del grupo `head`. El eje $\mu*$ (escala logarítmica) representa la influencia global de cada parámetro sobre el RMSE y σ (escala logarítmica) resume la contribución de no linealidades e interacciones. Los numeros 1-5 destacan los parámetros dominantes y el recuadro indica su nombre y valores de $\mu*$ y σ. 175
5.28 Diagrama de sensibilidad global tipo Morris para el RMSE de la descarga subterránea al mar (SGD). El eje $\mu*$ (escala logarítmica) representa la influencia global de cada parámetro sobre el RMSE y σ (escala logarítmica) resume la contribución de no linealidades e interacciones. Los números 1-5 destacana los parámetros dominantes y el recuadro indica su nombre y valores de $\mu*$ y σ. Se observa una fuerte dominancia de pocos parámetros en la respuesta de SGD. 178
5.29 Índices de sensibilidad global de Sobol (efecto total, ST) para el RMSE del grupo 'heads'. Las barras horizontales muestran la contribución total de cada parámetro a la varianza del RMSE, incluyendo efectos principales e interacciones. Las líneas representan el intervalo de confianza (ST_{conf}). Los colores corresponden a la zona hidrogeológica asociada a cada parámetro. . 181
5.30 índices de sensibilidad global de Sobol (efecto total, ST) para el RMSE dl grupo 'SGD'. El índice ST cuantifica la contribución total de cada parámetro (efecto principal + interacciones) a la varianza del RMSE. Las barras muestras ST y las líneas el intervalo de confianza (ST_{conf}). Los colores indican la zona hidrogeológica asociada al parámetro. 182

6.1 Histogramas de residuales entre el emulador neuronal y MODFLOW 6, por capas 1 y 2. 207
6.2 Diagramas de paridad MF6 vs RN, empleados para evaluar la fidelidad global del emulador y detectar regiones/rangos donde la relación se aparta de la proporción 1:1. 208
6.3 Cargas hidráulicas simuladas (MODFLOW 6) usando los parámetros calibrados por el emulador ($\boldsymbol{\theta}$). 211

B.1 Temperatura de punto de rocío a 2 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024) 235
B.2 Temperatura del aire a 2 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024) 236
B.3 Radiación neta térmica de onda larga en superficie acumulada en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024) 237
B.4 Radiación neta térmica de onda corta en superficie acumulada en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024) 238
B.5 Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024) 239
B.6 Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024) 240

Índice de tablas

3.1 Configuración vertical de los modelos. Los espesores corresponden a la discretización vertical final utilizada en cada uno de los modelos. 61
3.2 Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso A en [m/s] 83
3.3 Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso B en [m/s] 84
3.4 Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso C en [m/s] 84
3.5 Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso D en [m/s] 84

5.1 Resumen de control numérico por discretización. 133
5.2 Parámetros absolutos del caso A (DISU) calibrado. 163
5.3 Parámetros absolutos del caso B (DISU) calibrado. 163
5.4 Parámetros absolutos del caso C (DISU) calibrado. 163
5.5 Parámetros absolutos del caso D (DISU) calibrado. 164
5.6 Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual A. . . 164
5.7 Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual B. . . 165
5.8 Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual C. . . 165
5.9 Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual D. . . 165
5.10 Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual A. . . 165
5.11 Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual B. . . 165
5.12 Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual C. . . 166
5.13 Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual D. . . 166
5.14 Comparación entre calibración solo con `head` (E1) y calibración `head`+`sgd` (E2) para el Caso D (malla quadtree). 169
5.15 Valores obtenidos del CSS total y el los grupos 'head' y 'sgd' por separado, del caso D malla quadtree. 171
5.16 Valores obtenidos de Morris sobre $RMSE_{head}$. 174
5.17 Valores obtenidos de Morris sobre $RMSE_{sgd}$. 177
5.18 Valores obtenidos de Sobol para $RMSE_{head}$. 180
5.19 Valores obtenidos de Sobol para $RMSE_{sgd}$. 182

6.1 Hiperparámetros del emulador directo (MLP multisalida) utilizado en este estudio. 203
6.2 Resumen de desempeño: línea base, mejor corrida del muestreo y calibración basada en emulador (verificada con MODFLOW 6). 210
6.3 Parámetros calibrados $\boldsymbol{\theta}^*$ (emulador $\rightarrow$ verificación con MODFLOW 6). . . 210
6.4 Valor de Φ obtenido, y valor de Φ de cada estación asi como su porcentaje de contribución al valor de Φ, del muestreo base (run_00000) 212

6.5 Valor de Φ obtenido, y valor de Φ de cada estación asi como su porcentaje de contribución al valor de Φ, del mejor muestreo (run_00947) 212

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

La Península de Yucatán constituye uno de los sistemas de acuíferos kársticos costeros más extensos del mundo [Bauer-Gottwein et al., 2011]. Se trata de una vasta plataforma de roca caliza de origen Mesozoico-Cenozoico, con una superficie aproximada de 165,000 $[km]^2$ que abarca los estados de Yucatán, Campeche y Quintana Roo en México, así como partes del norte de Belice y Guatemala [Bauer-Gottwein et al., 2011]. Debido a su naturaleza geológica y relieve prácticamente plano, la región carece casi por completo de escurrimientos superficiales permanentes. Salvo por algunos ríos en la porción sur (e.g. el río Usumacinta y afluentes que drenan hacia el Golfo de México, y el río Belice hacia el Caribe), la infiltración pluvial alimenta directamente al agua subterránea [Bauer-Gottwein et al., 2011]. En consecuencia, la única fuente significativa de agua dulce para la población y los ecosistemas de la Península es el acuífero kárstico [Bauer-Gottwein et al., 2011]. Este acuífero se comporta como un medio no confinado de alta permeabilidad, presentando una red de conductos y cavernas interconectadas típica de terrenos kársticos maduros [Bauer-Gottwein et al., 2011].

1.1. Características geológicas e hidrogeológicas del acuífero kárstico de Yucatán

La plataforma carbonatada de Yucatán se formó sobre depósitos calcáreos del Cretácico superior y edades geológicas posteriores, habiendo sido modificada por diversos eventos tectónicos y climáticos a lo largo de su historia. Uno de los rasgos geológicos más notables es el cráter de impacto de Chicxulub, originado al final del Cretácico, cuyo anillo de impacto controla en gran medida la geomorfología y la hidrología de la región norte ([Bauer-Gottwein et al., 2011]). Este antiguo impacto dejó como huella una estructura anular de dolinas y cenotes conocida como el *Anillo de Cenotes*, que marca una zona de fracturas y disolución intensa en el acuífero 8[Bauer-Gottwein et al., 2011]). Dicho anillo ha sido relacionado con una zona de conductividad hidráulica elevada, actuando como vía preferencial para el flujo de agua subterránea hacia la costa, sobre todo en la region noreste ([González-Herrera et al., 2002]). Adicionalmente, estudios hidrogeológicos sugieren la presencia de depósitos evaporíticos (yeso) en el subsuelo de la región suroccidental de la península, particularmente en la llamada *Sierrita de Ticul* y áreas elevadas del interior. Estas capas menos permeables en el sur crean contrastes hidráulicos significativos: las zonas elevadas del suroeste poseen una permeabilidad relativamente baja, mientras que las llanuras kársticas hacia el norte y oriente presentan permeabilidades muy altas ([Bauer-Gottwein et al., 2011]). En el acuífero kárstico yucateco, el agua dulce forma un lente flotante sobre agua subterránea salobre más densa. Este lente freático de agua dulce está limitado inferiormente por una cuña salina intrusiva proveniente del mar, la cual puede penetrar decenas de kilómetros tierra adentro ([González-Herrera et al., 2002]). De hecho, el modelo conceptual vigente establece que el agua marina subyace al agua dulce a profundidades relativamente someras cerca de la costa (menos de ~ 90 [m] en algunos sitios), extendiéndose horizontalmente más de 40 [km] bajo el continente ([González-Herrera et al., 2002]). La interfaz de salinidad muestra un gradiente difuso de mezcla de hasta 40 [m] de espesor, consistente a grandes rasgos con la relación de densidades descrita por el principio de Ghyben-Herzberg Narváez-Montoya et al. [2025]. En la mayor parte de la península, el nivel freático se encuentra a pocos metros sobre el nivel del mar, resultando en gradientes

hidráulicos extremadamente bajos, del orden de apenas 7 a 10 [mm] por kilómetro en la porción norte plana González-Herrera et al. [2002]. Esta pendiente tan reducida refleja la alta transmisividad del medio kárstico: el sistema de conductos bien desarrollados permite un flujo subterráneo casi libre, con mínimas pérdidas de carga y una rápida nivelación del manto freático tras eventos de recarga o extracción [González-Herrera et al., 2002]. Evidencias hidrogeológicas e hidroquímicas confirman la influencia de las estructuras geológicas mencionadas (fallas, brechas de impacto y variaciones litoestratigráficas) en el patrón de flujo subterráneo regional ([González-Herrera et al., 2002, Bauer-Gottwein et al., 2011]). Por ejemplo, la Sierra de Ticul presenta una falla normal que separa un bloque elevado al suroeste (con niveles piezométricos más altos) de la llanura nor-oriental más baja (con niveles piezométricos más bajos); dicha falla actúa como una barrera parcial al flujo subterráneo, provocando que el gradiente general del flujo sea desde el interior de la península hacia la costa ([González-Herrera et al., 2002]). En las cercanías del Anillo de Cenotes, numerosos cenotes alineados indican zonas de alta conectividad hidráulica que facilitan la descarga subterránea hacia el Golfo de México y el Mar Caribe ([González-Herrera et al., 2002]). Cabe destacar que el sistema acuífero peninsular alberga extensas redes de cavernas inundadas, incluyendo algunos de los sistemas de cuevas submarinas más largos del mundo ([Bauer-Gottwein et al., 2011]). El flujo subterráneo en Yucatán ocurre a diversas escalas, desde el percolado difuso a través de fisuras y poros de la matriz carbonatada, hasta el flujo turbulento concentrado en conductos mayores y cenotes ([Bauer-Gottwein et al., 2011, Narváez-Montoya et al., 2025]). Esta naturaleza dual (matriz porosa vs. conductos) confiere al acuífero un comportamiento complejo, difícil de caracterizar con métodos tradicionales. Sin embargo, a escala regional, suele asumirse una aproximación de medio poroso equivalente, válida para modelar el flujo a gran escala debido a que las heterogeneidades locales se promedian en propiedades hidráulicas efectivas ([González-Herrera et al., 2002]). Bajo esta aproximación, el acuífero se trata como un medio granular contínuo, con parámetros como transmisividad y coeficiente de almacenamiento que integran los efectos de cavidades y fracturas. Estudios previos respaldan esta simplificación al mostrar que muchas características observadas (por ejemplo, el amplio radio de influencia de bombeos y la rápida recuperación de niveles) se explican por la alta conductividad hidráulica efectiva

del sistema kárstico ([González-Herrera et al., 2002]). En síntesis, las condiciones geológicas de la Península de Yucatán han dado lugar a un acuífero kárstico regional único: un lente no confinado de agua dulce altamente productivo pero hidrodinámicamente frágil, sostenido íntegramente por la recarga pluvial y limitado por interacciones con el agua de mar subyacente en la parte costal.



Figura 1.1: Mapa de localización del estado de Yucatán, México. El contorno estatal se delimita en rojo sobre una imagen satelital, e incluye flecha de norte, barra de escala y referencias de coordenadas. Fuente: elaboración propia con base en *Google Earth*.

1.2. Vulnerabilidad y presiones antropogénicas del acuífero

Dada la escasa capacidad de atenuación natural del subsuelo kárstico, el acuífero de Yucatán es altamente vulnerable a la contaminación. La infiltración rápida a través de suelos delgados y kársticamente fisurados facilita la entrada de contaminantes desde la superficie hasta el agua subterránea con mínima filtración o retardo ([Moreno-Gómez et al.,

2022]). Diversos estudios han señalado que las prácticas humanas en la península están poniendo creciente presión sobre la calidad del agua subterránea ([Bauer-Gottwein et al., 2011, Narváez-Montoya et al., 2025]). En las últimas décadas, el acelerado crecimiento demográfico y económico de la región (particularmente la expansión urbana de ciudades como Mérida y la intensa actividad turística e industrial en la zona costera de Yucatán) ha resultado en un incremento notable de las cargas contaminantes al acuífero ([Bauer-Gottwein et al., 2011]). Gran parte de la población rural y periurbana de Yucatán dispone de sistemas in situ para el manejo del agua y los residuos: pozos someros, cenotes empleados como sumideros, fosas sépticas rudimentarias, etc. ([Narváez-Montoya et al., 2025]). Estas prácticas conllevan la descarga directa de aguas residuales domésticas al subsuelo, aportando nutrientes (nitratos, fosfatos), microorganismos patógenos y diversos compuestos orgánicos al agua subterránea. Estudios recientes de calidad de agua en la península reportan que aproximadamente el 23 % de las muestras de pozos y cenotes presentan concentraciones de nitratos y sulfatos por encima de los límites aceptables para consumo humano ([Narváez-Montoya et al., 2025]). La presencia de nitratos, en particular, ha sido ampliamente documentada como uno de los problemas crónicos del acuífero yucateco, atribuible a la mezcla de descargas urbanas, agrícolas (fertilizantes) y pecuarias ([Pérez-Ceballos et al., 2021]). Este fenómeno es alarmante dado que el acuífero es la principal (y prácticamente única) fuente de agua potable para más de cinco millones de habitantes ([Narváez-Montoya et al., 2025]). Otro factor de vulnerabilidad importante es la intrusión salina de origen marino. Debido a la extracción de agua subterránea en zonas costeras y a la dinámica natural de interfase, se han detectado procesos de salinización en extensas áreas del acuífero costero ([Bauer-Gottwein et al., 2011]). El avance del frente salino tierra adentro representa un riesgo para la disponibilidad de agua dulce, especialmente en épocas de sequía o bajo escenarios de sobreexplotación localizada. Por ejemplo, en la ruta de flujo subterráneo que descarga hacia Celestún (costa occidental), se ha observado influencia marina en la hidroquímica del agua dulce, lo cual podría agravar la calidad del recurso hídrico en esa zona ([Pérez-Ceballos et al., 2021]). Adicionalmente, en la porción sur de la península, la disolución de niveles de yeso y la formación de cuencas endorreicas (depresiones conocidas como *poljes*) indican una susceptibilidad natural a acumulación de

sales y posibles contaminantes en cuerpos de agua subterránea semi-confinados [Narváez-Montoya et al., 2025]. La combinación de alta permeabilidad, poca retención natural de contaminantes y un acuífero freático somero implica que cualquier contaminante vertido al medio ambiente (ya sea por drenajes urbanos, lixiviados de basureros, derrames industriales o agroquímicos) puede incorporarse rápidamente al agua subterránea. Se han elaborado mapas de vulnerabilidad intrínseca del acuífero yucateco utilizando diversos métodos (e.g., DRASTIC y enfoques específicos para karst), los cuales consistentemente clasifican a la mayor parte de la plataforma de Yucatán con vulnerabilidad alta a extrema ([Moreno-Gómez et al., 2022]). Esta información resulta crucial para la gestión del recurso hídrico, puesto que permite identificar zonas prioritarias para la protección, monitoreo y saneamiento. Sin embargo, los desafíos para la gestión sostenible del acuífero son considerables: la demanda de agua continúa en aumento, la cobertura de alcantarillado y tratamiento de aguas residuales sigue siendo insuficiente en muchas comunidades, y los cambios en el uso de suelo (urbanización, agricultura intensiva) incrementan la carga de contaminantes difusos. Adicionalmente, eventos hidrometeorológicos extremos asociados al cambio climático (p. ej., huracanes, inundaciones, sequías prolongadas) pueden alterar los patrones de recarga y dispersar aún más los contaminantes acumulados en el suelo hacia el acuífero. Por estas razones, múltiples autores destacan la necesidad de fortalecer el monitoreo hidrogeológico y la modelación del flujo subterráneo en Yucatán, como herramientas para anticipar problemas y evaluar estrategias de manejo del agua ([Narváez-Montoya et al., 2025, **?**]). En particular, la estimación de la vulnerabilidad específica a distintos contaminantes y la elaboración de escenarios de gestión, por ejemplo, ubicaciones óptimas para nuevas extracciones o zonas de protección, requieren de modelos hidrogeológicos confiables que representen adecuadamente la dinámica del sistema acuífero.

1.3. Antecedentes de la modelación del flujo subterráneo en Yucatán

La modelación numérica del flujo de agua subterránea es una herramienta fundamental para comprender y predecir el comportamiento de los acuíferos, especialmente en sistemas tan complejos como los kársticos. En el caso del acuífero del estado de Yucatán, los primeros esfuerzos de modelación a escala regional surgieron a inicios de la década de 2000. Destaca el trabajo de [González-Herrera et al., 2002], quienes desarrollaron un modelo de flujo estacionario para la Península de Yucatán utilizando el código numérico AQUIFER [González-Herrera et al., 2002]. En dicho estudio pionero, se representó al acuífero como un medio poroso equivalente y se calibró el modelo contra niveles piezométricos observados, explorando varias hipótesis sobre la hidráulica del sistema kárstico. Los resultados de esa modelación confirmaron, entre otros aspectos, que: (1) las formaciones kársticas (conductos, cenotes, fracturas) juegan un papel crítico en la configuración del flujo subterráneo regional; (2) existe efectivamente una "corona" de alta transmisividad asociada al Anillo de Cenotes, la cual canaliza gran parte del flujo hacia la costa; y (3) las condiciones geológicas particulares del extremo sur de la península (como la presencia de rocas menos permeables en profundidad así como su mayor elevación) influyen en la redistribución de la recarga y la dirección de los flujos [González-Herrera et al., 2002]. Además, este modelo permitió estimar que, a escala regional, el sistema acuífero de Yucatán no mostraba signos de sobreexplotación en ese momento: a pesar del creciente número de pozos de bombeo registrados, el volumen total extraído resultaba pequeño en comparación con la recarga anual, por lo que no se observaban abatimientos significativos en el nivel freático regional [González-Herrera et al., 2002]. Este hallazgo sugería una considerable capacidad de recuperación y amortiguamiento del acuífero ante las extracciones históricas, atribuible en gran medida a sáulica y exteu alta conductividad hidrnsa capacidad de almacenamiento. Subsecuentemente, otros trabajos han aportado conocimientos complementarios a la hidrogeología de la península, aunque los estudios de modelación numérica integral han sido relativamente escasos. Se ha realizado una revisión exhaustiva del estado del conocimiento del acuífero kárstico de Yucatán, identificando los principales retos para la investigación hidrogeoló-

gica y la gestión del agua subterránea [Bauer-Gottwein et al., 2011]. Entre dichos retos, destacan la necesidad de incorporar en los modelos la naturaleza dual porosa-conducto del flujo kárstico, la mejora en la estimación de la recarga distribuida y la comprensión de la interacción agua dulce–agua salada bajo diferentes escenarios [Bauer-Gottwein et al., 2011]. Por otro lado, estudios locales en la zona oriental (Quintana Roo) han investigado la dinámica de flujo en sistemas de cuevas costeras y la conexión hidráulica entre cenotes y el mar, proporcionando datos valiosos para la calibración de modelos de intrusión salina. En la región sureste, Gondwe et al. [2010] combinaron mediciones de niveles freáticos, análisis geoquímicos, métodos geofísicos y teledetección para delinear unidades hidrogeológicas en la cuenca del sistema kárstico asociado a la Reserva de Sian Ka'an ([Bauer-Gottwein et al., 2011]). Sus hallazgos reforzaron la noción de compartimentos hidrológicos controlados por la geología (áreas "altas" de baja permeabilidad vs. llanuras de alta permeabilidad) e incluso identificaron la posible firma estratigráfica del material de impacto de Chicxulub (capas someras con alta conductividad eléctrica y radiación natural) extendida por amplias zonas [Bauer-Gottwein et al., 2011]. Información como esta es valiosa para refinar los modelos conceptuales previos y ajustar la parametrización espacial de futuros modelos numéricos. En años más recientes, se ha intentado abordar la complejidad kárstica mediante enfoques de modelación mejorados. Por ejemplo, se han implementado modelos de transporte de solutos acoplados al flujo para estimar tiempos de tránsito de contaminantes, lo cual ayuda a evaluar la vulnerabilidad específica del acuífero a sustancias como los nitratos [Martínez-Salvador et al., 2019]. Asimismo, se desarrolló un índice integrado de vulnerabilidad del acuífero kárstico (IKAV, por sus siglas en inglés) que combina resultados de modelación de flujo y transporte con metodologías clásicas de índices, aplicado por primera vez en la Península de Yucatán [Moreno-Gómez et al., 2022]. Esta aplicación mostró que es factible reducir la subjetividad en la cartografía de vulnerabilidad al incorporar criterios basados en la física de flujo subterráneo y en la migración real de contaminantes [Moreno-Gómez et al., 2022]. Estos avances metodológicos, junto con la disponibilidad creciente de herramientas de modelación de código abierto, abren la puerta para realizar simulaciones más detalladas y explorar múltiples escenarios de gestión del agua subterránea en Yucatán. No obstante, persisten importantes incertidumbres. La heterogeneidad espacial de las propie-

dades hidráulicas, la escasez de datos de campo (p.ej. series largas de niveles estáticos, caudales de manantiales o descargas submarinas) y la dificultad de representar explícitamente los conductos kársticos suponen desafíos en la construcción de modelos confiables. Por ello, las investigaciones actuales apuntan tanto a recabar datos hidrogeológicos adicionales (mediante exploración geofísica, trazadores, redes de monitoreo, etc.) como a emplear modelos numéricos flexibles que permitan ajustar y validar diversas conceptualizaciones del sistema. En particular, la plataforma MODFLOW del Servicio Geológico de EE.UU. se ha consolidado como el estándar para la simulación de flujo subterráneo en medios porosos, y ha sido adoptada en numerosos estudios por su robustez numérica y versatilidad para incorporar condiciones de contorno complejas (interacción con el mar, recarga variable, pozos, etc.). Para el caso de medios kársticos, MODFLOW puede utilizarse bajo el enfoque de medio equivalente, calibrando los parámetros efectivos para reproducir observaciones (Langevin et al. [2017]). Adicionalmente, herramientas modernas como FloPy Bakker et al. [2016] (una biblioteca Python de código abierto) facilitan la construcción, ejecución y análisis de modelos MODFLOW de manera eficiente, permitiendo automatizar procesos de calibración, validación y análisis de sensibilidad.

1.4. Objetivo de la investigación

Considerando lo anterior descrito, el objetivo general de esta tesis es desarrollar y aplicar un modelo numérico en estado estacionario de flujo de agua subterránea para el acuífero kárstico del estado de Yucatán, utilizando MODFLOW 6 mediante FloPy, con el fin de simular su comportamiento hidrogeológico bajo diferentes escenarios de manejo. Este modelo permitirá integrar información geológica, hidrológica y de uso de suelo reciente para recrear el patrón de flujo subterráneo actual y evaluar la respuesta del sistema acuífero ante diversas condiciones (por ejemplo, cambios en la recarga, incrementos en la extracción de agua, o la implementación de medidas de conservación). Se espera que la simulación contribuya a una mejor comprensión del funcionamiento hidrodinámico del acuífero y sirva como una reciente base científica para apoyar la gestión sostenible de los recursos hídricos en el estado de Yucatán. En capítulos posteriores se detallan el desarrollo del

modelo conceptual, la implementación numérica, la calibración con datos disponibles y los experimentos numéricos realizados, así como la discusión de los resultados obtenidos en términos de implicaciones hidrogeológicas y de gestión, asi como la integración de inteligencia artificial mediante el aprendizaje automático para calibración.

Capítulo 2

MARCO TEÓRICO HIDROGEOLÓGICO

El estudio del flujo de agua dentro de un medio poroso a escala microscópica es casi imposible por la complejidad de sus poros. Por ello, se utilizan leyes macroscópicas que tratan al medio como un conjunto con propiedades promedio. Este enfoque se basa en tres parámetros clave: permeabilidad, porosidad y coeficiente de almacenamiento. La pieza central es la Ley de Darcy, establece una relación empírica que permite describir el flujo mediante ecuaciones diferenciales sin necesidad de estudiar cada poro individualmente. En este capítulo, se definiran estos conceptos y se explorara cómo la Ley de Darcy facilita el estudio del flujo subterráneo.

2.1. Conceptos básicos de hidráulica aplicados a la Geohidrología

2.1.1. Características del medio poroso

El comportamiento del flujo subterráneo está condicionado por las propiedades físicas y geométricas del medio geológico. Entre los atributos más críticos para su caracterización se encuentran la homogeneidad y la heterogeneidad, que describen la variación espacial de las propiedades hidráulicas, así como la isotropía y la anisotropía, que refieren a la variabilidad

de dichas propiedades según la dirección del flujo [Fetter, 2001]. A continuación, se definen estos conceptos fundamentales para comprender la dinámica del agua en el subsuelo.

2.1.1.1. Homogeneidad/heterogeneidad

Un medio poroso se llama *homogéneo* cuando sus propiedades (por ejemplo, la conductividad hidráulica K) son constantes en cualquier punto del mismo; si esas propiedades varían de un lugar a otro, el medio es *heterogéneo*. Formalmente, si K es independiente de la posición dentro de la formación, $K(x, y, z) = C$ (constante) y la formación es homogénea, mientras que si K depende de la posición $K(x, y, z) \neq C$, la formación es heterogénea. Estrictamente, todo medio poroso natural (o fracturado) es heterogéneo por naturaleza, ya que siempre existen variaciones espaciales en propiedades como K. Sin embargo, a efectos prácticos suelen considerarse propiedades promedio en ciertos volúmenes representativos; así, un medio localmente heterogéneo puede tratarse como homogéneo a escala macroscópica si las propiedades promediadas en un volumen adecuado alrededor de cada punto no varían significativamente de un lugar a otro. En otras palabras, dependiendo de la escala de estudio, muchas formaciones pueden modelarse como homogéneas equivalentes. Una forma frecuente de heterogeneidad es la *estratificación* (heterogeneidad en capas), ya sea continua o discontinua. En formaciones sedimentarias es común la presencia de capas o lentes de distinta granulometría, como limos arcillosos intercalados con arenas, lo que genera contrastes muy marcados de permeabilidad entre capas adyacentes. Por ejemplo, depósitos alternados de arcilla y arena pueden exhibir contrastes en K de hasta 10 o más órdenes de magnitud. También pueden presentarse heterogeneidades discontinuas asociadas a fracturas, fallas u otras características geológicas de gran escala. En general, el comportamiento de un acuífero frente a un cierto estímulo dependerá del volumen afectado del mismo (escala del fenómeno en comparación con la escala de heterogeneidad).

2.1.1.2. Isotropía/anisotropía

Un medio se denomina hidráulicamente *isótropo* cuando sus propiedades (principalmente la permeabilidad o conductividad hidráulica K) no dependen de la orientación, es decir, son iguales en cualquier dirección considerada. Si en cambio K varía con la dirección de me-

dida, el medio es *anisótropo*. En una formación isotrópica en cierto punto, $K_x = K_y = K_z$ en las tres direcciones del espacio; en una anisótropa, al menos una dirección presenta un valor distinto ($K_x \neq K_y$ o K_z, etc.). Las direcciones a lo largo de las cuales K toma sus valores máximo y mínimo se conocen como *direcciones principales de anisotropía* y son mutuamente perpendiculares. Existe un sistema de ejes coordenados (ejes principales) tal que en esas direcciones el tensor de permeabilidad se diagonaliza, es decir, K presenta componentes sólo en la dirección de cada eje principal (sin términos cruzados). Un medio homogéneo puede ser isótropo o anisótropo; se trata de propiedades conceptualmente independientes. La anisotropía es muy común en terrenos sedimentarios debido a su génesis y a la presencia de intercalaciones de materiales de distinta permeabilidad. En general, la permeabilidad horizontal (paralela a la estratificación) suele ser varias veces mayor que la vertical (perpendicular a la estratificación), salvo en casos donde existan numerosas grietas o diaclasas verticales que aumenten la conductividad vertical. Los terrenos fracturados, por su propia naturaleza, suelen ser altamente anisótropos y a menudo presentan orientaciones preferentes de fracturación (por ejemplo, un sistema de fracturas subparalelas puede conferir mayor permeabilidad en una dirección horizontal específica). Un ejemplo típico es un acuífero en capas horizontales: la conductividad hidráulica equivalente paralela a las capas (K_h) difiere de la equivalente perpendicular a las capas (K_v). En un sistema estratificado compuesto por varias capas horizontales de espesores b_i y permeabilidades k_i, se puede definir una permeabilidad global vertical k_v (perpendicular a la estratificación) cuando el flujo es perpendicular a las capas. La pérdida de carga total Δh es la suma de las pérdidas de carga en cada estrato (de espesor b_i y permeabilidad k_i), y que por todos ellos circula la misma cantidad de agua por unidad de sección q. Del balance de caudales y caídas de carga se obtiene la siguiente relación para la permeabilidad vertical equivalente:

$$\frac{1}{k_v} = \frac{1}{L} \sum \frac{b_i}{k_i} \tag{2.1}$$

donde $L = \sum b_i$ es el espesor total del conjunto de capas. Esta expresión muestra que k_v resulta del promedio armónico de las permeabilidades individuales, ponderado por los espesores. De forma similar, cuando el flujo es horizontal a lo largo de las capas, la

permeabilidad global paralela a la estratificación k_h viene dada por el promedio aritmético ponderado por espesor:

$$k_h = \frac{1}{L} \sum b_i \cdot k_i \tag{2.2}$$

que corresponde a la conductividad equivalente en dirección longitudinal a las capas. En general, siempre se verifica que $k_v \ll k_h$ en medios sedimentarios estratificados, debido a que las capas de baja permeabilidad (por ejemplo arcillas) controlan fuertemente el flujo vertical, mientras que horizontalmente el agua encuentra caminos más permeables a lo largo de las capas porosas.

2.2. Parámetros que caracterizan las condiciones de los acuíferos

Un medio poroso está formado por un agregado de granos sólidos entre los cuales existen espacios vacíos que pueden ser ocupados por un fluido; a estos espacios vacíos se les denomina poros. El medio poroso puede ser *no consolidado* (granos sueltos) o *consolidado* si existe un cemento o cohesión que aglutina las diversas partículas. Si se considera un volumen V de terreno natural, del cual V_p corresponde al volumen de poros y $V_m = V - V_p$ al material sólido, la *porosidad total* n se define como la fracción del volumen total que representan los poros:

$$n = \frac{V_p}{V} \tag{2.3}$$

adimensional que a menudo se expresa en porcentaje. En la práctica, las rocas sin fracturamiento o con carsticidad considerable, tienen porosidades más bajas que los suelos; por ejemplo, gravas, arenas y limos (partículas gruesas) típicamente presentan porosidades menores que los suelos ricos en arcilla de grano fino. Depósitos bien seleccionados (granulometría uniforme) suelen tener porosidades mayores que depósitos mal seleccionados (granulometría variable) debido a que en estos últimos los granos más pequeños rellenan los huecos entre los mayores. Valores típicos de porosidad van desde $n \approx 0.25$ a 0.50 en

arenas y arcillas, alrededor de 0.10 a 0.20 en gravas, y menores al 5–10 % en muchas rocas consolidadas muy cementadas o cristalinas (aunque fracturas o disoluciones pueden otorgarles porosidad secundaria apreciable). No todos los poros contribuyen de igual forma al almacenamiento y al flujo de agua. Existen poros interconectados formando una red a través de la cual el agua puede circular libremente, mientras que otros poros pueden estar aislados (cerrados) reteniendo agua confinada que no participa del flujo. También hay poros de cuello estrecho o semi-cerrados, a través de los cuales el agua circula con dificultad y lentitud (los intercambios con el exterior se realizan principalmente por difusión). En los estudios del movimiento del agua subterránea sólo importan los poros interconectados (y en menor medida los semi-cerrados). Así surge el concepto de *porosidad efectiva* n_e, definida como la fracción del volumen total correspondiente únicamente a los poros que están interconectados y accesibles al flujo:

$$n_e = \frac{V_e}{V} \tag{2.4}$$

donde V_e es el volumen de poros efectivamente comunicados. La porosidad efectiva es siempre menor o igual que la porosidad total. Por ejemplo, las arcillas pueden tener porosidad total alta (>50 %), pero gran parte del agua está fuertemente adsorbida a las partículas o en microporos desconectados que no drenan fácilmente; su porosidad efectiva (o *porosidad de drenaje*) es mucho menor. En hidrogeología, n_e es el valor relevante para estimar cuánta agua puede moverse a través de la formación. También es útil distinguir entre *porosidad primaria* y *porosidad secundaria*. La porosidad primaria es aquella inherente a la roca o suelo en el momento de su formación, debida al espacio entre granos en sedimentos o al espacio intercristalino en rocas ígneas o metamórficas originalmente sólidas. La porosidad secundaria, en cambio, se genera por procesos posteriores como la disolución de material (que crea cavidades o *vug porosity*) o el fracturamiento de la roca. Por ejemplo, una caliza puede tener baja porosidad primaria, pero desarrollar porosidad secundaria significativa por disolución kárstica; o una roca ígnea compacta puede ser prácticamente impermeable hasta que fracturas aumentan su porosidad (y especialmente su permeabilidad) secundaria [Freeze and Cherry, 1979].

2.2.1. Porosidad

La *porosidad* es una propiedad física fundamental de los materiales geológicos que expresa la proporción de espacios vacíos o poros existentes dentro de un suelo o roca con respecto a su volumen total. Estos poros pueden estar ocupados por agua, aire u otros fluidos, y constituyen el espacio disponible para el almacenamiento de agua subterránea, Figura 2.1.

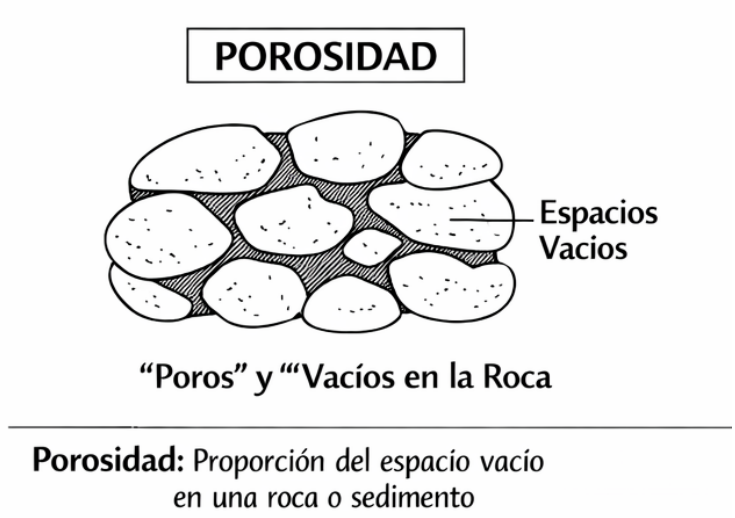


Figura 2.1: Esquema de la porosidad.

Matemáticamente, la porosidad total n se define como la relación entre el volumen de vacíos V_p y el volumen total V del medio:

$$n = \frac{V_p}{V} \tag{2.5}$$

siendo una magnitud adimensional que normalmente se expresa en porcentaje. La porosidad depende de diversos factores, entre ellos el tamaño, forma y distribución de los granos, el grado de compactación, la cementación y la presencia de fracturas o cavidades. En general, los materiales no consolidados, como arenas y limos, suelen presentar porosidades relativamente altas, mientras que las rocas consolidadas y cristalinas muestran porosidades más bajas, salvo cuando han desarrollado fracturas o procesos de disolución. Sin embargo, una porosidad elevada no implica necesariamente una alta capacidad de flujo, ya que también importa la conectividad entre los poros.

Desde el punto de vista hidrogeológico, es importante distinguir entre *porosidad total* y *porosidad efectiva*. La porosidad total incluye todos los vacíos del material, independientemente de si están conectados o no, mientras que la porosidad efectiva n_e considera únicamente aquellos poros interconectados que participan realmente en el movimiento del agua:

$$n_e = \frac{V_e}{V} \tag{2.6}$$

donde V_e representa el volumen de poros hidráulicamente comunicados. Por ello, la porosidad efectiva es el parámetro más relevante en estudios de flujo subterráneo y transporte, ya que controla el volumen de agua que puede desplazarse a través del medio. Por ejemplo, las arcillas pueden presentar una porosidad total elevada, pero una porosidad efectiva reducida debido a la presencia de microporos y agua adsorbida que no drena con facilidad.

También se distingue entre *porosidad primaria* y *porosidad secundaria*. La porosidad primaria es aquella originada durante la formación del material, como los espacios intergranulares en sedimentos o poros intercristalinos en ciertas rocas. En contraste, la porosidad secundaria se desarrolla posteriormente por procesos geológicos como fracturamiento, meteorización o disolución. Este último caso es particularmente importante en medios kársticos, donde la disolución de calizas puede generar conductos, cavernas y cavidades que incrementan notablemente la capacidad de almacenamiento y circulación del agua subterránea.

La porosidad puede determinarse mediante métodos directos e indirectos. En laboratorio, suele estimarse a partir de mediciones de densidad aparente y densidad de partículas, o mediante ensayos de saturación y secado en muestras representativas. En campo, puede inferirse a partir de registros geofísicos, ensayos hidráulicos y relaciones empíricas con otras propiedades del medio. Aunque la porosidad es esencial para cuantificar la capacidad de almacenamiento del acuífero, debe analizarse conjuntamente con la permeabilidad y la conductividad hidráulica, ya que un material puede almacenar grandes volúmenes de agua pero transmitirla con mucha dificultad si sus poros no están adecuadamente conectados.

2.2.2. Permeabilidad

La *permeabilidad* es la capacidad que tiene un material de permitir que un fluido lo atraviese sin alterar su composición. Un material se considera permeable si deja pasar una cantidad apreciable de fluido en un tiempo dado, mientras que se considera impermeable si la cantidad de fluido que pasa es despreciable 2.2.

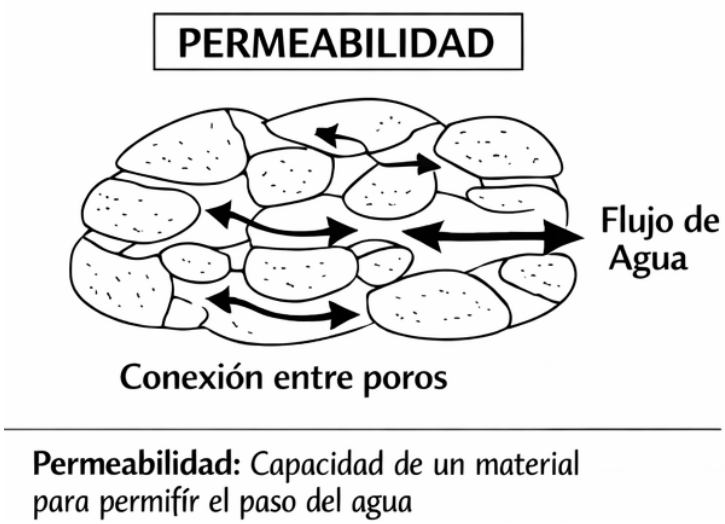


Figura 2.2: Esquema de la permeabilidad

La permeabilidad depende de varios factores, como la porosidad del material, el tamaño y la conectividad de los poros, la presión del fluido y la estructura (textura) del suelo o roca. Por ejemplo, una arena bien seleccionada, con poros grandes y conectados será más permeable que una arcilla, la cual aunque tenga alta porosidad total posee poros muy pequeños que ofrecen resistencia al flujo. En el contexto hidrogeológico, suele distinguirse entre la *conductividad hidráulica* K y la *permeabilidad intrínseca* k. La conductividad hidráulica K (también llamada coeficiente de permeabilidad) es el parámetro macroscópico que aparece en la ley de Darcy y mide la facilidad con la que el agua (u otro fluido específico) atraviesa el medio poroso. K tiene unidades de velocidad (por ejemplo m/s) y depende tanto de las propiedades del medio (tamaño de poros, conectividad, etc.) como del propio fluido, en particular de su densidad ρ y viscosidad dinámica μ. Por su parte, la permeabilidad intrínseca k es una propiedad del esqueleto poroso que mide la facilidad geométrica de paso de fluidos, independiente de qué fluido sea. Matemáticamente, ambas

están relacionadas por:

$$K = \frac{\rho g}{\mu} k \tag{2.7}$$

donde ρg es el peso específico del fluido (en $\mathrm{N/m^3}$) y μ su viscosidad dinámica (Pa·s). k se suele expresar en unidades de área ($\mathrm{m^2}$ en el SI, o la unidad tradicional *darcy*, donde 1 darcy $\approx 9.87 \times 10^{-13}$ $\mathrm{m^2}$). Así, un mismo medio poroso tendrá diferente K para agua que para petróleo, por ejemplo, pero su k intrínseca será la misma. Existen diversos métodos para estimar la conductividad hidráulica de un acuífero, tanto a nivel de laboratorio como in situ. En laboratorio, se emplean ensayos de permeabilidad en columnas o permeámetros, ya sea de carga constante (para materiales muy permeables, midiendo directamente el caudal bajo una diferencia de carga fija) o de carga variable (para materiales menos permeables, midiendo la tasa de descenso del nivel de agua en un tubo conectado a la muestra). En campo, las propiedades hidráulicas se pueden inferir mediante ensayos de bombeo en pozos (pruebas de bombeo) analizando los descensos del nivel en función del tiempo y la distancia, lo que permite calcular la transmisividad y la conductividad hidráulica promedio del acuífero. También se emplean pruebas puntuales como *slug tests* (perturbaciones instantáneas del nivel en un piezómetro) para estimar K localmente, o ensayos de infiltración en superficie, entre otros. Estos métodos de campo complementan las mediciones de laboratorio, ya que el valor de K puede variar espacialmente y es sensible a la escala y la estructura de heterogeneidades del medio. En suelos o rocas estratificadas, la permeabilidad total del sistema depende de las permeabilidades de las capas individuales y de cómo fluye el agua a través de ellas. Como se vio en la Sección anterior, la conductividad equivalente horizontal K_h en un sistema multicapa es el promedio ponderado por espesor de las K_i de cada capa (Ec. 2.2), mientras que la conductividad equivalente vertical K_v viene dada por el promedio armónico (Ec. 2.1). Esto refleja que una capa muy impermeable "gobierna" el flujo vertical aunque sea delgada, mientras que horizontalmente las capas más permeables dominan el flujo conjunto.

2.2.3. Coeficiente de almacenamiento

Cuando se extrae o incorpora agua en un acuífero (por ejemplo, mediante el bombeo de un pozo o la recarga natural), el nivel piezométrico cambia y el acuífero libera o almacena agua. La cantidad de agua que un acuífero puede liberar o almacenar por cambio de carga hidráulica se caracteriza mediante parámetros de almacenamiento. En un acuífero **confinado**, al bajar la presión del agua en los poros (disminución de carga hidráulica h) el acuífero libera agua de dos maneras: (1) por *compresión del esqueleto de la formación* (los granos se reacomodan ligeramente reduciendo la porosidad), y (2) por *expansión del agua* en los poros al aliviarse la presión de confinamiento. Estos mecanismos son generalmente pequeños pero finitos, y hacen que incluso un acuífero confinado (donde no desciende un nivel freático) ceda cierta cantidad de agua cuando cae su presión. Se define el *almacenamiento específico* S_s de un acuífero saturado confinado como el volumen de agua que libera una unidad de volumen de acuífero por una caída unitaria de carga hidráulica. Sus unidades son $[\mathrm{L}]^{-1}$, ya que representa una fracción de volumen por unidad de descenso de nivel. S_s depende de la compresibilidad de la matriz del acuífero (usualmente denotada α, inverso del módulo de elasticidad volumétrica) y de la compresibilidad del propio fluido β. En efecto, puede demostrarse que

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta) \tag{2.8}$$

que suma las contribuciones del acuífero (reducción de volumen de poros) y del agua (aumento de volumen específico). Típicamente α (compresibilidad de la matriz) domina en materiales arcillosos, mientras que en arenas granulares α y β son del mismo orden de magnitud; en cualquier caso, S_s suele ser un número muy pequeño (del orden de 10^{-5} a 10^{-3} m^{-1}). El *coeficiente de almacenamiento* S de un acuífero confinado de espesor b se define como el volumen de agua que el acuífero libera (o almacena) por unidad de área superficial por una disminución unitaria de carga hidráulica. En un medio confinado, al no haber superficie libre que descienda, S viene dado simplemente por $S = S_s \cdot b$. Este parámetro adimensional suele tomar valores muy bajos: típicamente S para acuíferos confinados varía entre 5×10^{-3} y 5×10^{-5} (es decir, apenas unas milésimas o décimas de porcentaje de agua

liberada por metro de descenso por metro cuadrado de área). Esto implica que para extraer volúmenes importantes de agua de un acuífero confinado se requieren descensos de presión en áreas muy extensas. En un acuífero **no confinado** (libre), la situación es distinta ya que al extraer agua el nivel freático desciende dentro del propio acuífero, drenando poros que antes estaban saturados. La mayor parte del agua proviene entonces del vaciado por gravedad de esos poros, más que de la compresibilidad. Se define el *rendimiento específico* S_y (también llamado *coeficiente de almacenamiento libre*) como el volumen de agua que un acuífero no confinado libera del almacenamiento por unidad de área cuando el nivel freático desciende una unidad de altura. En esencia, S_y equivale a la porosidad efectiva de drenaje del acuífero. Por ejemplo, si $S_y = 0.20$ significa que un descenso de 1 m del nivel freático libera un volumen de agua de 0.20 m^3 por cada m^2 de área (lo cual sugiere que el 20 % del volumen del acuífero corresponde a poros que efectivamente drenan). El rendimiento específico es considerablemente mayor que el coeficiente S de un acuífero confinado, típicamente encontrándose en el rango 0.01–0.30 (1 % a 30 %), según la litología (los valores más altos corresponden a arenas y gravas limpias, y los más bajos a limos finos que retienen parte del agua por capilaridad). En muchos problemas prácticos, para un acuífero libre se toma $S \approx S_y$ puesto que la pequeña contribución de la compresibilidad es despreciable comparada al drenaje gravitacional.

2.2.4. Nivel de Agua Freática (NAF)

El agua en el medio sub-superficial puede presentarse en fases líquida, sólida o gaseosa, coexistiendo con el aire dentro del espacio poral. Hidrológicamente, el subsuelo se divide en dos regiones principales: la **zona saturada**, donde los poros están completamente ocupados por el fluido, y la **zona no saturada** (o zona vadosa), caracterizada por la presencia simultánea de agua y aire. Ambas regiones están delimitadas por una superficie de transición denominada *nivel freático* (Figura 2.3). Desde una perspectiva física, la presión del fluido (p) en la zona saturada es superior a la atmosférica (p_{atm}) debido a la carga hidrostática del agua suprayacente. Por definición, el **nivel freático** es la superficie donde la presión del agua en los poros es exactamente igual a la presión atmosférica; es decir, donde la presión manométrica es nula ($p = 0$). Inmediatamente por debajo de este límite, el

medio alcanza la saturación total a presión atmosférica. En términos prácticos, la ubicación del nivel freático se identifica mediante la medición del nivel estático del agua en pozos de observación o piezómetros abiertos a la zona saturada. Su morfología suele ser una réplica atenuada de la topografía superficial, elevándose bajo las colinas y deprimiéndose en los valles. Esta relación está condicionada por el clima local: en regiones húmedas, el nivel suele ser somero y sigue la topografía del terreno; en regiones áridas, tiende a ser profundo y presenta un relieve más plano. Es importante señalar la existencia de la **franja capilar** inmediatamente por encima del nivel freático. En esta zona, el agua asciende por tensión superficial, manteniendo la saturación en poros pequeños bajo presiones negativas (succión). La magnitud de este ascenso varía según la granulometría del medio, desde unos pocos centímetros en arenas gruesas hasta varios metros en limos y arcillas. No obstante, para efectos del presente capítulo, se adoptará la simplificación de despreciar las fuerzas capilares. Por lo tanto, se definirá el límite entre la zona saturada y la no saturada estrictamente por el nivel freático, asumiendo que en dicha superficie $p = p_{\text{atm}}$. Bajo este esquema, por encima del nivel freático el agua se encuentra retenida únicamente por fuerzas de succión en un estado no saturado.

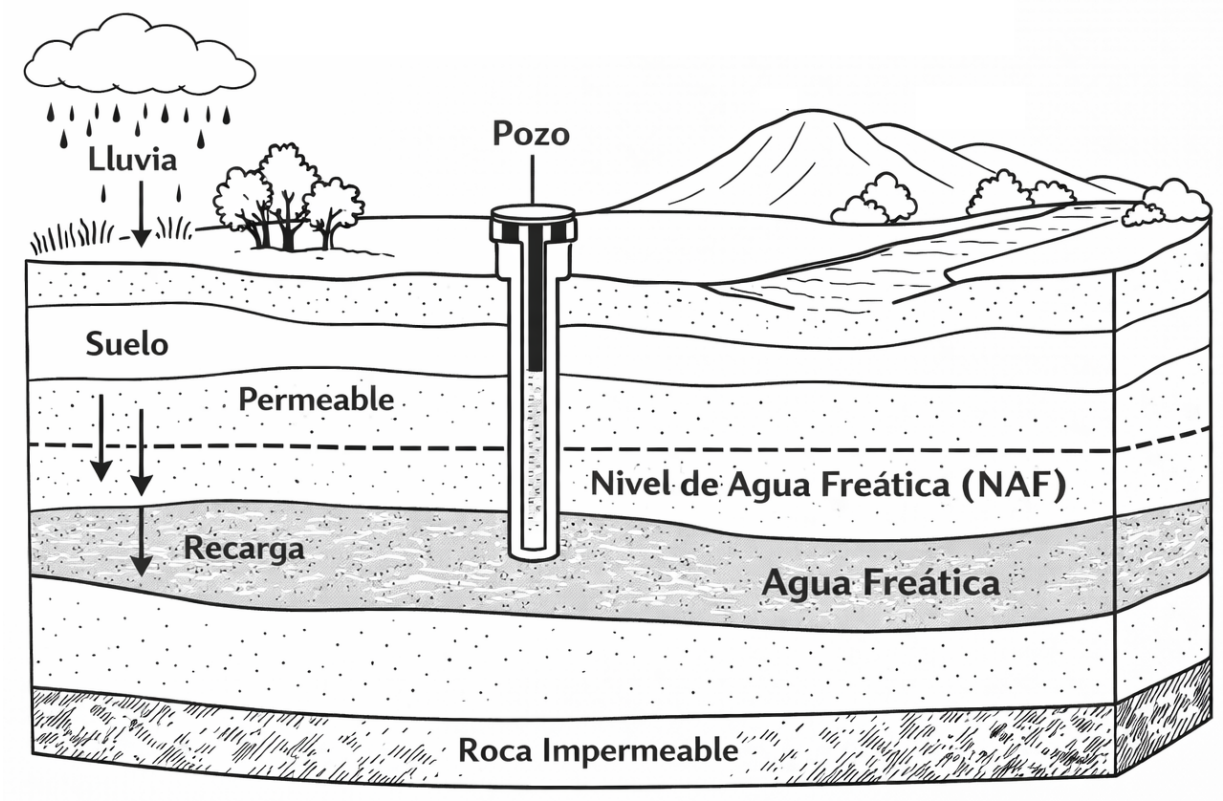


Figura 2.3: Esquema de representación del Nivel de Aguas Freáticas (NAF).

2.2.5. Carga hidráulica y gradiente de flujo

A escala microscópica, el agua se desplaza a través del medio poroso con una velocidad variable que depende de la geometría y tortuosidad de los poros. No obstante, al considerar un Volumen Elemental Representativo (VER), es posible definir una velocidad macroscópica denominada **velocidad de flujo**, *velocidad de filtración* o **velocidad de Darcy** (v).

Es fundamental notar que v representa un caudal por unidad de área de sección transversal (L/T) y no corresponde a la velocidad física real del fluido. La **velocidad lineal media** o velocidad real (v_s) se relaciona con la de Darcy mediante la porosidad efectiva (n_e):

$$v_s = \frac{v}{n_e} \tag{2.9}$$

Dado que el flujo se restringe únicamente a los poros interconectados, la velocidad real

v_s es siempre mayor que v, cumpliendo así con el principio de conservación de la masa.

En cualquier punto de un medio saturado existe una presión de fluido p. Si se instala un piezómetro en dicho punto, el agua ascenderá hasta una altura l donde el peso de la columna equilibre la presión local. Bajo condiciones de equilibrio hidrostático, esta relación se expresa como:

$$l = \frac{p}{\gamma} \tag{2.10}$$

donde $\gamma = \rho g$ es el peso específico del fluido. La magnitud l se denomina **altura de presión** o carga de presión. Al referenciar esta medida respecto a un plano horizontal o *datum* arbitrario, se define la **carga hidráulica total** (h):

$$h = z + \frac{p}{\gamma} \tag{2.11}$$

donde z es la elevación o cota del punto de medición. La carga h representa la energía potencial total por unidad de peso de fluido, posee dimensiones de longitud $[L]$ y se expresa comúnmente en metros de columna de agua (m.c.a.).

En un sistema en reposo, h permanece constante en todo el medio. Sin embargo, ante la presencia de flujo, h varía espacialmente: el agua subterránea se desplaza desde puntos de mayor carga hidráulica hacia puntos de menor carga. Es un error frecuente asumir que el flujo sigue el gradiente de presión; en realidad, el agua puede fluir de zonas de baja presión a alta presión si el gradiente de elevación es suficiente para que la carga total h disminuya en el sentido del movimiento.

El motor del flujo es el **gradiente hidráulico** (i), que se define como la tasa de cambio espacial de la carga hidráulica. Matemáticamente, se expresa como el gradiente negativo de h para indicar la dirección del flujo hacia potenciales menores:

$$i = -\frac{dh}{ds} = -\nabla h \tag{2.12}$$

Este parámetro es adimensional y, en acuíferos regionales, suele presentar valores pequeños (entre 10^{-3} y 10^{-2}), aunque puede incrementarse significativamente cerca de zonas de descarga o pozos de bombeo.

Finalmente, al aplicar la ecuación de Bernoulli entre dos puntos A y B a lo largo de una línea de flujo:

$$\frac{p_A}{\gamma} + z_A + \frac{v_A^2}{2g} = \frac{p_B}{\gamma} + z_B + \frac{v_B^2}{2g} + \Delta h \tag{2.13}$$

En medios porosos, la velocidad real es lo suficientemente baja como para que el término de energía cinética ($v^2/2g$) sea despreciable. Así, la ecuación se simplifica a:

$$\frac{p_A}{\gamma} + z_A = \frac{p_B}{\gamma} + z_B + \Delta h \tag{2.14}$$

donde Δh representa la pérdida de carga debida a la disipación de energía por fricción viscosa en el medio. En consecuencia, la carga hidráulica h definida en la Ec. (2.11) es la variable de estado que gobierna la dinámica del flujo subterráneo.

2.2.6. Ley de Darcy

La disipación de energía o pérdida de carga (Δh) que ocurre en un flujo laminar a través de un medio poroso se cuantifica mediante la **Ley de Darcy**. Este principio fundamental, enunciado por Henry Darcy en 1856 tras sus experimentos en columnas de arena, establece que la velocidad de flujo es directamente proporcional al gradiente hidráulico y a la capacidad de conducción del medio.

En su forma diferencial, la ley se expresa como:

$$v = K \cdot i = -K\frac{dh}{ds} \tag{2.15}$$

donde v es la velocidad de Darcy, i es el gradiente hidráulico y K representa la **conductividad hidráulica** (o coeficiente de Darcy). El signo negativo en la ecuación indica que el flujo se desplaza en el sentido de la carga decreciente. Para un flujo unidireccional a través de una sección transversal de área A, el caudal volumétrico Q se define como:

$$Q = v \cdot A = K \cdot A \cdot \frac{\Delta h}{L} \tag{2.16}$$

Esta relación lineal implica que, bajo condiciones constantes, el caudal es directamente

proporcional al gradiente. Desde una perspectiva macroscópica, la Ley de Darcy trata al medio como un *continuo*, representando el comportamiento promedio del sistema sin necesidad de resolver la compleja física en el interior de cada poro individual.

La validez de esta ley está sujeta a regímenes de flujo laminar y gradientes moderados. En medios de alta energía (como gravas gruesas o fracturas abiertas), las fuerzas inerciales generan turbulencias que rompen la linealidad de la ecuación, requiriendo ajustes como la *Ley de Forchheimer*. Por el contrario, en materiales de grano muy fino (arcillas), las fuerzas de adhesión electroquímica pueden impedir el flujo ante gradientes extremadamente bajos, generando un umbral crítico de activación.

Asimismo, en condiciones de flujo no saturado, la conductividad hidráulica deja de ser una constante del medio y se convierte en una función dependiente del contenido de agua o de la presión de succión de la matriz.

2.2.6.1. Conductividad hidráulica y permeabilidad intrínseca

La conductividad hidráulica K depende tanto de las propiedades geométricas del medio (tamaño de poro, tortuosidad y conectividad) como de las propiedades físicas del fluido (densidad ρ y viscosidad dinámica μ). Mientras que las gravas limpias presentan valores de K elevados (10^{-3} a 10^{-1} m/s), las arcillas poseen valores mínimos debido al reducido diámetro de sus poros, a pesar de su alta porosidad total.

Para aislar las características exclusivas de la matriz sólida, se define la **permeabilidad intrínseca** (k), cuya relación con la conductividad hidráulica es:

$$k = K\frac{\mu}{\rho g} \tag{2.17}$$

La unidad de medida para k en el Sistema Internacional es el m^2, aunque en diferentes practicas frecuentemente se emplea el *darcy*. Los materiales geológicos exhiben un rango de permeabilidad sumamente amplio, variando desde 10^{-9} m^2 en gravas limpias hasta 10^{-16} m^2 o menores en arcillas compactas [Freeze and Cherry, 1979].

2.3. Sistemas de flujo subterráneo

2.3.1. Ecuación de conservación de la masa

El tratamiento matemático del flujo de agua subterránea requiere de una ecuación que exprese la conservación de la masa. Este principio se basa en un balance de continuidad dentro de un volumen de control diferencial (cubo elemental de lados $\Delta x, \Delta y, \Delta z$), Figura 2.4:

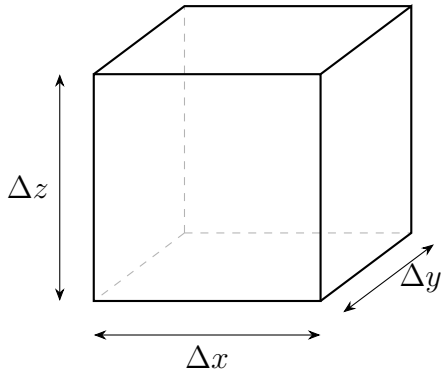


Figura 2.4: Cubo diferencial elemental.

El principio es (Figura 2.5):

Flujo de masa entrante − Flujo de masa saliente = Tasa de cambio de la masa almacenada

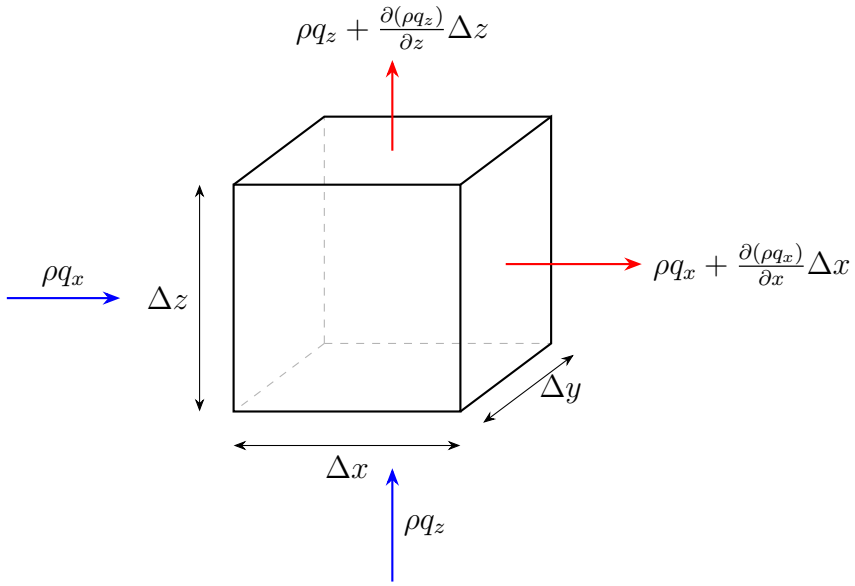


Figura 2.5: Balance de masa en un elemento diferencial de volumen (REV).

El flujo de masa que ingresa por la cara normal al eje x por unidad de tiempo se define como:

$$M_{in,x} = \rho_w q_x \Delta y \Delta z \tag{2.18}$$

donde ρ_w es la densidad del agua y q_x es el flujo específico de Darcy. Mediante una expansión en serie de Taylor, la masa que sale por la cara opuesta de ese mismo eje se expresa como:

$$M_{out,x} = \left[\rho_w q_x + \frac{\partial(\rho_w q_x)}{\partial x}\Delta x\right] \Delta y \Delta z \tag{2.19}$$

El flujo neto de salida en la dirección x es la diferencia entre (2.19) y (2.18). Al sumar las contribuciones de las tres dimensiones y simplificar, se obtiene la pérdida neta de masa por unidad de tiempo:

$$-\left[\frac{\partial(\rho_w q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_w q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_w q_z)}{\partial z}\right] \Delta x \Delta y \Delta z \tag{2.20}$$

Por otro lado, la masa almacenada en el volumen V es $\rho_w n V$ (donde n es la porosidad). Su variación temporal se expresa como:

$$\frac{\partial(\rho_w n)}{\partial t}\Delta x \Delta y \Delta z \tag{2.21}$$

Igualando (2.20) y (2.21), y asumiendo que la densidad del agua es espacialmente uniforme, se obtiene la ecuación de continuidad:

$$-\left(\frac{\partial q_x}{\partial x}+\frac{\partial q_y}{\partial y}+\frac{\partial q_z}{\partial z}\right)=\frac{1}{\rho_w}\frac{\partial(\rho_w n)}{\partial t} \tag{2.22}$$

2.3.2. Ecuación general del flujo de agua subterránea

Para obtener la ecuación fundamental que gobierna el flujo, se sustituye la Ley de Darcy ($q_i=-K_i\frac{\partial h}{\partial i}$) en la ecuación de continuidad (2.22). El término de almacenamiento de la derecha se redefine mediante el **almacenamiento específico** (S_s), que integra la compresibilidad del agua y de la matriz rocosa:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial h}{\partial z}\right)=S_s\frac{\partial h}{\partial t} \tag{2.23}$$

La Ec. (2.23) es la **ecuación diferencial de flujo** para un medio anisotrópico y heterogéneo. Si el medio es homogéneo e isotrópico ($K_x=K_y=K_z=K$), la ecuación se simplifica a:

$$\nabla^2 h=\frac{S_s}{K}\frac{\partial h}{\partial t} \tag{2.24}$$

En condiciones de **régimen estacionario** ($\partial h/\partial t=0$), la expresión se reduce a la **Ecuación de Laplace**:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial z^2}=0 \tag{2.25}$$

Esta última representa la base para el trazado de redes de flujo y el análisis de sistemas regionales [Tóth, 2000, Freeze and Cherry, 1979].

2.4. Formaciones geológicas subterráneas

2.4.1. Estratos confinantes

Un *estrato confinante* es una unidad geológica que tiene una permeabilidad intrínseca muy baja, típicamente menor de 10^{-2} darcy (aprox. 10^{-14} m^2). En otras palabras, es un estrato prácticamente impermeable a escala regional, que impide el flujo significativo. Este

umbral de 10^{-2} Darcy es algo arbitrario y relativo: depende de las condiciones locales. Por ejemplo, en un área compuesta principalmente por arcillas de 10^{-4} Darcy, una capa de limo con 10^{-2} Darcy podría considerarse bastante permeable (un acuífero pobre) capaz de suministrar agua a un pozo pequeño; mientras que esa misma capa de limo sería vista como "confinante" si está intercalada en un contexto de gravas de 10^{2} Darcys. En general, el agua subterránea sí se mueve a través de los estratos confinantes, pero a velocidades extremadamente lentas; no obstante, en el balance regional pueden transmitir cantidades de agua no despreciables si su extensión de área es grande (fenómeno de fuga). Los estratos confinantes constituyen barreras al flujo transversal, pero pueden ser importantes elementos dentro de un sistema de flujo regional, controlando, por ejemplo, la recarga o descarga vertical entre acuíferos apilados. Clásicamente, las capas confinantes se subdividen en tres categorías según su capacidad de almacenar y transmitir agua: *acuitardos*, *acuícludos* y *acuífugos*. Estas definiciones no siempre se usan rigurosamente, pero resultan útiles para diferenciarlos [Kresic, 2007].

2.4.1.1. Acuífugo

Un *acuífugo* es una unidad geológica absolutamente impermeable, que ni transmite ni almacena cantidades apreciables de agua. Es decir, un acuífugo no contiene poros conectados, o su permeabilidad es extremadamente baja que el flujo es nulo. Ejemplos serían rocas cristalinas muy compactas y sin fracturas (granito sano, cuarcita masiva), o capas gruesas de sal mineral. En la práctica, casi ninguna roca es completamente impermeable, pero este término se reserva para aquellas que pueden considerarse aislantes hidráulicos casi perfectos. Una "roca sana" (no fracturada) de tipo ígneo o metamórfico puede ser vista como acuífugo si no presenta fisuras.

2.4.1.2. Acuitardo

El *acuitardo* es un estrato de baja permeabilidad que puede contener agua (alta porosidad) y también transmitirla, pero tan lentamente que los caudales que fluyen a través de él son muy reducidos. Un acuitardo puede actuar como capa de confinamiento entre acuíferos, permitiendo cierta fuga vertical de agua entre ellos (conocida como *fuga o flujo*

lento de drenaje), pero no cederá agua con facilidad a un pozo que lo penetre directamente. Ejemplos típicos de acuitardos son arcillas, limos o lutitas poco permeables. Por ejemplo, una arcilla puede tener $n > 0.5$ (50 % de su volumen son poros con agua) pero $K \sim 10^{-9}$ m/s: almacena mucha agua pero la libera muy lentamente. Cabe destacar que la distinción entre acuífero y acuitardo depende de la escala y necesidad de explotación. Materiales considerados acuitardos en una región (por no ser aptos para un gran pozo municipal) pueden servir como acuíferos locales en otra (p.ej., para abastecimiento doméstico). En zonas rurales, a veces se obtienen pequeñas cantidades de agua de limos arcillosos o areniscas poco permeables, suficientes para un pozo de finca pero que a escala hidrogeológica siguen clasificando como acuitardo. Por ello, los términos "acuífero" y "acuitardo" no son absolutos sino relativos al contexto de caudal requerido.

2.4.1.3. Acuícludo

Un *acuícludo* es una formación geológica que, aun cuando puede contener agua (poros saturados), no la transmite en cantidades significativas para el flujo regional. En otras palabras, funciona como un almacenamiento prácticamente estancado de agua, sin flujo drenante apreciable. Por su definición original, un acuícludo *encierra* el agua: tiene porosidad pero su permeabilidad es tan baja que impide la circulación del agua a través suyo. Ejemplos serían capas masivas de arcilla muy compacta, lutitas o pizarras fuertemente cementadas: pueden retener agua en sus poros, pero su K es tan bajo (digamos $< 10^{-11}$ m/s) que el agua no fluye más que quizás unos centímetros o metros en siglos. En la práctica, la diferencia entre acuitardo y acuícludo es de grado: un acuícludo sería como un "acuitardo extremo". A veces se define acuícludo como un acuitardo de permeabilidad tan baja que su aporte al flujo es despreciable; la arcilla pura podría considerarse acuícludo, mientras que una arcilla arenosa sería acuitardo.

2.4.2. Acuíferos

Un *acuífero* es una unidad geológica subterránea permeable que puede almacenar y transmitir agua a velocidades suficientemente rápidas para suministrarla en cantidades

útiles a los pozos o manantiales. Etimológicamente proviene del latín *aqua* = agua y *ferre* = llevar, es decir "portador de agua". Un acuífero típicamente tiene una permeabilidad intrínseca del orden de 10^{-2} darcy o mayor, lo que corresponde a conductividades hidráulicas que permiten extraer caudales razonables. Ejemplos de acuíferos: arenas y gravas no consolidadas, areniscas porosas, calizas fisuradas o karstificadas, dolomitas, basaltos fracturados, e incluso rocas metamórficas o ígneas con abundantes fracturas pueden actuar como acuíferos. Lo clave es que puedan suministrar agua a un pozo a una tasa suficiente. En la naturaleza, los acuíferos se presentan bajo diferentes condiciones de confinamiento. Se distinguen principalmente dos tipos fundamentales: acuíferos *libres* (no confinados) y acuíferos *confinados* (artesianos), además de situaciones intermedias o mixtas como los acuíferos *semiconfinados* (también llamados acuíferos cautivos o acuíferos con fuga) [Fitts, 2013].

2.4.2.1. Acuífero libre

Un acuífero *libre* (también denominado no confinado o freático) se define como una unidad hidrogeológica cuyo límite superior corresponde al nivel freático (Figura 2.6). A diferencia de los sistemas confinados, estos no poseen una capa superior de baja permeabilidad; en su lugar, el límite superior es una superficie móvil en equilibrio con la presión atmosférica.

Estos acuíferos suelen ser someros y se desarrollan frecuentemente en depósitos aluviales de arena y grava. Su recarga proviene mayoritariamente de la infiltración vertical a través de la zona no saturada, aunque también pueden recibir aportes por flujo lateral de terrenos adyacentes o, en ciertos contextos, por ascenso desde unidades inferiores a mayor presión.

Al perforar un pozo en este tipo de formación, el nivel estático del agua coincide con la elevación local del nivel freático. Durante el bombeo, el agua se extrae mediante el drenaje directo de los poros, lo que provoca un descenso físico de la superficie freática y la formación de un cono de depresión.

Desde una perspectiva de gestión de recursos, los acuíferos libres poseen una alta capacidad de almacenamiento y entrega de agua. Esto se debe a que su coeficiente de almacenamiento principal es el *rendimiento específico* (S_y), el cual representa la porosidad drenable

por gravedad y es significativamente mayor al almacenamiento elástico (S) característico de los acuíferos confinados.

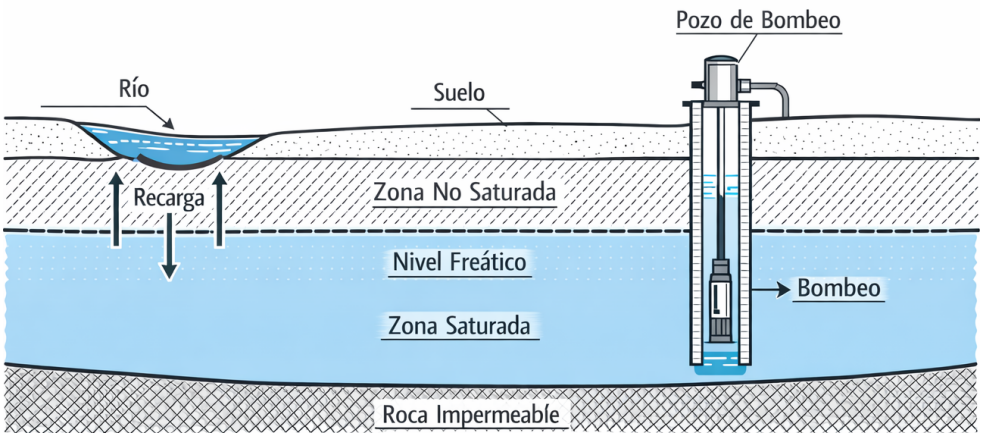


Figura 2.6: Esquema conceptual de un acuífero libre o freático.

2.4.2.2. Acuífero semiconfinado

Un *acuífero semiconfinado* (también denominado *acuífero con fuga* o *semiartesiano*) es un acuífero saturado que está limitado por estratos de permeabilidad intermedia (acuitardos) en uno o ambos lados. Típicamente se refiere a un acuífero confinado cuya capa superior no es un aquícludo perfecto sino un acuitardo que permite algo de flujo vertical. En un acuífero semiconfinado, el agua también se encuentra a presión (como en un confinado), pero la diferencia es que el techo o el muro permiten cierta filtración vertical lenta de agua hacia el acuífero o desde él, Figure 2.7. Imaginemos un acuífero arenoso confinado arriba por una capa semipermeable arcillosa. Inicialmente, la arcilla soporta una diferencia de presión entre el acuífero y la superficie (o el acuífero superior). Si bombeamos el acuífero, la presión en él baja y la arcilla comienza a ceder agua hacia el acuífero (por drenaje lento de la arcilla), fenómeno denominado *fuga inducida* o *recarga*. En este caso, el nivel piezométrico del acuífero semiconfinado desciende, pero puede llegar a un equilibrio donde parte del agua proviene de la descarga elástica (compresibilidad) y parte de la filtración a través del acuitardo que recarga. Si la extracción es moderada y sostenida, el nivel piezométrico podría estabilizarse coincidiendo con el nivel freático en el acuitardo superior, lo cual indicaría un balance dinámico donde la recarga vertical iguala al caudal extraído. Formalmente, un acuífero semiconfinado puede definirse como un acuífero confinado en el

cual al menos uno de sus límites (superior o inferior) es un acuitardo, permitiendo flujo vertical de agua a través suyo. La capa inferior podría ser un aquícludo (impermeable) o también un acuitardo. En cualquier caso, el agua del acuífero está sometida a presión. La superficie potenciométrica de un acuífero semiconfinado puede no diferir demasiado de la de uno confinado; sin embargo, la respuesta a esfuerzos (bombeos) sí difiere, pues existe aporte de almacenamiento adicional desde el acuitardo adyacente. Un caso especial de acuífero semiconfinado es el *sistema acuífero multicapa*, donde varias capas acuíferas están separadas por acuitardos y todas están hidráulicamente conectadas en cierto grado. En tales sistemas, al bombear una capa puede generarse gradualmente movimiento de agua desde las capas adyacentes a través de los acuitardos. El análisis de estos casos requiere considerar la difusividad de los acuitardos y suele describirse mediante modelos de acuífero con fuga. El concepto de acuífero semiconfinado es importante en hidrogeología porque muchos de los acuíferos reales no son confinados "perfectos"; siempre hay algo de fuga a través de las capas supuestamente confinantes. Esto atenúa los descensos de presión y extiende la zona de influencia de los bombeos en comparación con un acuífero confinado estricto. En suma, los acuíferos semiconfinados presentan un comportamiento híbrido: parcialmente controlado por almacenamiento elástico (como confinados) y parcialmente por drenaje gravitacional (como libres), dependiendo de la magnitud y duración de las perturbaciones hidráulicas. En este capítulo hemos definido los conceptos hidrogeológicos básicos (porosidad, permeabilidad, almacenamiento, niveles de agua, gradientes y flujo) que serán necesarios para entender los desarrollos de los capítulos siguientes. Con estos fundamentos, es posible formular la ecuación general de flujo subterráneo combinando la ley de Darcy con la ecuación de continuidad, y analizar distintos tipos de sistemas acuíferos.

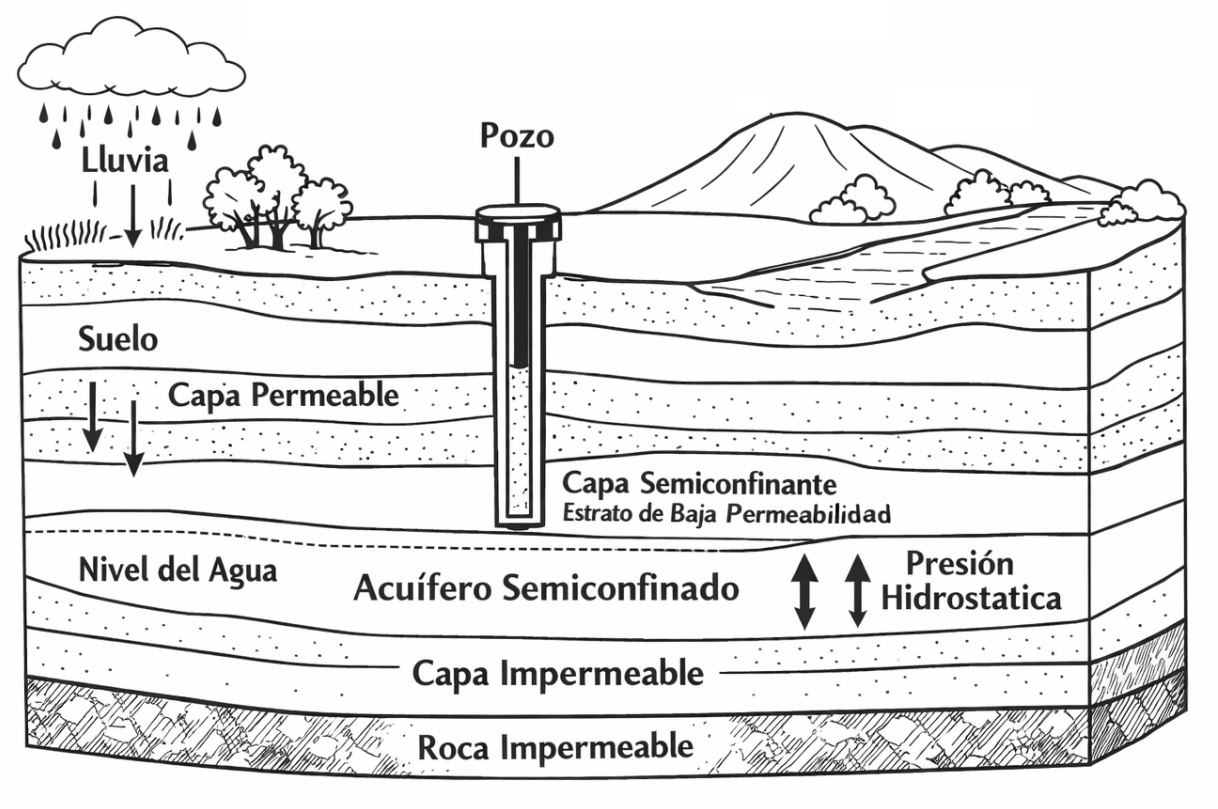


Figura 2.7: Representación de un acuífero semiconfinado o acuífero con fuga.

2.4.2.3. Acuífero confinado

Un *acuífero confinado* (también llamado *acuífero artesiano*) es aquel que está cubierto en su parte superior por un estrato confinante de baja permeabilidad, que impide que el agua en el acuífero esté en contacto con la atmósfera localmente, Figura 2.8. El agua dentro de un acuífero confinado se encuentra bajo presión mayor que la atmosférica, típicamente correspondiente a la columna de agua que existe hasta alguna zona de descarga o de comunicación con la superficie en otra parte (por ejemplo, la recarga puede ocurrir en afloramientos lejanos donde el acuífero está libre). Si se perfora un pozo a través del estrato confinante hasta el acuífero, el agua en el pozo subirá por encima del techo del acuífero, indicando que está a presión (como agua en una tubería). El nivel al que sube en el pozo define la *superficie piezométrica* del acuífero confinado en ese punto. La superficie piezométrica es análoga al nivel freático pero para un acuífero confinado: representa la altura que alcanzaría el agua en pozos piezométricos distribuidos en la zona confinada. Por

ejemplo, podría trazarse un mapa de curvas equipiezométricas para un acuífero confinado, similar a un mapa de nivel freático para uno libre. En condiciones estacionarias, el flujo ocurre dentro del acuífero confinado de zonas piezométricamente altas a bajas, y suele ser principalmente horizontal (ya que las equipotenciales en un acuífero confinado tienden a ser verticales debido al carácter impermeable de los límites superior e inferior). Un acuífero confinado suele recargarse en áreas donde aflora o donde está conectado hidráulicamente a un acuífero adyacente. Por ejemplo, si la formación permeable se extiende hacia zonas altas del terreno donde no está cubierta por el confinante, la lluvia puede infiltrarse allí y alimentar el acuífero (zona de recarga). También la recarga puede provenir de infiltración lenta a través de los estratos confinantes (llamada recarga por *fuga* o *releakage* desde acuíferos superiores). En cualquier caso, la circulación en un acuífero confinado es "a ciegas" desde la perspectiva superficial: el agua puede viajar grandes distancias bajo tierra bajo presión, para emerger en una zona distante donde el acuífero deje de estar confinado (por ejemplo, a través de un manantial o de un pozo artesiano). Si la superficie piezométrica de un acuífero confinado se sitúa por encima de la superficie del terreno, entonces un pozo perforado en ese acuífero será *fluente* (artesiano surgente): el agua fluirá espontáneamente hacia la superficie sin necesidad de bombeo. Estos pozos artesianos eran comunes en cuencas sedimentarias con recarga en zonas elevadas (p.ej., la Cuenca de París en el siglo XIX que dio origen al término "acuífero artesiano"). No obstante, la explotación prolongada de acuíferos confinados suele disminuir las presiones, haciendo que muchos pozos artesianos dejen de fluir libremente con el tiempo.

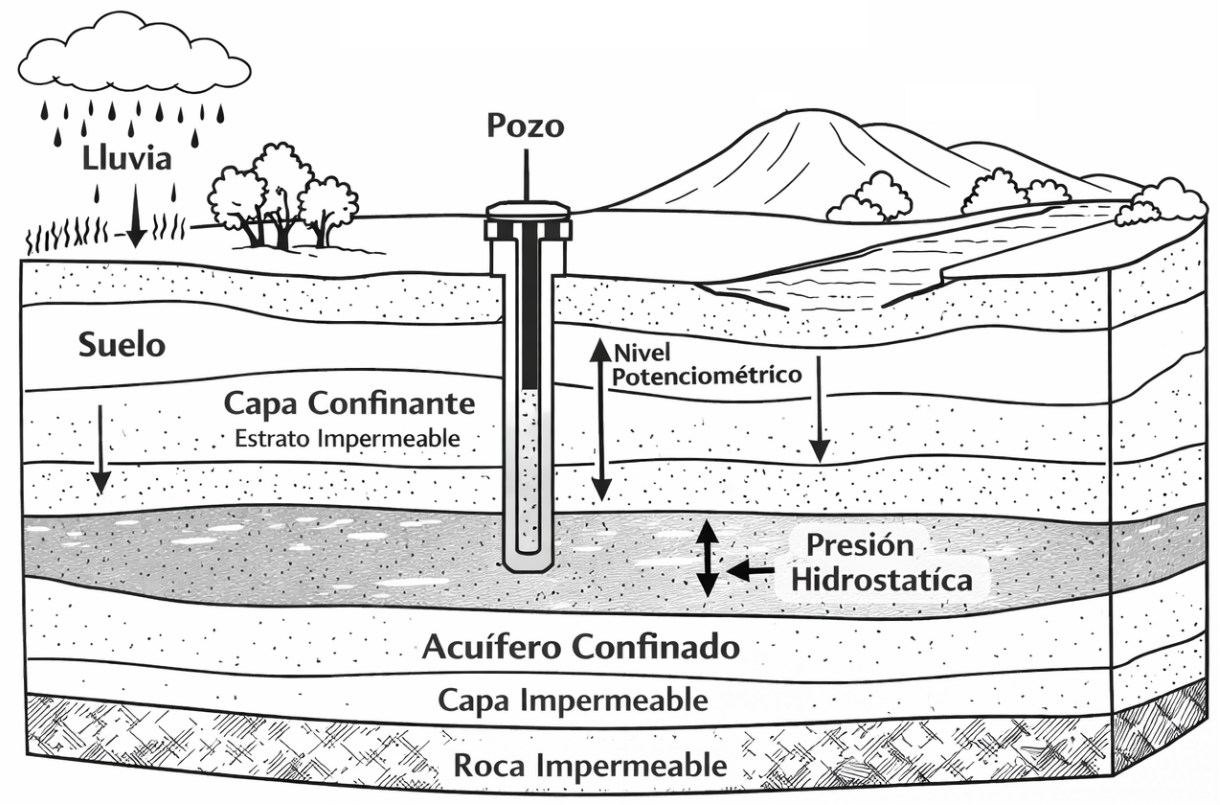


Figura 2.8: Esquema de un acuífero confinado.

Capítulo 3

MODELO NUMÉRICO DEL ACUÍFERO KÁRSTICO DE YUCATÁN

En este capítulo se describe el modelo numérico de flujo de agua subterránea aplicado al acuífero kárstico del estado de Yucatán (Figura 1.1). Se define el dominio, la discretización, la conceptualización, la parametrización y las condiciones de frontera empleadas. Esta descripción no solo proporciona el contexto necesario para implementar una modelación hidrogeológica en MODFLOW 6, sino que además permite reproducir el modelo del acuífero de Yucatán y evaluar sus resultados con criterios técnicos claros.

3.1. Marco de trabajo del modelo

3.1.1. Propósito del modelo y alcance

- El modelo busca representar el comportamiento regional en estado estacionario del flujo de agua subterránea en el estado de Yucatán.
- Los modelos realizados tienen un enfoque de medio poroso equivalente.
- El modelo no representa conductos kársticos individuales de forma explícita.

- El modelo usa parámetros efectivos que integran la heterogeneidad a escala de celda.
- Los modelos de los diferentes escenarios se utilizan para comparar escenarios hidrogeológicos y evaluar la sensibilidad de parámetros clave en el comportamiento regional.

3.1.2. Definición de escenarios y matrices de simulaciones

En el presente trabajo, se llevaron a cabo simulaciones de diferentes escenarios bajo el régimen en estado estacionario de flujo de agua subterránea del acuífero kárstico del estado de Yucatán. Para la evaluación de los diferentes escenarios, se realizo una zonificación espacial basada en las principales regiones del estado que poseen propiedades hidráulicas distintas. Dichas regiones son la **zona costera, el anillo de cenotes y la zona elevada** (Figura 3.1):

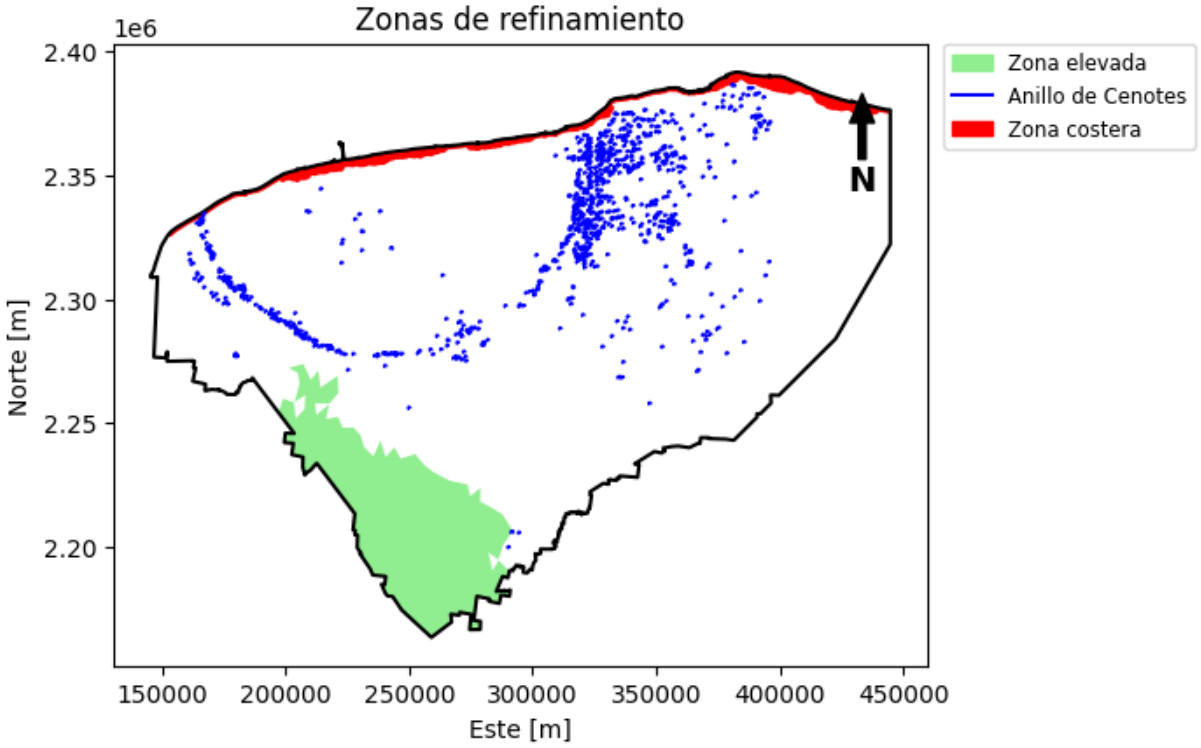


Figura 3.1: Zonificación espacial de los principales rasgos geológicos de Yucatán.

En base a la zonificación espacial, se definieron los siguientes escenarios/casos a modelar y simular:

1. Caso A: Sistema homogéneo (Se le asigna a todo el estado de Yucatán las mismas propiedades hidráulicas).

2. Caso B: Alta conductividad hidráulica asignada a la región del anillo de cenotes.

3. Caso C: Baja conductividad hidráulica asignada a la región elevada del estado de Yucatán (Zona de Sierra de Ticul).

4. Caso D: Unión del caso A, B y C.

El estudio evalúa estos escenarios hidrogeológicos definidos por la zonificación espacial de parámetros en distintas discretizaciones utilizadas (diferentes tipos de malla), discretización estructurada (DIS), discretización por vértices (DISV) y discretización no-estructurada (DISU). Esta combinación de diferentes escenarios con diferentes discretizaciones, permite separar y evaluar los efectos físicos de los efectos numéricos de las simulaciones.

3.1.3. Descripción del dominio y sistema de referencia

El dominio de los modelos cubre en su totalidad el estado de Yucatán (39,524 km^2), los modelos han sido definidos con base en los límites hidrogeológicos como la costa, lineas divisorias e información geológica (Figura 1.1). El sistema de coordenadas empleado en el modelo corresponde a la zona 16 UTM del estado de Yucatán, específicamente, WGS84/UTM Zona 16 EPSG:32616. El modelo usa unidades consistentes en todo el flujo de trabajo basadas en el Sistema Internacional de medidas, metros para medir longitudes, metros sobre el nivel del mar para cargas hidráulicas y segundos para el tiempo.

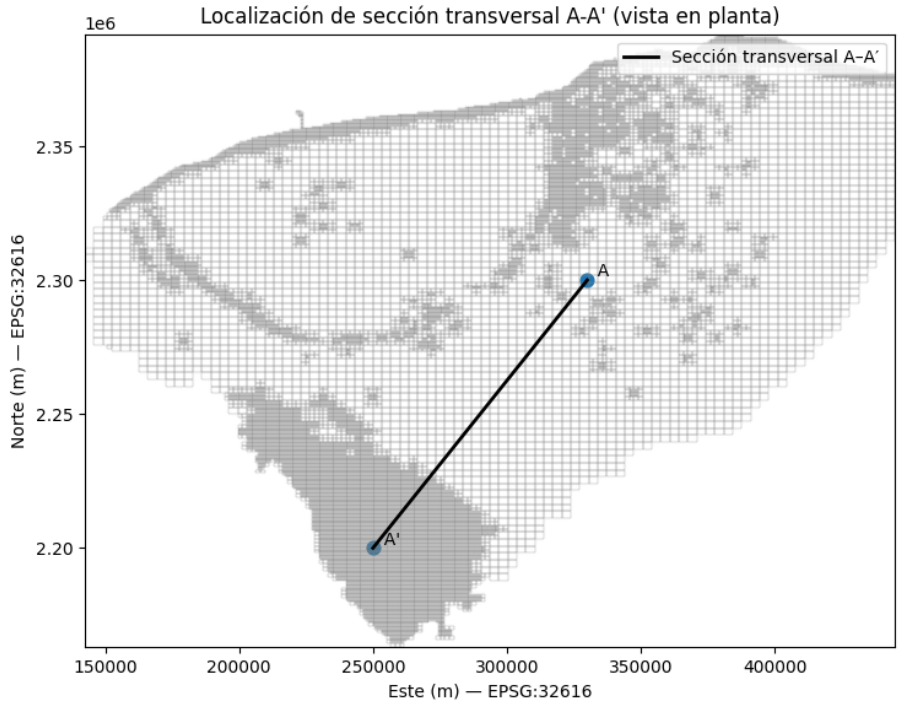
3.1.4. Modelo hidroestratigráfico

El modelo representa el sistema acuífero mediante un esquema hidroestratigráfico simplificado de dos unidades (dos capas). Este enfoque busca capturar el comportamiento regional del flujo de agua subterránea mediante un medio de poroso equivalente, sin representar de forma explícita conductos kársticos individuales. Las dos unidades se implementarón en MODFLOW 6 como dos capas numéricas para el acuífero kárstico de Yucatán,

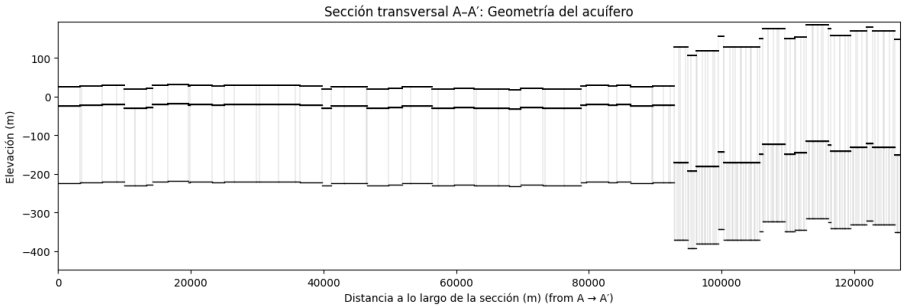
en todos los modelos. La capa 1 representa la unidad superior asociada a carbonatos someros, epikarst y a la zona no confinada, a excepción de la costa, ya que esta zona esta confinada (Perry et al. [1989]). La capa 2 representa la unidad basal interior asociada a carbonatos más compactos y corresponde a la zona semiconfinada/confinada. La Tabla 3.1 resume la configuración vertical final asignada a los modelos y la Figura 3.2 muestra esta configuración en una sección transversal que corta el estado de Yucatán.

Tabla 3.1: Configuración vertical de los modelos. Los espesores corresponden a la discretización vertical final utilizada en cada uno de los modelos.

Capa	**Descripción hidroestratigráfica**	**Elevación / espesor**
1	Unidad superior: Corresponde a la zona no confinada (a excepción de la franja costera). Presenta una mayor interacción con los procesos de recarga/descarga y evapotranspiración.	Espesor variable: 300 [m] en la región de mayor elevación topográfica (zona de la Sierra de Ticul) y 50 [m] en el resto del dominio del estado de Yucatán.
2	Unidad inferior: Corresponde a la zona semiconfinada/confinada regional profunda, la cual controla el flujo de agua subterránea profunda.	Espesor constante de 200 [m] en todo el dominio.



((a)) Localización de sección transversal A-A'.



((b)) Sección transversal A-A'.

Figura 3.2: Diagrama que muestra la configuración del acuífero por medio de la sección transversal A-A'.

3.1.4.1. Ajuste de la discretización vertical para evitar cargas no físicas

Durante las simulaciones preliminares se identificó una zona con cargas hidráulicas simuladas negativas en la región de mayor elevación topográfica del dominio (zona de la Sierra de Ticul) en la capa 1, en todos los modelos. Este comportamiento se observó cuando el modelo se definió con espesores constantes por capa en todo el dominio (Capa 1: 50 [m] y Capa 2: 150 [m]), y aunque se modificarón todos los parámetros que controlan el comportamiento regional, no se logró eliminar las cargas negativas. Bajo esa configuración,

el solucionador podía mejorar su convergencia (eliminar cargas simuladas negativas) mediante el esquema de Newton-Rhapson con la opción de *under-relaxation* implementada en MODFLOW. Sin embargo, esta medida actúa como estabilización numérica y no corrige por sí misma la representación conceptual del sistema acuífero. En consecuencia, persistían valores de carga no plausibles en esta región elevado de la zona de la Sierra de Ticul. El patrón de cargas simuladas negativas obtenido en la capa 1 en esta zona, se interpretó como una señal de que la discretización vertical uniforme no era consistente con la variación topográfica, por lo que se le asignó un espesor de 300 [m], mientras que en el resto del dominio se mantuvo un espesor de 50 [m]. Asimismo, se definió un espesor constante de 200 [m] para todo el dominio de la capa 2. Con esta configuración, el modelo eliminó la zona de cargas negativas sin requerir el uso de la opción *under-relaxation*. Este ajuste se documenta como una corrección conceptual en la representación hidroestratigráfica del sistema y no como un ajuste de calibración.

3.1.5. Discretización espacial y tipos de malla

Los modelos se discretizarón utilizando mallas de diferente estructura para evaluar el efecto de la discretización numérica en los modelos. Se utilizarón las diferentes tipos de mallas que permite usar MODFLOW 6, **estructurada (DIS)** y **no-estructurada por vértices y no-estructurada (DISV/DISU)**. Esta comparación permite analizar dos cosas principales: la consistencia espacial de las cargas hidráulicas simuladas y los flujos, y la independencia de malla, entre modelos. Dependiendo del escenario, se hizo un refinamiento espacial de las mallas en las regiones geológicas de interés del estado de Yucatán, más sin embargo, independientemente del escenario tratado, se realizó un mayor refinamiento en la capa 2 que en la capa 1 en todos los modelos, para así, remarcar la prioridad de la capa profunda del acuífero kárstico del estado de Yucatán, dicho refinamiento se muestra a continuación en las subsecciones de las mallas empleadas.

3.1.5.1. Malla estructurada (DIS)

La malla estructurada empleada usa celdas rectangulares, y posee una resolución espacial es **(dx=583.015 [m], dy=756.0875 [m])** y contiene (400×400) celdas por capa. La Figura 3.3 muestra la discretización de la malla estructurada utilizada en los casos (A-D).

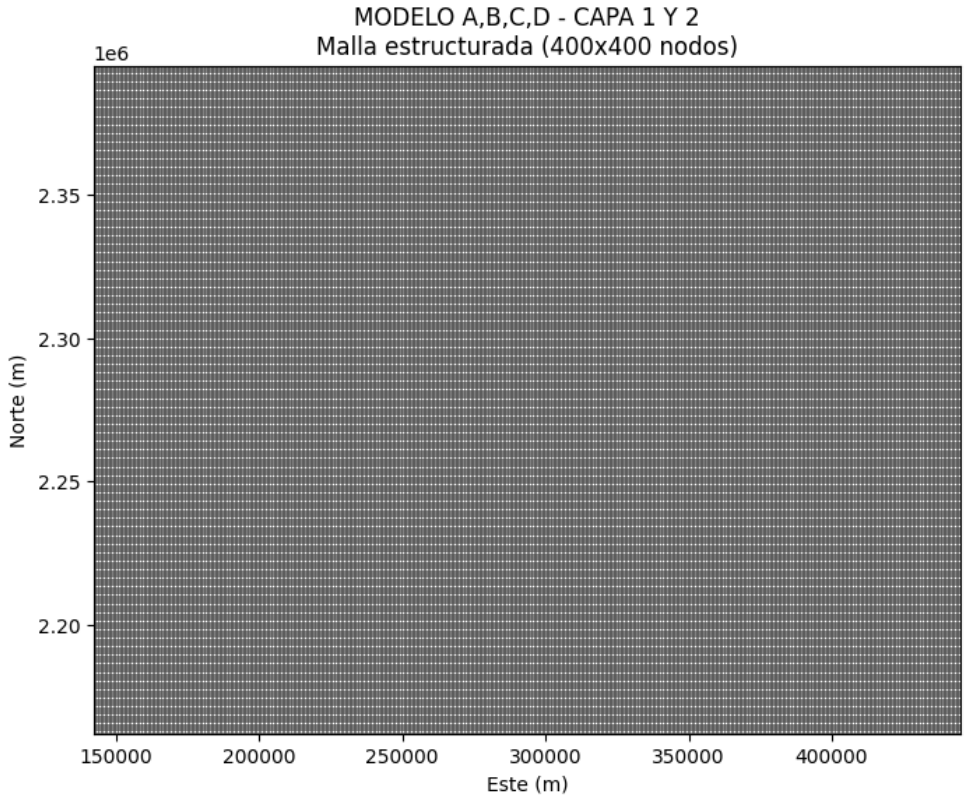
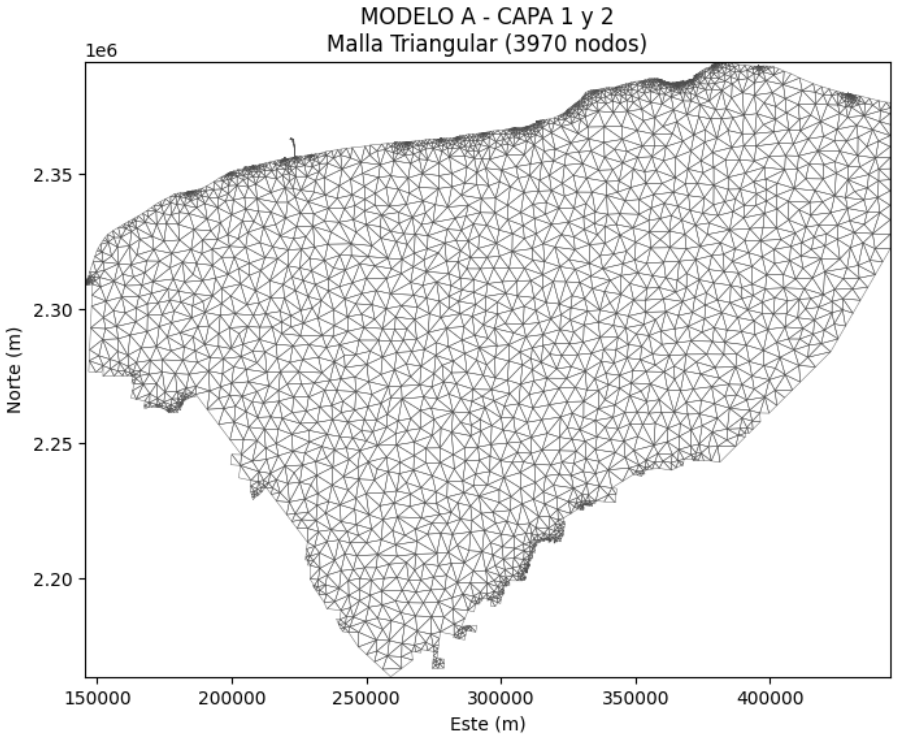


Figura 3.3: Malla estructurada de 400 × 400 celdas utilizada en los modelos A, B, C y D.

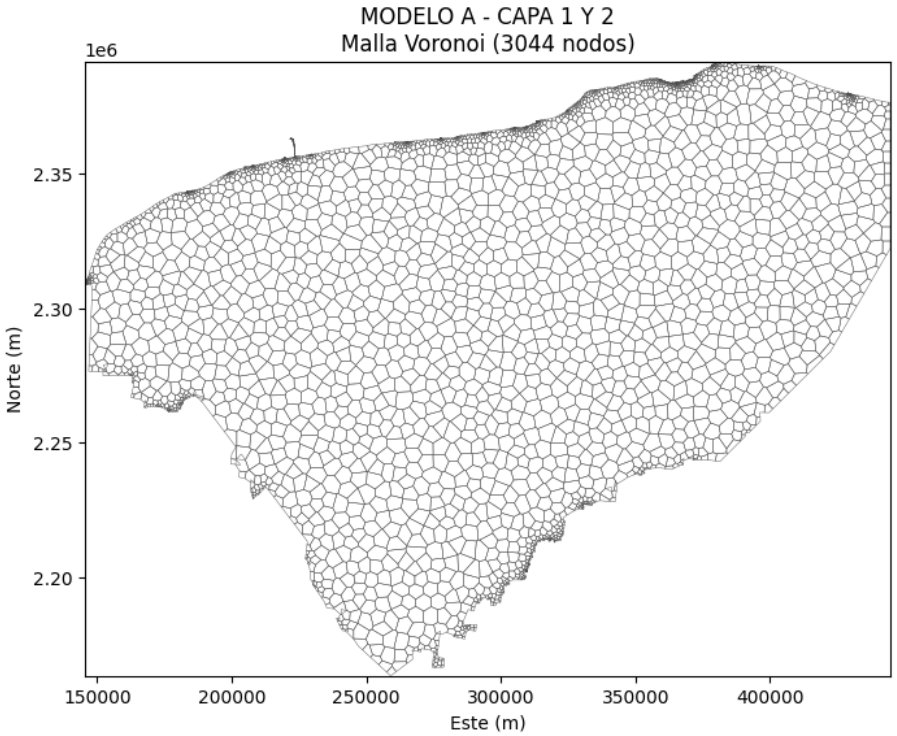
3.1.5.2. Malla no-estructurada por vértices (DISV)

3.1.5.3. Malla triangular y Voronoi

El empleo de la discretización por vértices implicó la construcción de la malla triangular y de Voronoi. Las Figuras 3.4, 3.5, 3.6, 3.7 muestran las mallas triangular y de Voronoi, generadas mediante DISV cada caso simulado A, B, C y D, respectivamente.

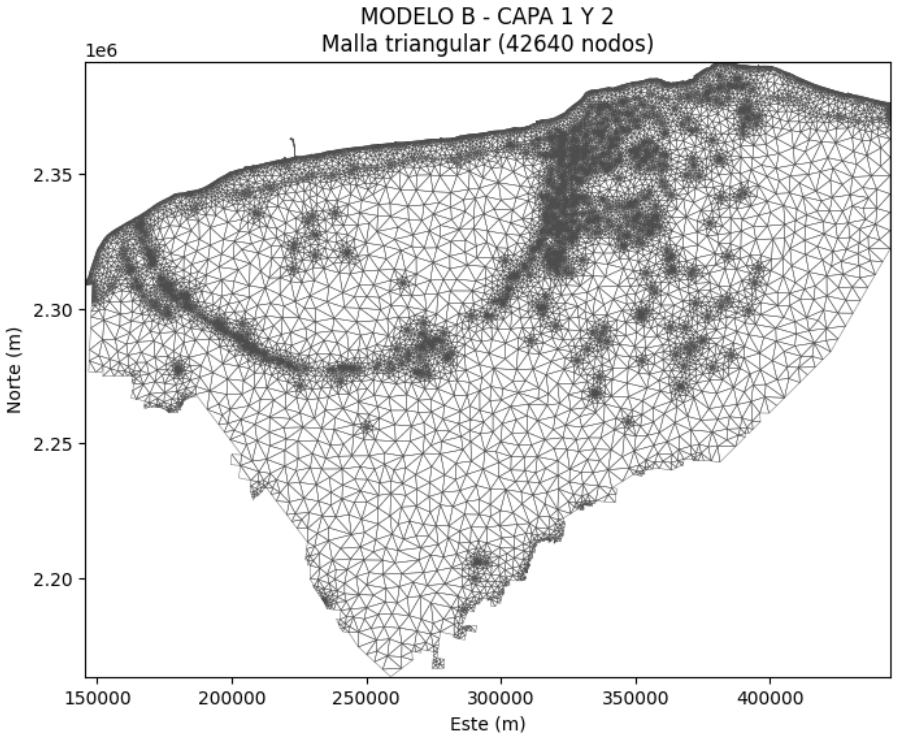


((a)) Malla triangular utilizada en la capa 1 y 2 del modelo A.

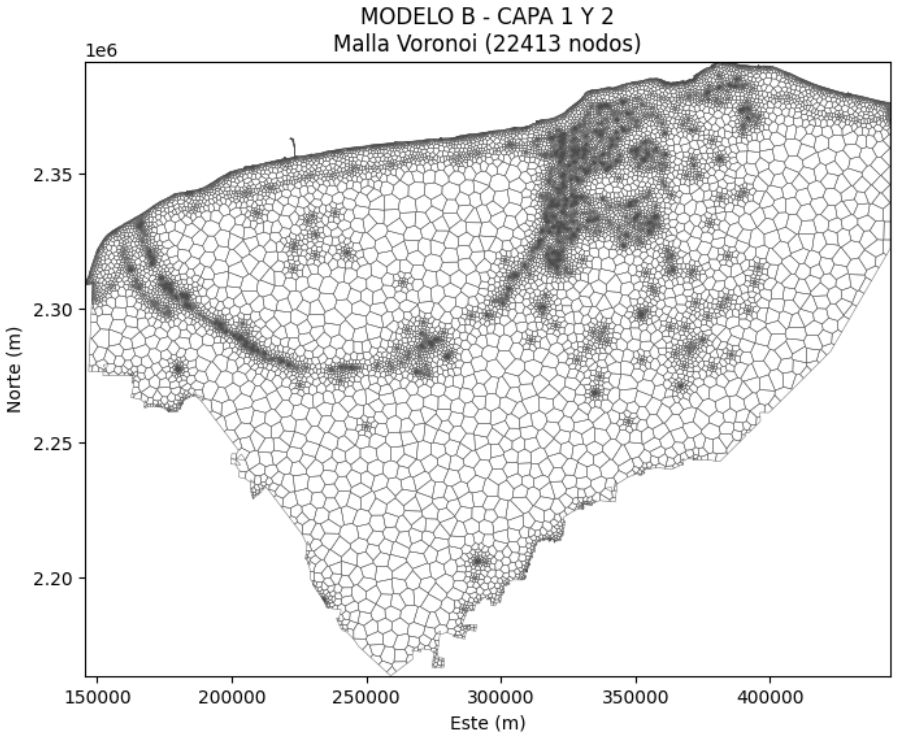


((b)) Malla Voronoi utilizada en la capa 1 y 2 del modelo A.

Figura 3.4: Malla triangular y de Voronoi, respectivamente, de las capas 1 y 2 del modelo A. (a) Malla triangular con 3970 nodos de la capa 1 y 2; (b) malla Voronoi con 3044 nodos en las capas 1 y 2, respectivamente.

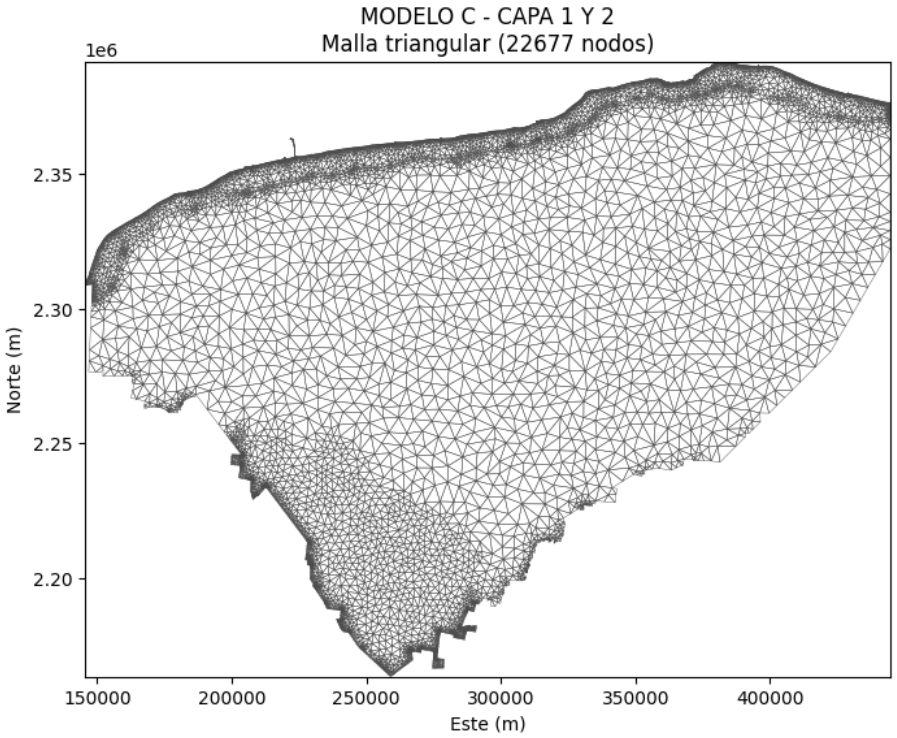


((a)) Malla triangular utilizada en la capa 1 y 2 del modelo B.

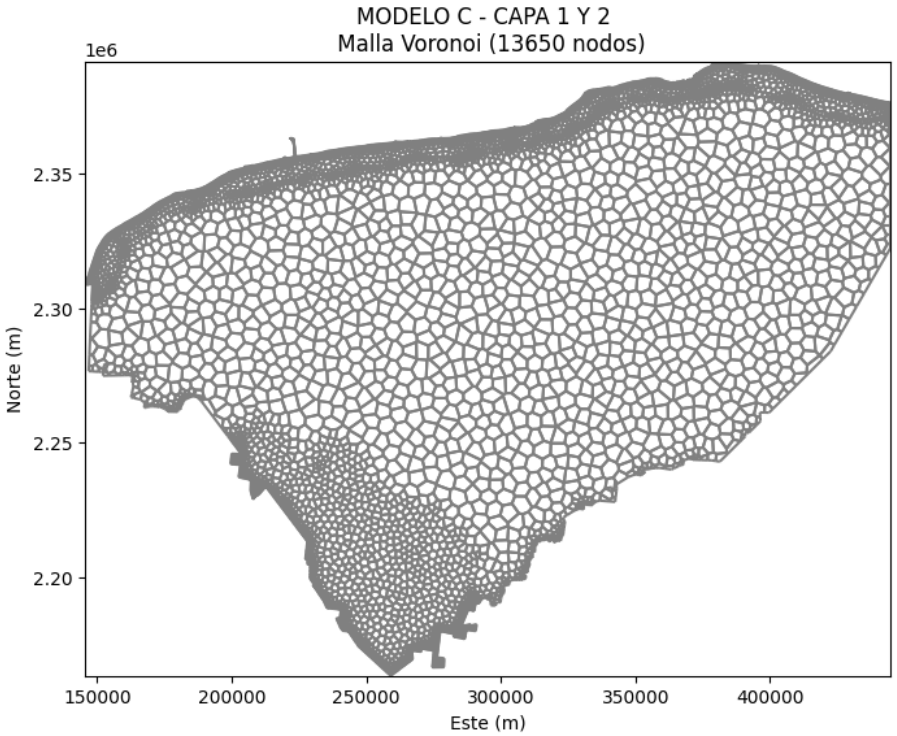


((b)) Malla Voronoi utilizada en la capa 1 y 2 del modelo B.

Figura 3.5: Malla triangular y de Voronoi, respectivamente, de las capas 1 y 2 del modelo B. (a) Malla triangular con 42640 nodos en las capas 1 y 2; (b) Malla Voronoi con 22413 nodos en las capas 1 y 2.

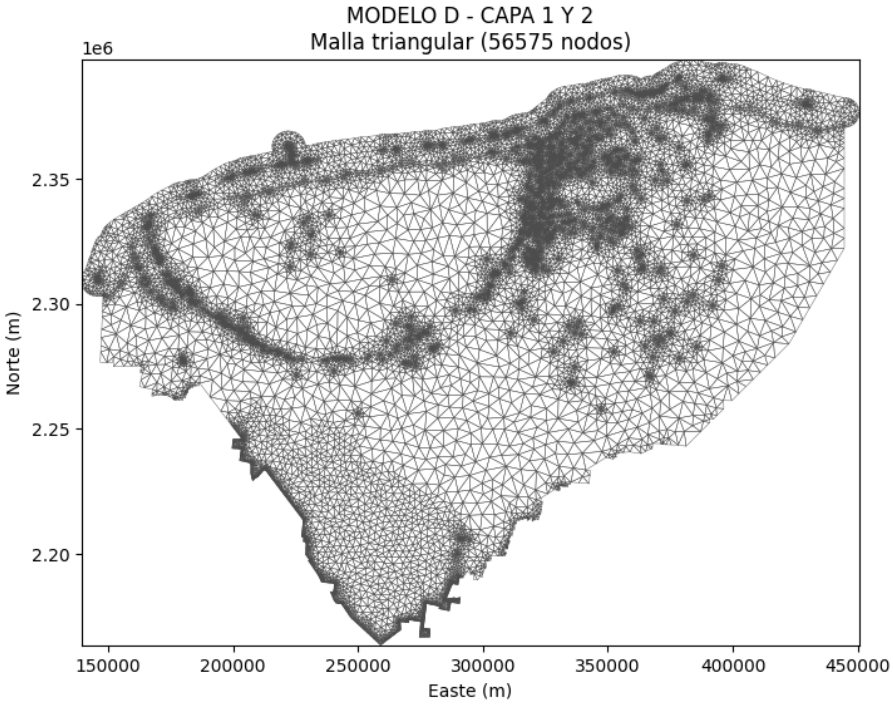


((a)) Malla triangular utilizada en la capa 1 y 2 del modelo C.

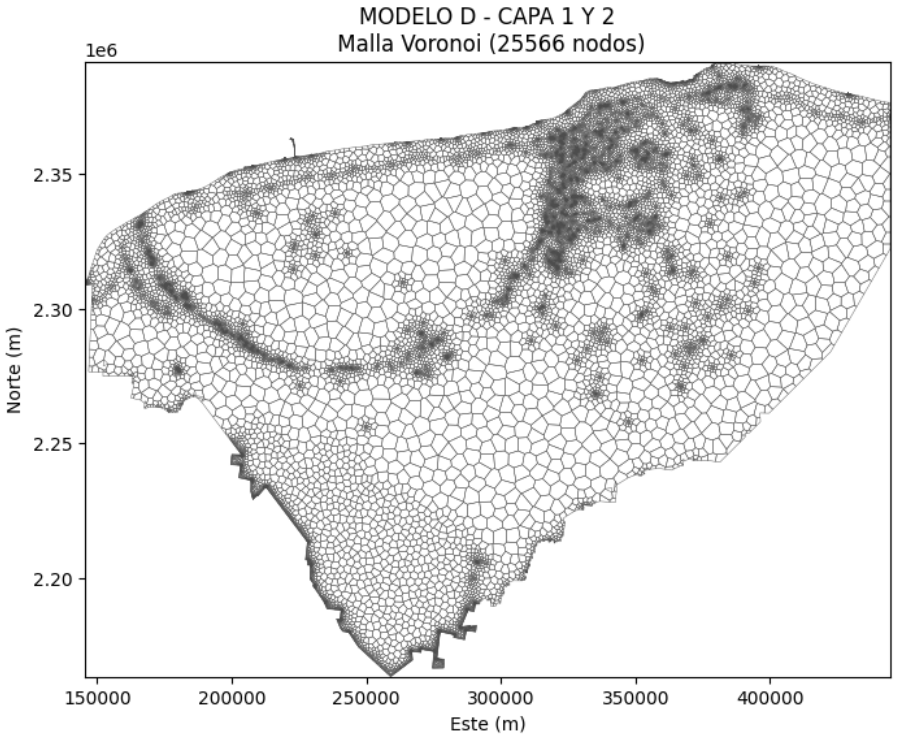


((b)) Malla Voronoi utilizada en la capa 1 y 2 del modelo C.

Figura 3.6: Malla triangular y de Voronoi, respectivamemne, de las capas 1 y 2 del modelo C. (a) Malla triangular con 22677 nodos en las capas 1 y 2; (b) Malla Voronoi con 13650 nodos en las capas 1 y 2.



((a)) Malla triangular utilizada en la capa 1 y 2 del modelo D.

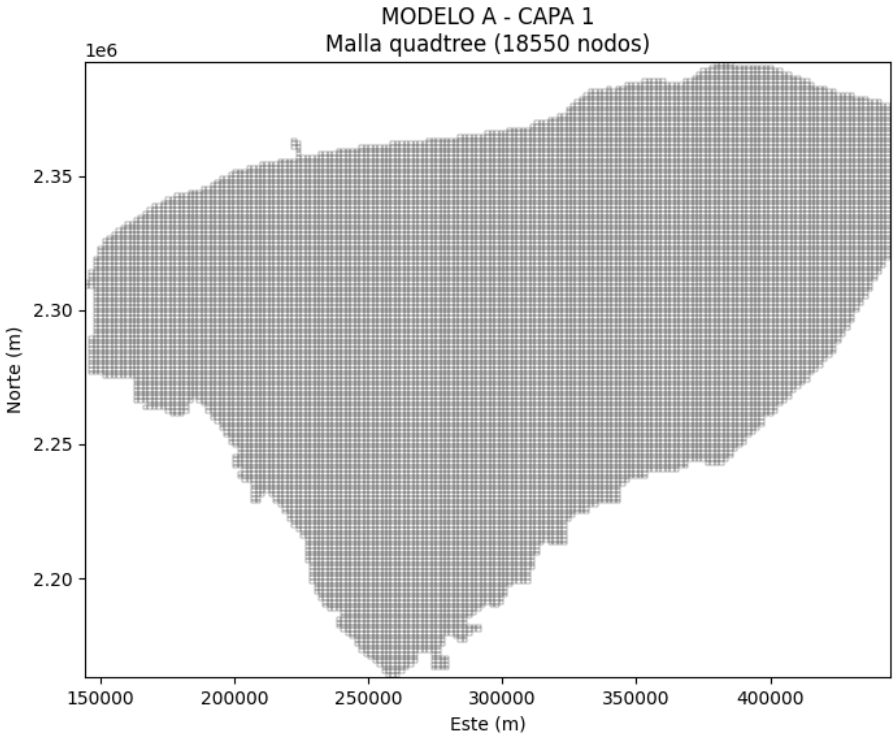


((b)) Malla Voronoi utilizada en la capa 1 y 2 del modelo D.

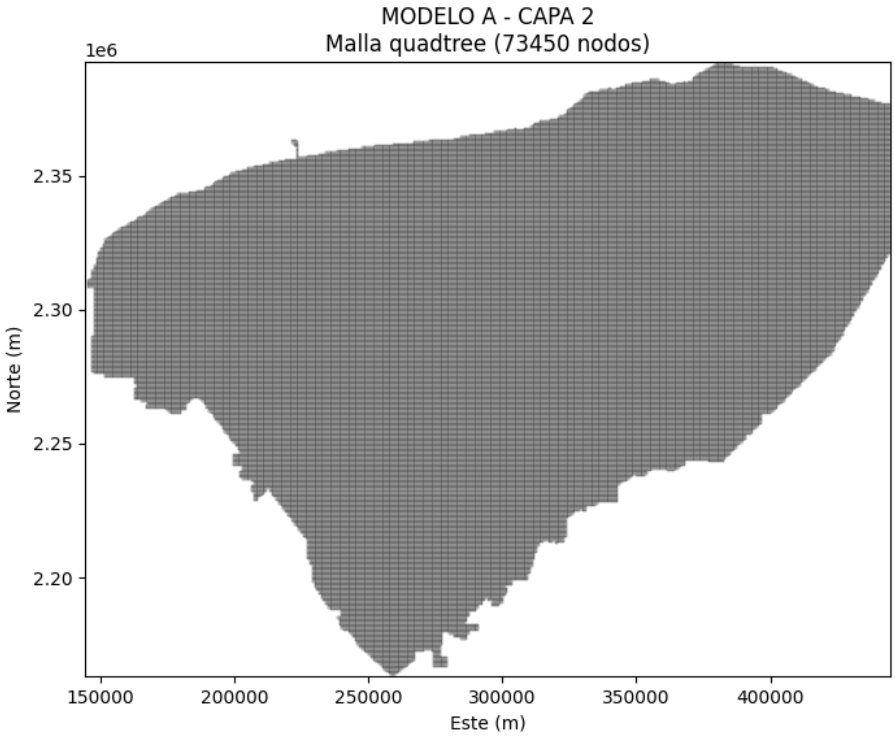
Figura 3.7: Malla triangular y de Voronoi, respectivamente, de las capas 1 y 2 del modelo D. (a) Malla triangular con 56575 nodos en las capas 1 y 2; (b) Malla Voronoi con 25566 nodos en las capas 1 y 2.

3.1.5.4. Malla no-estructurada (DISU)

La discretización DISU emplea ya sea la creación de la malla triangular, o la malla `quadtree`. En este caso, se trabajó con la malla `quadtree`, puesto que ya se tiene la malla triangular mediante DISV, la malla `quadtree` permite un refinamiento jerárquico por subdivisión. Este enfoque incrementa la resolución donde se necesita y controla el costo computacional. Las Figuras 3.8, 3.11, 3.14, 3.17 muestran las mallas *quadtree* de las dos capas de los modelos A, B, C y D. Además, las Figuras 3.9, 3.10, 3.12, 3.13, 3.15, 3.16, 3.18 y 3.19, muestran un acercamiento (zoom) realizado a las capas de cada uno de los modelos con la malla *quadtree*.

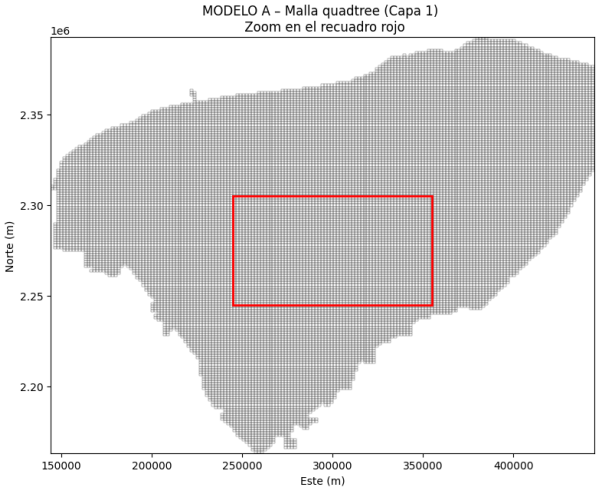


((a)) Malla `quadtree` con 18550 nodos en la capa 1 del caso A.

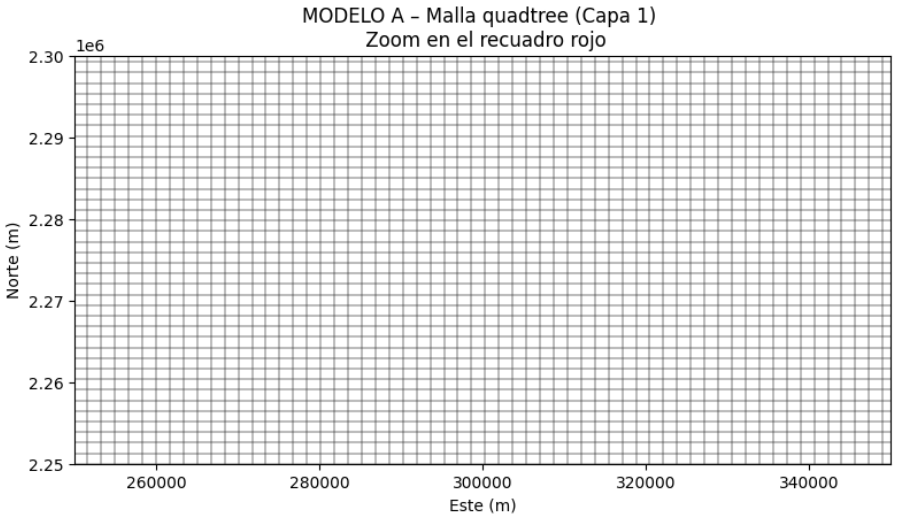


((b)) Malla `quadtree` con 73450 nodos en la capa 2 del caso A.

Figura 3.8: Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo A.

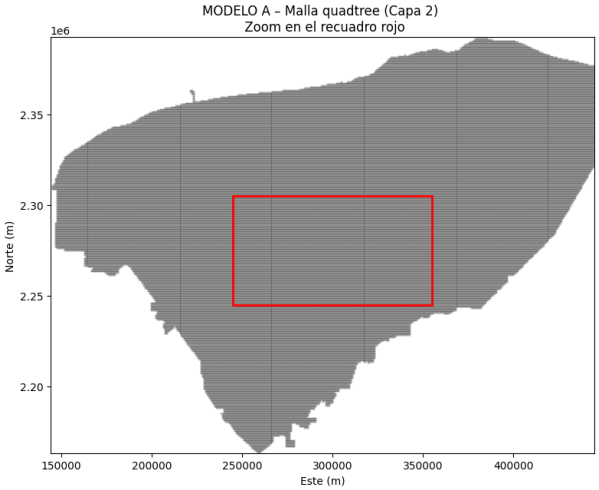


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 1 del modelo A.

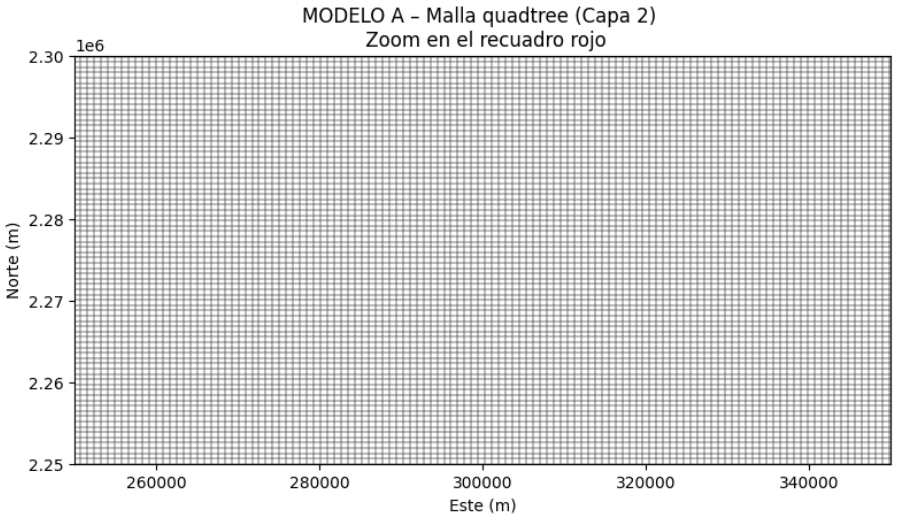


((b)) Acercamiento a la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.9(a).

Figura 3.9: Acercamiento a la malla quadtree de la capa 1 del modelo A que muestra el refinamiento de la malla.

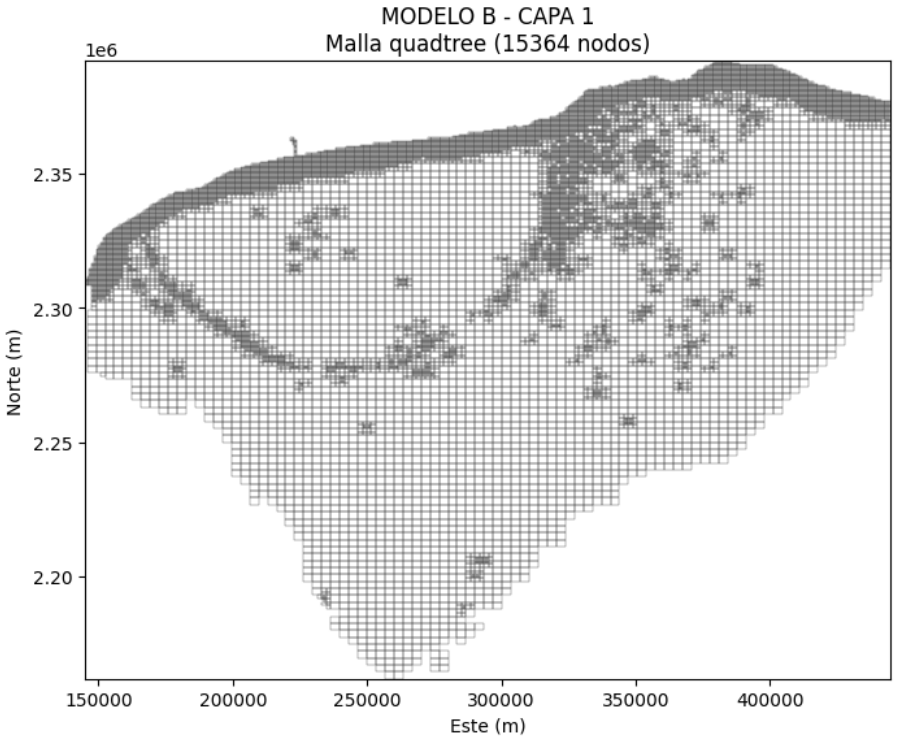


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 2 del modelo A.

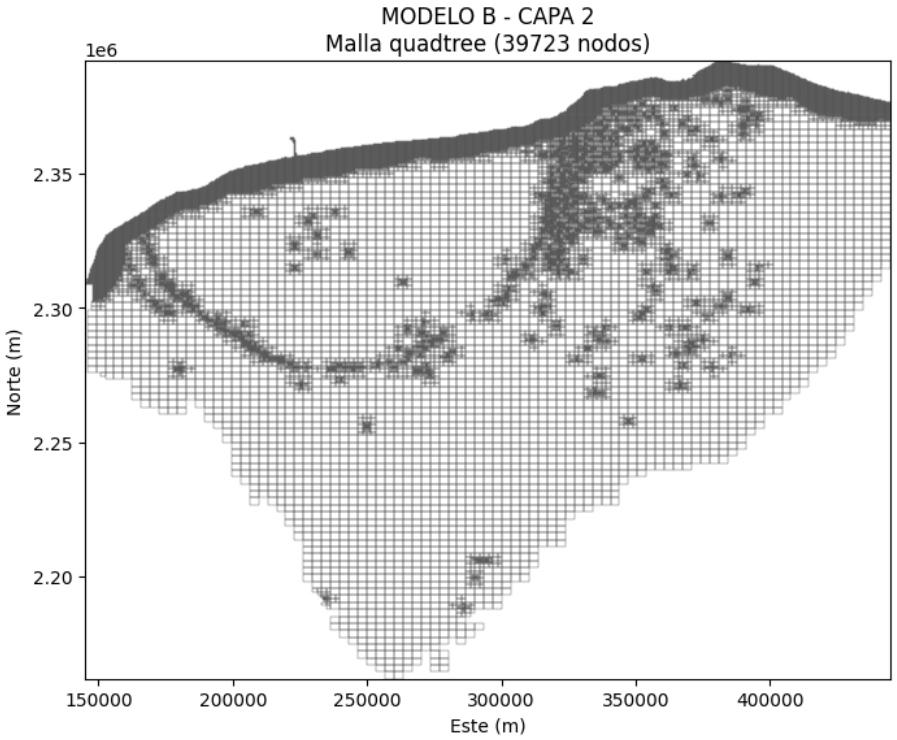


((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.10(a).

Figura 3.10: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo A que muestra el refinamiento de la malla.

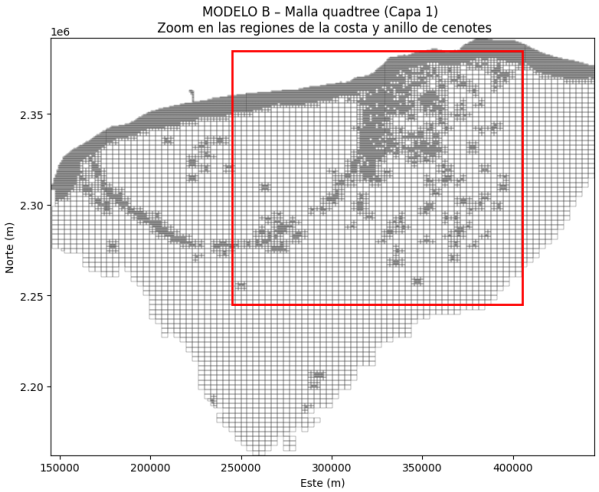


((a)) Malla `quadtree` con 15364 nodos en la capa 1 del caso B.

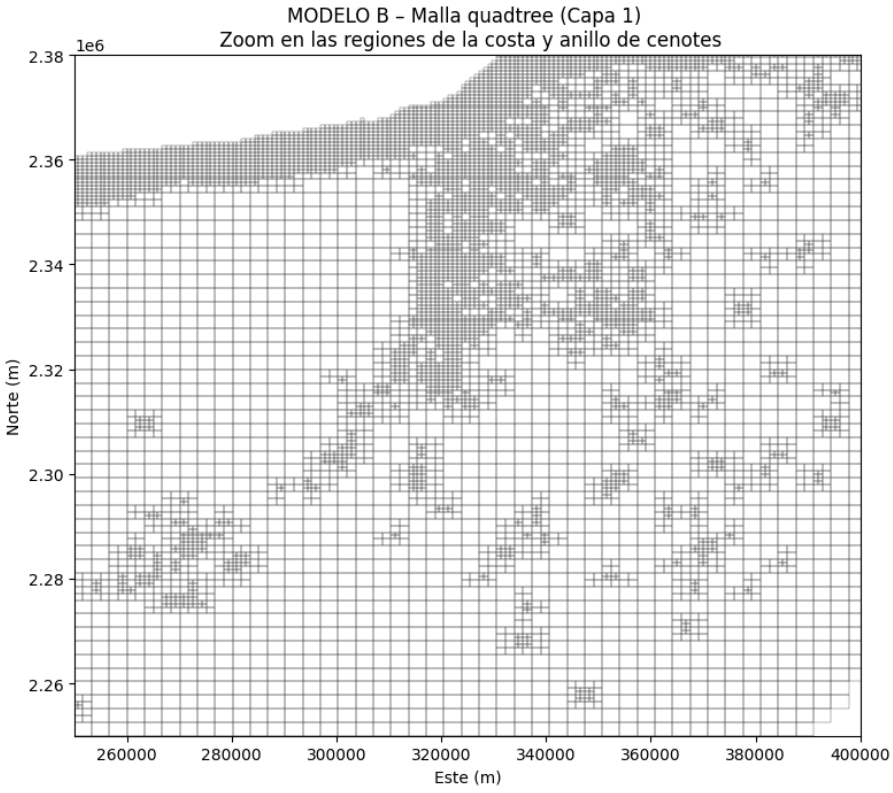


((b)) Malla `quadtree` con 39723 nodos en la capa 2 del caso B.

Figura 3.11: Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo B.

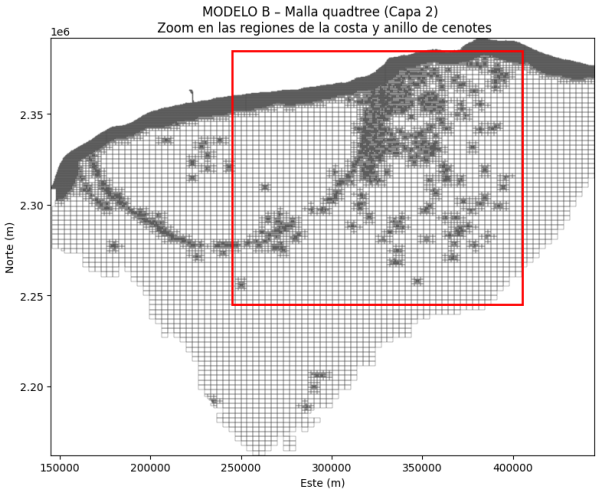


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 1 del modelo A.

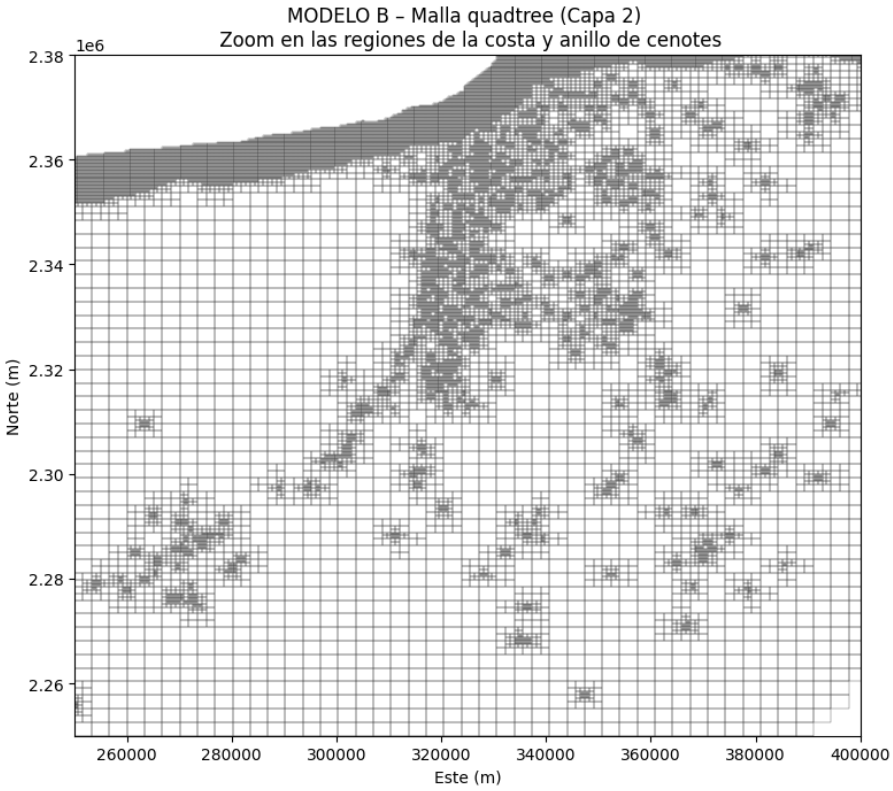


((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.12(a).

Figura 3.12: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 1 del modelo B que muestra el refinamiento de la malla.

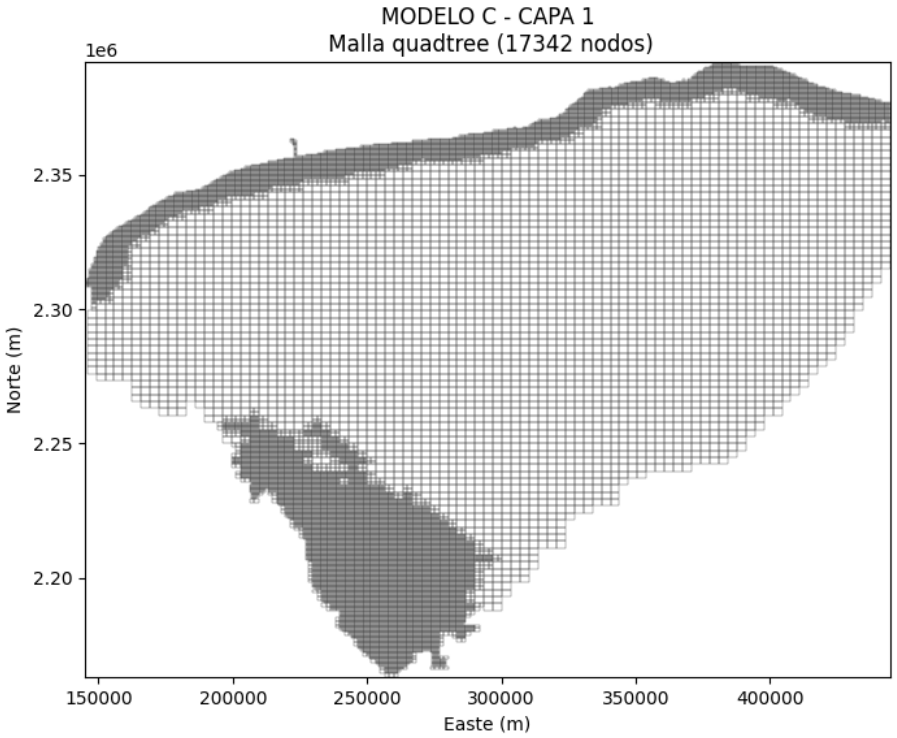


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 2 del modelo B.

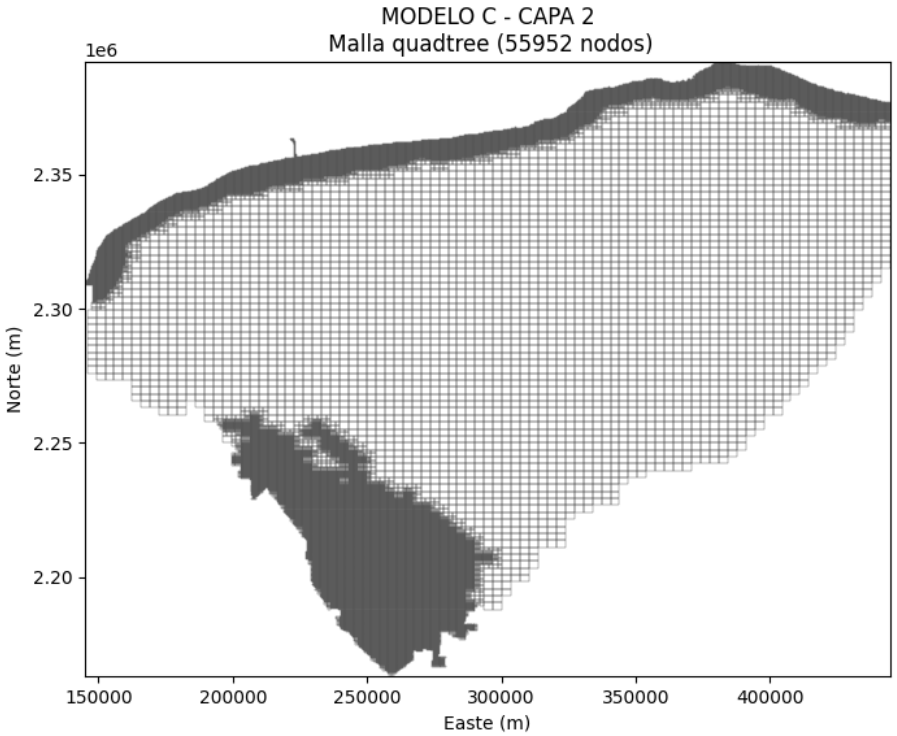


((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.13(a).

Figura 3.13: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo B que muestra el refinamiento de la malla.

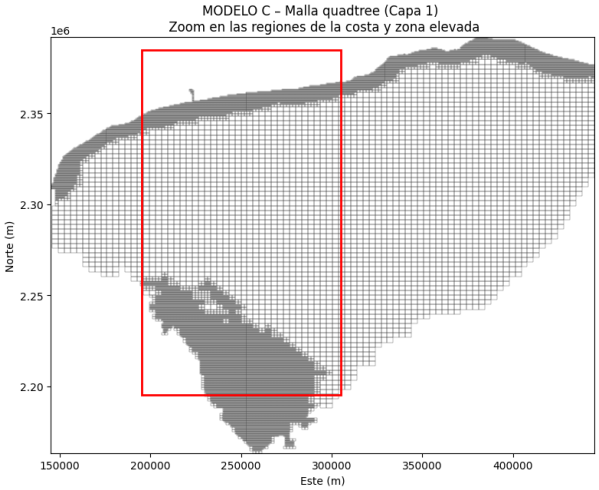


((a)) Malla `quadtree` de la capa 1 con 17342 nodos.

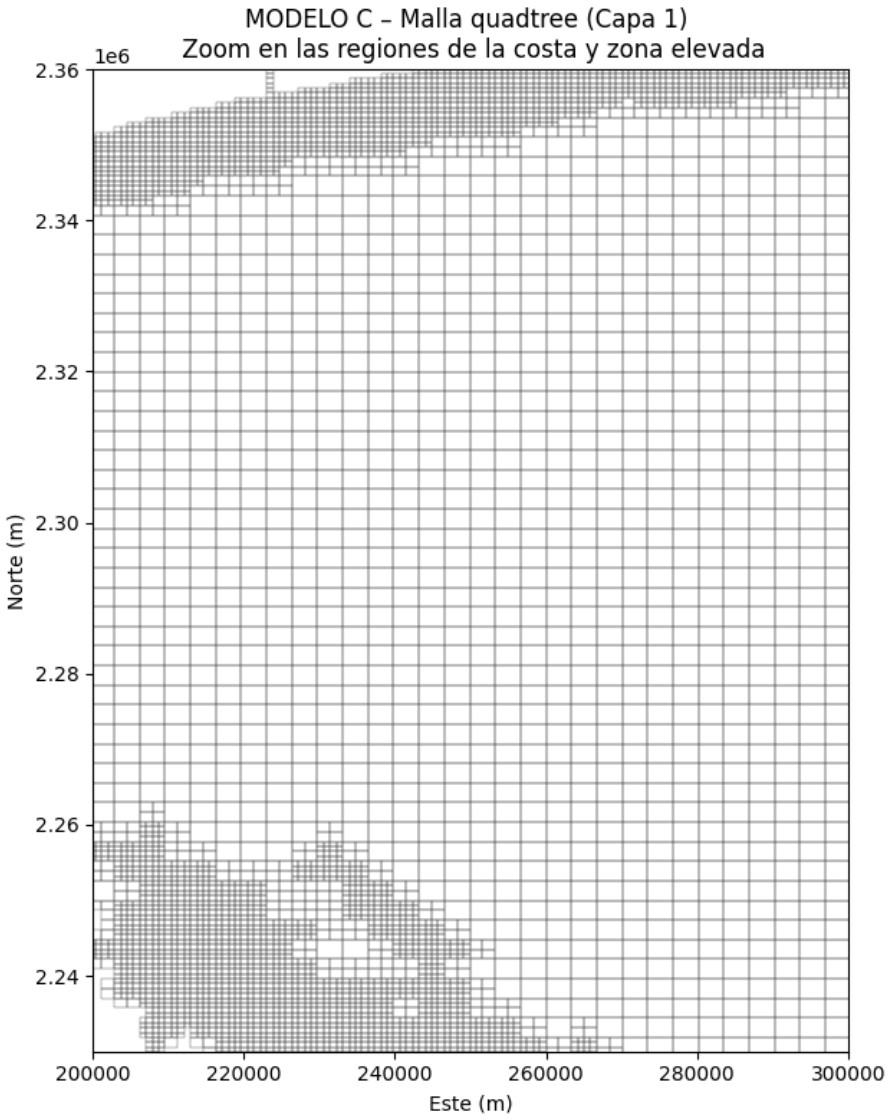


((b)) Malla `quadtree` de la capa 2 con 55952 nodos.

Figura 3.14: Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo C.

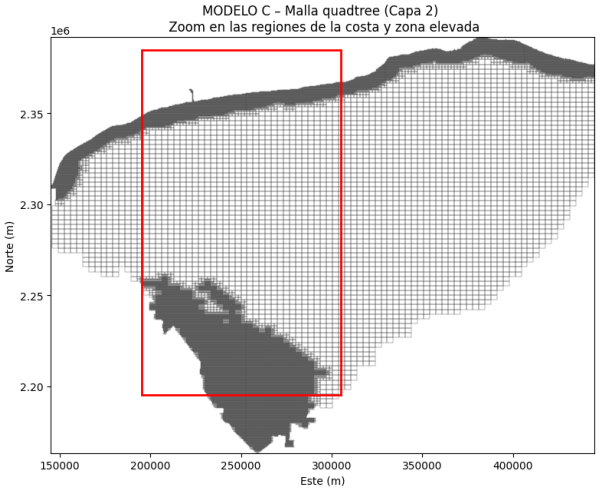


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 1 del modelo C.

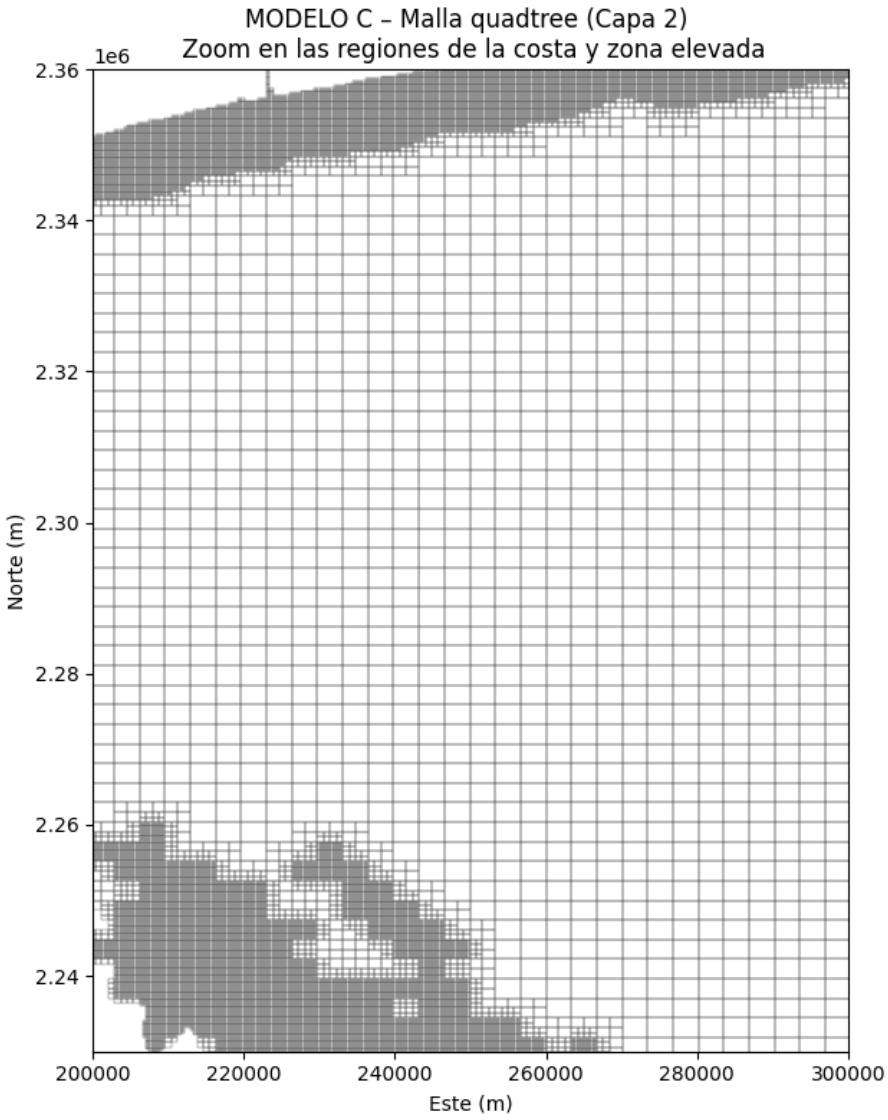


((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.15(a).

Figura 3.15: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 1 del modelo C que muestra el refinamiento de la malla.

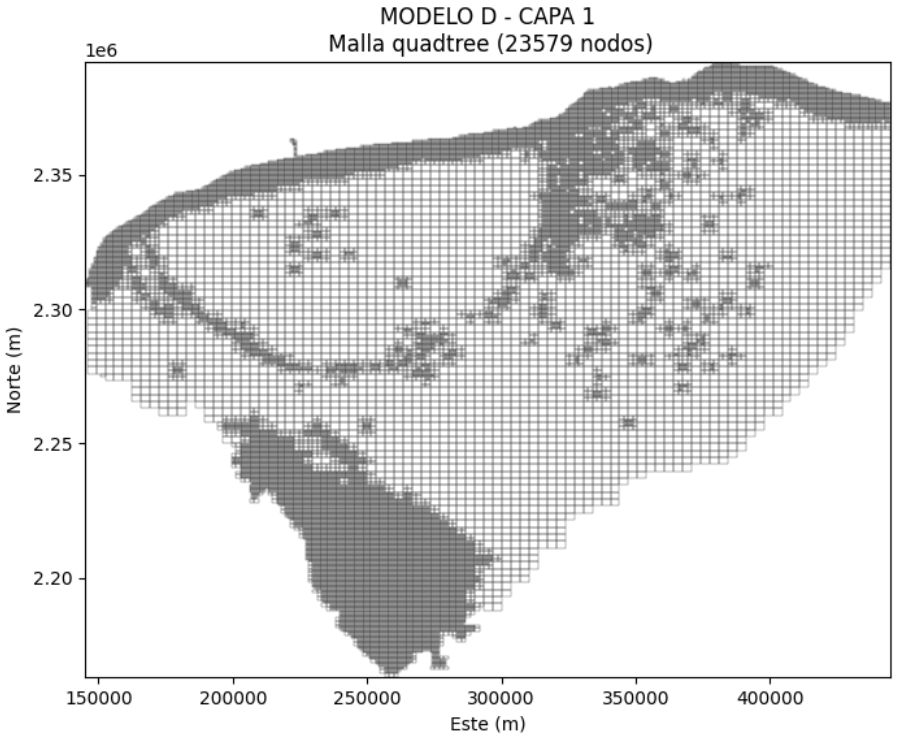


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 1 del modelo C.

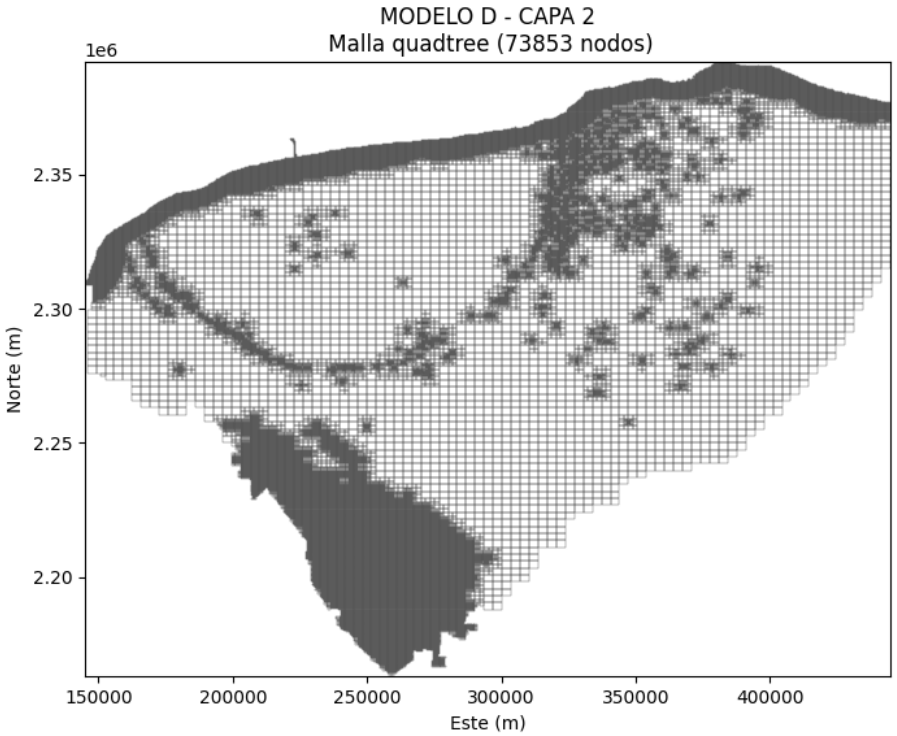


((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.16(a).

Figura 3.16: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo C que muestra el refinamiento de la malla.

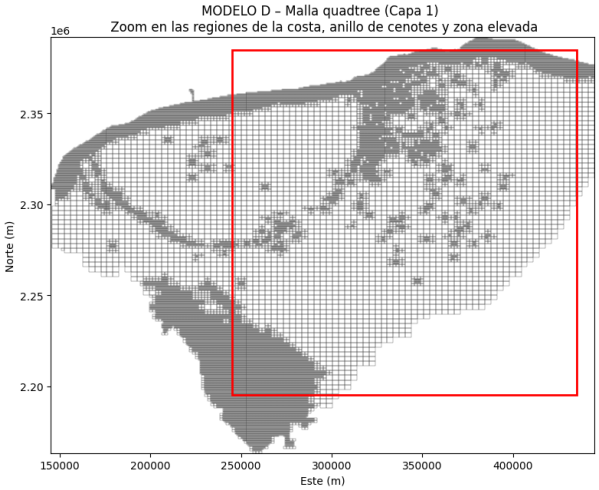


((a)) Malla `quadtree` de la capa 1 con 23579 nodos.

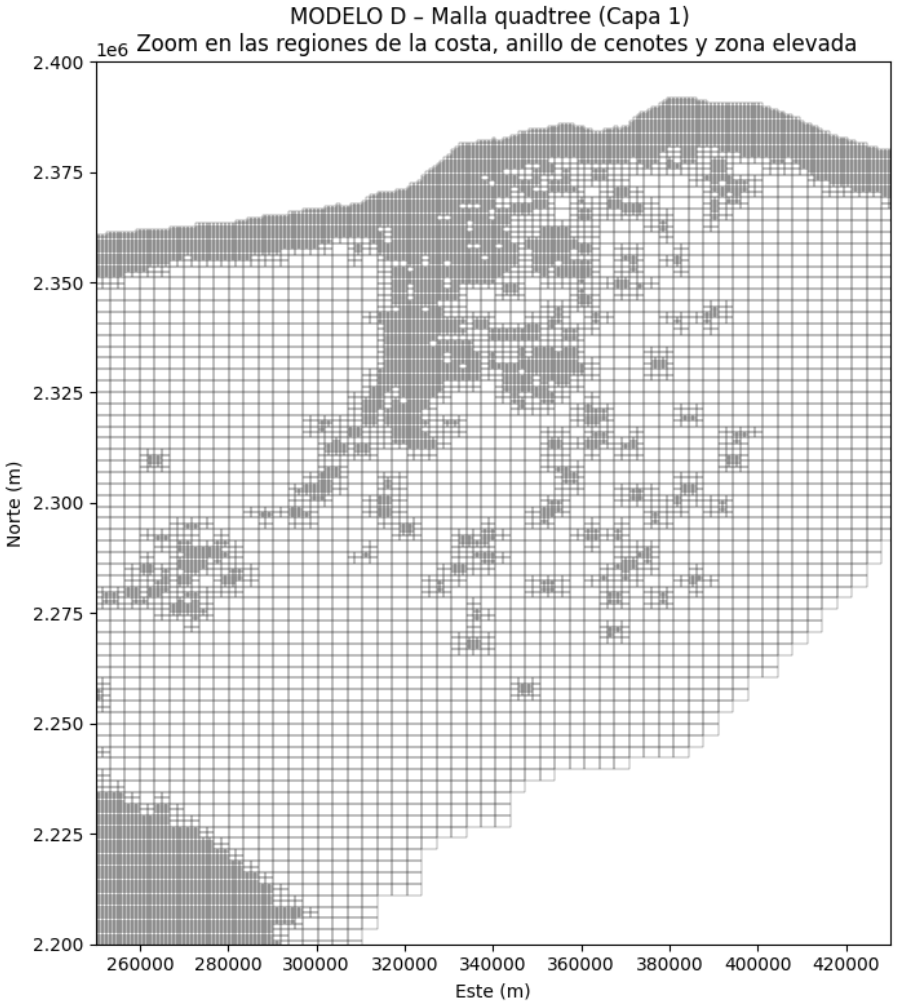


((b)) Malla `quadtree` de la capa 2 con 73853 nodos.

Figura 3.17: Mallas `quadtree` utilizadas en las capas 1 y 2, respectivamente, del modelo D.

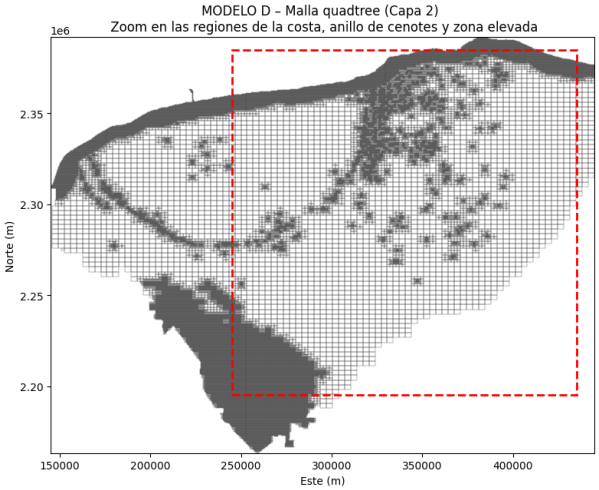


((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 1 del modelo D.

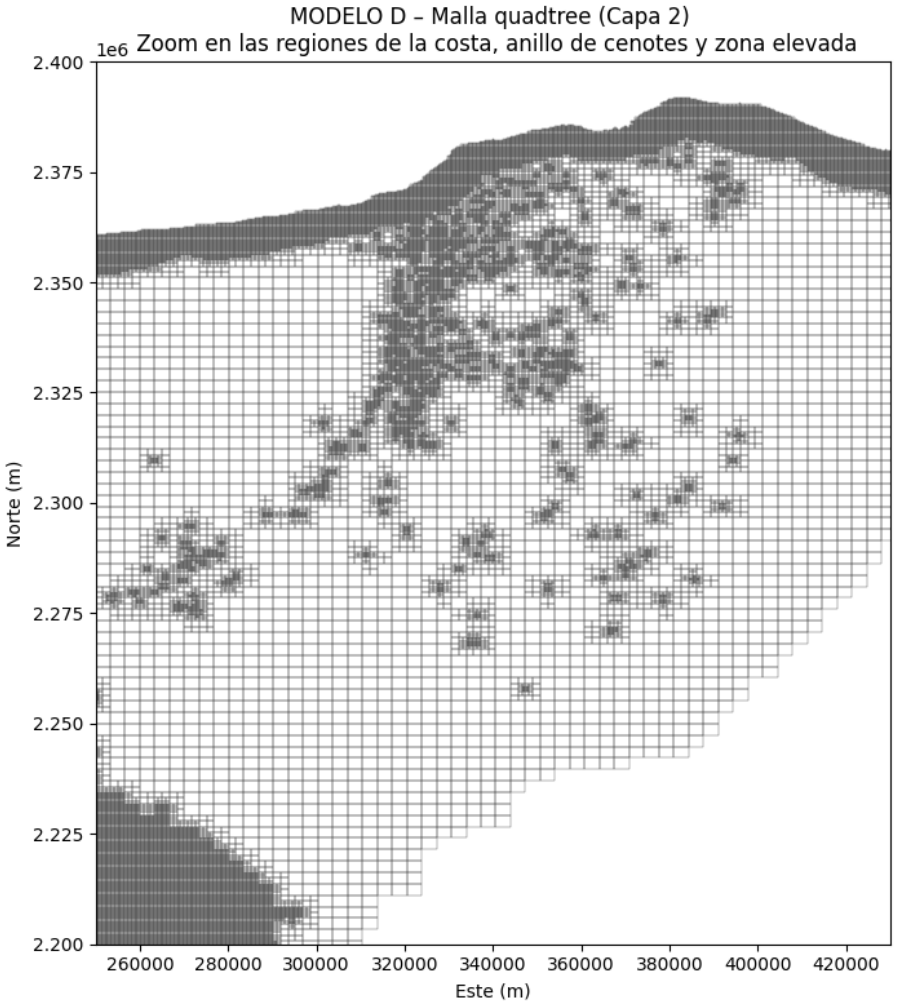


((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.18(a).

Figura 3.18: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 1 del modelo D que muestra el refinamiento de la malla.



((a)) Malla `quadtree` utilizada en la capa 2 del modelo D.



((b)) Acercamiento en la zona dentro del recuadro rojo de la Figura 3.19(a).

Figura 3.19: Acercamiento a la malla `quadtree` de la capa 2 del modelo D que muestra el refinamiento de la malla.

3.1.6. Discretización temporal

El modelo se ejecutó con **1** periodo de estrés y usa **1** paso de tiempo por periodo.

3.1.7. Condiciones Iniciales

Para llevar a cabo la simulación de cada uno de los casos propuestos, se deben definir condiciones iniciales de ciertas propiedades hidráulicas del acuífero del estado de Yucatán, además de definir las cargas hidráulicas iniciales para el paquete de condiciones iniciales, se establecierón los valores iniciales de ciertas propiedades del acuífero como la recarga y la evapotranspiración, para de igual manera definir los paquetes fundamentales de MODFLOW 6, `RCH y EVT`, respectivamente.

3.1.8. Condiciones de frontera

El sistema acuífero kárstico de Yucatán presenta entradas y salidas de flujo de agua desde y hacía el Golfo de México, a través de la frontera de la franja costera del estado. En este trabajo la frontera costera tipo CHD se implementó como una franja de ancho fijo (6.3 km hacia el interior) y no únicamente como la primera fila de celdas adyacentes al mar. Esta decisión se fundamenta en la literatura regional (Marín et al. [2000]), donde se emplean franjas costeras del orden de kilómetros para representar el control hidráulico mar–acuífero y la presencia de una zona costera con comportamiento diferenciado. En particular, se ha propuesto la existencia de una capa semiconfinante/costera asociada a precipitación de carbonato de calcio (“caprock” costero) que modifica la conectividad hidráulica y genera un régimen más confinado respecto al interior no confinado Perry et al. [1989]. Desde el punto de vista numérico, la franja costera reduce la sensibilidad del CHD a la discretización (por ejemplo, a la forma/tamaño de celdas) y favorece una representación más estable del control de nivel piezométrico en la costa. La Figura 3.20 muestra la franja costera empleada.

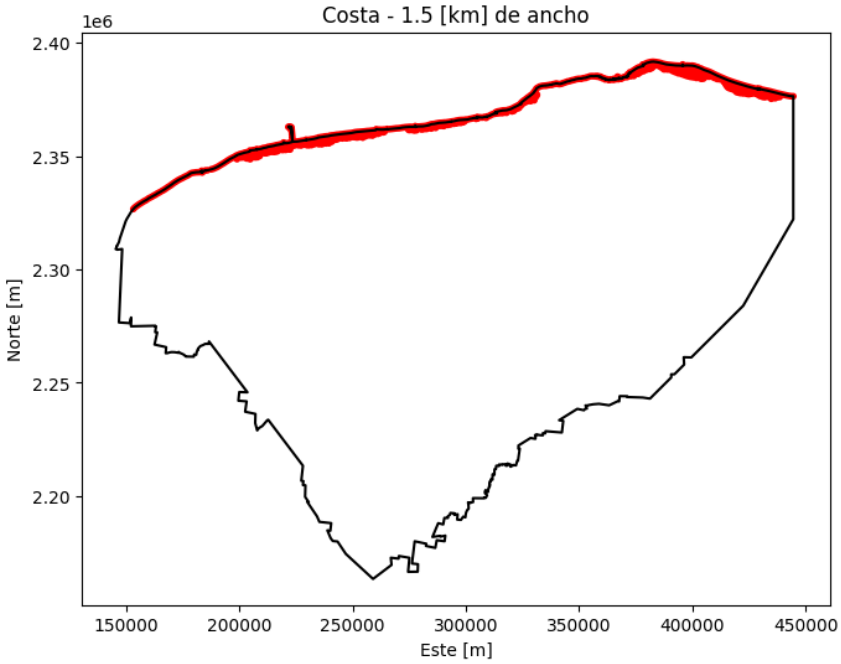


Figura 3.20: Franja costera de 1.5 [km] de ancho, utilizada para definir el paquete de condición de frontera (CHD) en ambas capas de los modelos.

3.1.9. Zonificación y parametrización

La zonificación empleada 3.1 para definir los diferentes tipos de escenarios simulados, conlleva la asignación de diferentes valores de la conductividad hidráulica en base a las propiedades de dichas zonas, los valores iniciales de estos parámetros son lógicos con lo reportado en la literatura (González-Herrera et al. [2002], Bauer-Gottwein et al. [2011], Gondwe et al. [2010]). Las Tablas 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5 muestran los valores iniciales de conductividad hidráulica utilizados en la zonificación espacial de cada caso.

Tabla 3.2: Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso A en [m/s]

Caso A	Zona	Capa 1 (K)	Capa 2 (K)
Homogéneo	Todo el dominio	$9x10^{-3}$	$9x10^{-2}$

Tabla 3.3: Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso B en [m/s]

Caso B	Zona	Capa 1 (K)	Capa 2 (K)
Alta K en anillo de cenotes	Anillo de cenotes	$9x10^{-2}$	$9x10^{-1}$
	Resto del dominio	$9x10^{-3}$	$9x10^{-2}$

Tabla 3.4: Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso C en [m/s]

Caso C	Zona	Capa 1 (K)	Capa 2 (K)
Baja K en Sierra de Ticul	Zona elevada	$1x10^{-3}$	$1x^{-2}$
	Resto del dominio	$9x10^{-3}$	$9x10^{-2}$

Tabla 3.5: Valores iniciales de conductividad hidráulica del caso D en [m/s]

Caso D	Zona	Capa 1 (K)	Capa 2 (K)
Unión de casos A,B y C	Anillo de Cenotes	$9x10^{-2}$	$9x10^{-1}$
	Zona elevada	$1x10^{-3}$	$1x10^{-2}$
	Resto del dominio	$9x10^{-3}$	$9x10^{-2}$

En la franja costera, la capa 1 se asignó con comportamiento confinado/semiconfinado como aproximación conceptual basada en la literatura regional Marín et al. [2000], Perry et al. [1989]. En el litoral de Yucatán se ha propuesto la presencia de una unidad costera de menor permeabilidad (p. ej., costras carbonatadas o "caprock" por precipitación de $CaCO_3$), que puede engrosar con el tiempo y modificar la conectividad hidráulica respecto al interior Marín et al. [2000]. Como consecuencia, el sistema costero presenta una respuesta hidráulica más restringida (menor conexión vertical con la superficie) que el acuífero libre del interior, el cual se mantiene como no confinado, por el contrario, en la capa 2 se asignó a todo el dominio como acuífero confinado. Esta asignación se interpreta como una propiedad efectiva a escala de celda, utilizada para representar el contraste costero y estabilizar la simulación del control hidráulico mar–acuífero (Figura 3.21).

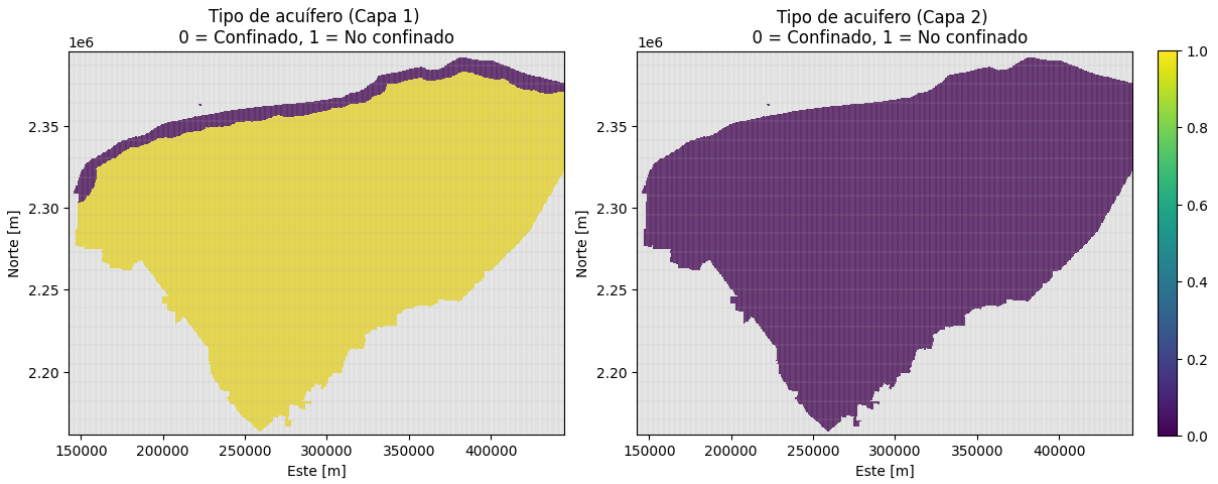


Figura 3.21: Tipo de acuífero asignado en capa 1 y 2 de los modelos.

3.2. Calibración de los modelos y sensibilidad

En este estudio, la calibración del modelo se realizó mediante un enfoque de mínimos cuadrados ponderados empleando PEST++ y MODFLOW 6 como simulador físico. PEST++ es un conjunto de herramientas de software de código abierto diseñado para la estimación de parámetros, análisis de incertidumbre, optimización de gestión y análisis de sensibilidad en modelos numéricos complejos, especialmente en el ámbitos de aguas subterráneas White et al. [2020]. La herramienta central utilizada para llevar a cabo el proceso de calibración fue *pestpp-glm*, su nombre proviene de **Gauss-Levenberg-Marquardt (GLM)**, el algoritmo matemático que utiliza para realizar la estimación de los parámetros, a diferencia de otras herramientas de la suite de PEST++, *pestpp-glm* es una herramienta **determinista**. Esto significa que busca encontrar un único conjunto de parámetros óptimos que minimice la diferencia entre los datos simulados de los modelos con los datos reales observados. El objetivo fue ese mismo, ajustar un conjunto reducido de parámetros hidrogeológicos *efectivos*, de tal forma que se minimizara el desajuste entre las cargas hidráulicas observadas y las simuladas. En términos generales, en cada iteración el algoritmo realiza lo siguiente: (i) ejecuta el modelo con un conjunto de parámetros, (ii) aproxima la matriz Jacobiana mediante la perturbación de parámetros (sensibilidad local), (iii) estima una actualización de parámetros que reduce la función objetivo Φ respetando cotas, y (iv)

repite hasta alcanzar criterios de detenimiento (reducción mínima de Φ, cambio mínimo de parámetros o número máximo de iteraciones). El resultado es un conjunto de parámetros calibrados que minimiza el desajuste de los datos dentro del espacio de parámetros considerado.

La calibración se realizó para cada caso conceptual (A, B, C y D) únicamente en la discretización de referencia, la malla `quadtree`. Posteriormente, para cada caso, los valores de los parámetros efectivos calibrados se transfirieron como parámetros absolutos a las otras discretizaciones (malla estructurada, malla triangular y malla de Voronoi), con el fin de evaluar consistencia y si existe o no, independencia de discretización, manteniendo constantes las hipótesis conceptuales y los parámetros ajustados para cada caso.

Los modelos se calibraron principalmente con respecto a datos observados de niveles piezométricos (grupo `head`), registrados en varios pozos de observación del estado de Yucatán reportados por la Comisión Nacional del Agua (CONAGUA, Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) [2026]). Aunque el acervo de registros disponibles abarca aproximadamente de 1996 a 2025, para la calibración se seleccionó el periodo 2010–2024, esto debido a su mejor cobertura temporal, calidad y actualidad (últimos 15 años), lo cual resulta coherente con el propósito de estimar un campo regional estacionario representativo.

El análisis de sensibilidad se diseñó y se llevó a cabo para identificar los parámetros dominantes y con ello las regiones hidrogeológicas del dominio donde el sistema acuífero de Yucatán responde con mayor intensidad. En particular, se analizó la influencia relativa de los parámetros calibrables sobre el campo de cargas hidráulicas y sobre el patrón regional de gradientes, con el propósito de distinguir entre efectos atribuibles a la parametrización y efectos atribuibles a la discretización.

Dado que el sistema real puede presentar variabilidad temporal asociada a recarga estacional, variabilidad interanual y extracción antropogénica, la calibración se planteó como un ejercicio *estacionario* que representa el *estado medio* del acuífero durante el periodo 2010–2024. En este sentido, el conjunto de observaciones se trató previó a la calibración, para así, reducir el impacto de la no-estacionalidad y de posibles inconsistencias en los registros, de manera que la comparación con los modelos reflejara un campo promedio de cargas hidráulicas, más que condiciones instantáneas.

El control de calidad aplicado a los registros incluyó: (1) eliminación de pozos sin localización confiable o sin un datum altimétrico compatible con el modelo; y (2) filtrado de pozos con número insuficiente de observaciones dentro del periodo 2010–2024. En particular, se removieron pozos con menos de tres registros en dicho periodo, con el fin de evitar que un valor aislado dominara la comparación. Posteriormente, para cada pozo filtrado, se calculó un valor representativo de carga hidráulica mediante la media temporal de sus observaciones disponibles. Finalmente, se revisaron valores extremos mediante percentiles, rangos físicos y una inspección manual, marcando y excluyendo pozos con valores claramente no físicos o inconsistentes con su entorno hidrogeológico. Al término de este proceso, de los 165 pozos inicialmente que se encuentran reportados por CONAGUA Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) [2026], se trabajó con únicamente 135 observaciones (135 pozos).

Este procedimiento es consistente con una calibración estacionaria y permite comparar los modelos con un campo regional promedio de cargas hidráulicas.

No obstante, se reconoce que, si existieran tendencias sostenidas de abatimiento o recuperación en pozos específicos (por ejemplo, asociadas a bombeo local), la hipótesis estacionaria podría introducir sesgos en zonas particulares. En ese caso, un desarrollo futuro natural consistiría en formular un modelo transitorio con recarga y extracción variables en el tiempo para evaluar dichas tendencias de manera explícita.

3.2.1. Experimento de calibración: Submarine Groundwater Discharge (SGD)

Principalmente e inicialmente, se calibró solo usando el ajuste entre cargas hidráulicas observadas y simuladas, posteriormente, a manera de experimento complementario, se agrego una nueva configuración metodológica para la calibración. Se incorporó un grupo adicional de observaciones (grupo `SGD`) por sus siglas en ingles, Submarine Groundwater Discharge, traducido como, **descarga de aguas subterráneas submarinas** Murgulet et al. [2020].

Este conjunto de datos representa la velocidad de descarga de agua subterránea marina

en la zona costera del estado. Los valores fueron simulados asignando puntos medios a segmentos definidos a lo largo de la línea de costa. A cada punto se le atribuyó una velocidad calculada a partir del promedio de las estaciones reportadas por Murgulet et al. [2020] que delimitan cada segmento.

Los autores de Murgulet et al. [2020] señalan que, pese a una planificación rigurosa de la campaña de campo, los datos observados de descarga de agua subterránea (SGD) presentan limitaciones en su fiabilidad debido a la conceptualización empleada, lo que incrementa la incertidumbre en este conjunto de calibración. Por tal motivo, su implementación en el presente estudio es de carácter experimental. El objetivo es evaluar si su inclusión aporta una mejora significativa en el ajuste del error de los modelos y demostrar la viabilidad de integrar datos observados de diversa índole en los procesos de calibración, más sin embargo. no reemplaza el grupo principal de la calibración (grupo *head*).

En este caso, debido a la alta incertidumbre de los datos de SGD, este conjunto de observaciones opera como una **restricción suave**, para guiar la solución hacía descargas costeras plausibles sin dominar el ajuste, controlando su influencia mediante pesos y una normalización consistente. Es por ello que, las dos configuraciones metodológicas establecidas para la calibración son, el grupo `head` y el grupos`heads+SGD`:

- Experimento 1 (grupo `head`): Calibración principal, utilizando únicamente los valores observados de carga hidráulica.
- Experimento 2 (grupo `head+SGD`): incorporación adicional de los datos observados del grupo `SGD` a los datos observados del grupo principal `heads`.

3.2.2. Asignación de datos observados a las mallas

Cada pozo de observación de CONAGUA se asignó a una celda a cada una de las diferentes discretizaciones utilizadas para los modelo A-D, mediante intersección espacial de sus coordenadas UTM y los modelos. La calibración entre los datos simulados y los observados, se realizó utilizando las cargas hidráulicas simuladas en la capa superior (capa 1) de los modelos, en la celda donde se encuentra el pozo piezométrico. En caso de que

existieran múltiples pozos dentro de la misma celda, se utilizó el promedio de ambos pozos. La evaluación del ajuste entre los datos observados y los calibrados se basó en:

- Diferencias puntuales entre carga observada y simulada.
- Estadísticas globales de error (RMSE - Root Mean Square Error, MAE - Median Absolute Error, bias y sesgo).
- Patrón espacial de residuales para identificar zonas sistemáticamente sobre o subestimadas.
- Coherencia hidrogeológica general (gradientes regionales, direcciones de flujo) y cierre de balance hídrico.

3.2.3. Parámetros evaluados

La calibración ajusta los parámetros que presentan mayor incertidumbre y mayor influencia sobre la respuesta del sistema kárstico. En sistemas acuíferos regionales como el de Yucatán, los parámetros que típicamente dominan los niveles de carga hidráulica, incluyen a la conductividad hidráulica, la recarga y la evapotranspiración (Custodio and Llamas [1983], Marín et al. [2000], Bauer-Gottwein et al. [2011]). Así como también efectos antrópicos, como la extracción de agua en pozos, ciudades, etc. La calibración de parámetros se fundamenta en la zonificación hidrogeológica establecida (Fig. 3.1) para las capas 1 y 2 de los modelos conceptuales (A-D). Cada caso fue calibrado utilizando una malla Quadtree como referencia, seleccionada por su capacidad para manejar un refinamiento local complejo en zonas críticas de discretización. Dado que el Caso D representa el escenario de mayor complejidad y realismo, integra la totalidad de las variables de los modelos anteriores. En consecuencia, se calibraron un total de 10 parámetros (consolidados en el Caso D), los cuales se describen a continuación:

1. Conductividad hidráulica en zona elevada de la capa 1: $k_{upland_{L1}}$
2. Conductividad hidráulica en zona elevada de la capa 2: $k_{upland_{L2}}$
3. Conductividad hidráulica en zona de anillo de cenotes de la capa 1: $k_{ring_{L1}}$

4. Conductividad hidráulica en zona de anillo de cenotes de la capa 2: $k_{ring_{L2}}$
5. Conductividad hidráulica en zona plana (resto del dominio) de la capa 1: $k_{rest_{L1}}$
6. Conductividad hidráulica en zona plana (resto del dominio) de la capa 2: $k_{rest_{L2}}$
7. Recarga en zona elevada: r_{upland}
8. Recarga en resto del dominio: r_{rest}
9. Fracción de agua subterránea en zona elevada: fgw_{upland}
10. Fracción de agua subterránea en resto del dominio: fgw_{rest}

Esencialmente, la parametrización se implemento mediante factores multiplicativos aplicados sobre campos base del modelo (por ejemplo, $K_{base}, RCH_{base}, EVT_{base}$), manteniendo los límites superiores e inferiores fijados para mantener realismo físico y estabilidad numérica. Se emplearón multiplicadores por zona y capa:

- Multiplicadores de conductividad hidráulica por zona y capa: $mK_{upland_{L1}}$, $mK_{upland_{L2}}$, $mK_{ring_{L1}}$, $mK_{ring_{L2}}$, $mK_{rest_{L1}}$ y $mK_{rest_{L2}}$.
- Multiplicadores de recarga efectiva por zona: mR_{upland} y mR_{rest}.
- Multiplicadores de la fracción de agua subterránea por zona: $mFGW_{upland}$ y $mFGW_{rest}$.

e multiplicadores. En cada ciclo, los parámetros optimizados por PEST++ actualizan los archivos de entrada (paquetes) de MODFLOW 6. Posteriormente, el modelo se ejecuta para extraer las salidas simuladas y comparar el ajuste; este flujo se repite de forma automatizada hasta alcanzar la minimización óptima de la función objetivo Φ. Al final, los rangos de los parámetros efectivos calibrados están basados en órdenes de magnitudes coherentes con los carbonatos kársticos de Yucatán (Gondwe et al. [2010], González-Herrera et al. [2002], Bauer-Gottwein et al. [2011], Marín et al. [2000], Custodio and Llamas [1983]), así como en la estabilidad numérica. Además, se impusieron restricciones para conservar la consistencia hidrogeológica del sistema acuífero de Yucatán, por ejemplo: k **en el anillo de cenotes** $>$ k **en el resto del dominio** en el caso B y D, y k **en la zona elevada** $<$ k **en el resto del dominio** en el caso C y D, por mencionar algunos casos.

3.2.4. Métricas de error

Para cuantificar el ajuste del error entre el conjunto de datos observados y los simulados de los experimentos de calibración, se utilizarón métricas globales de error como RMSE, MBE y MAE. Por ejemplo, sea h_i^{obs} la carga hidráulica observada del pozo i y h_i^{sim} la carga hidráulica simulada en la celda de ese mismo pozo i correspondiente. Con $N = 135$ observaciones de pozo, se calcularon las siguientes métricas del ajuste de error entre estos conjuntos de datos de carga hidráulica:

Raíz cuadrada del error cuadrático medio (Root Mean Square Error - RMSE)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(h_i^{obs} - h_i^{sim}\right)^2}. \tag{3.1}$$

Error absoluto medio (Median Absolute Error - MAE)

$$MAE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|h_i^{obs} - h_i^{sim}\right|. \tag{3.2}$$

Error de sesgo medio (Mean Bias Error - MBE)

$$MBE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(h_i^{sim} - h_i^{obs}\right). \tag{3.3}$$

Además de estos estadísticos globales, se evaluó el patrón espacial de residuales, por medio de:

$$r_i = h_i^{sim} - h_i^{obs}. \tag{3.4}$$

Los residuales se mapearon para identificar regiones con subestimacioens, valores menores al cero de residual $r_i < 0$) ó sobreestimaciones (valores mayores al cero de residual $r_i > 0$). Este análisis es importante porque un modelo puede representar un valor de RMSE aceptable y, aun así, fallar en regiones específicas debido a errores estructurales (condiciones de frontera y/o iniciales, recarga, evapotranspiración o cualquier otro problema ligado

a la zonificación empleada) o debido a la discretización. Finalmente, se uso el balance hídrico como verificación complementaria, específicamente, se verificó que el error de cierre de masa fuera pequeño respecto al flujo total del sistema. Este control es una condición necesaria para interpretar el ajuste de confianza de los modelos.

3.2.5. Diseño del análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad evalúa cómo cambia la respuesta del sistema (modelos) ante variaciones controladas en los parámetros hidrogeológicos. Su objetivo en este estudio es doble: el primero, **identificar parámetros dominantes** que controlan el ajuste del nivel freático y/o la descarga costera, y segundo, **evaluar la identificabilidad**, es decir, qué parámetros pueden estimarse con la información disponible, para así, poder interpretar de forma robusta los resultados de la calibración. De igual manera que en la experimentación planteada en la calibración, se realizó el análisis de sensibilidad en base a dos experimentos, el primer experimento corresponde a la prueba de sensibilidad utilizando únicamente el grupo `head`, y el segundo experimento utilizando el grupo `head+SGD`. Este diseño permite evaluar explícitamente si la inclusión del grupo SGD modifica el ranking de sensibilidad, por ejemplo, resaltando parámetros asociados a las zonas de interés como la zona costera, principalmente.

3.2.6. Fundamentos del análisis de sensibilidad local: Jacobiano y sensibilidad compuesta (CSS)

A diferencia del análisis de sensibilidad global, que evalúa la respuesta del modelo sobre rangos amplios del espacio paramétrico, la *sensibilidad local* cuantifica cómo cambia la salida del modelo ante perturbaciones pequeñas aplicadas alrededor de un conjunto de parámetros de referencia, usualmente el conjunto inicial, calibrado o cercano al óptimo. En este enfoque, el comportamiento del modelo se aproxima localmente por una expansión lineal, por lo que la sensibilidad se interpreta como una propiedad *puntual* del modelo en el entorno del vector de parámetros considerado.

Si $\boldsymbol{\theta}_0 = [\theta_{1,0}, \ldots, \theta_{p,0}]$ denota el vector de parámetros de referencia y $\mathbf{y} = f(\boldsymbol{\theta})$ el vector

de salidas del modelo, entonces para perturbaciones pequeñas $\delta\boldsymbol{\theta}$ se tiene la aproximación:

$$\mathbf{y}(\boldsymbol{\theta}_0 + \delta\boldsymbol{\theta}) \approx \mathbf{y}(\boldsymbol{\theta}_0) + \mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}_0)\,\delta\boldsymbol{\theta}, \tag{3.5}$$

donde $\mathbf{J}$ es la matriz Jacobiana o matriz de sensibilidades locales. Esta matriz constituye la base del análisis local en PEST++, ya que resume la respuesta diferencial de cada observación simulada con respecto a cada parámetro ajustable.

3.2.6.1. Matriz Jacobiana de sensibilidades

La matriz Jacobiana $\mathbf{J}$ contiene las derivadas parciales de las salidas del modelo con respecto a los parámetros:

$$J_{ji} = \left.\frac{\partial y_j}{\partial \theta_i}\right|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0} \qquad j = 1, \ldots, m, \quad i = 1, \ldots, p \tag{3.6}$$

donde m es el número de observaciones simuladas empleadas en la calibración y p el número de parámetros ajustables. Así, cada columna de $\mathbf{J}$ describe cómo responden todas las observaciones ante cambios en un parámetro particular, mientras que cada fila muestra la sensibilidad de una observación específica respecto a todos los parámetros.

En la práctica, PEST++ estima estas derivadas generalmente mediante diferencias finitas alrededor del punto de referencia, es decir, perturbando un parámetro a la vez y evaluando el cambio inducido en las salidas del modelo. De manera esquemática:

$$J_{ji} \approx \frac{y_j(\boldsymbol{\theta}_0 + \Delta_i \mathbf{e}_i) - y_j(\boldsymbol{\theta}_0)}{\Delta_i} \tag{3.7}$$

donde $\mathbf{e}_i$ es el vector unitario asociado al parámetro i y Δ_i es el incremento de perturbación seleccionado para su derivación numérica. Por ello, la sensibilidad local depende no sólo de la estructura del modelo, sino también del punto del espacio paramétrico en el cual se evalúa.

En términos de calibración, la Jacobiana es fundamental porque alimenta el algoritmo de Gauss–Marquardt–Levenberg empleado por PEST++ para construir vectores de actualización de parámetros. Por tanto, la calidad de las sensibilidades locales influye di-

rectamente en la estabilidad numérica, la velocidad de convergencia y la interpretación de la identificabilidad paramétrica.

3.2.6.2. Sensibilidad compuesta del parámetro (CSS)

Aunque la matriz Jacobiana contiene la información elemental de sensibilidad, su interpretación directa puede ser poco práctica cuando existen muchas observaciones y muchos parámetros. Por ello, PEST resume la información de cada columna de la Jacobiana mediante una medida agregada conocida como *sensibilidad compuesta del parámetro*. En muchos trabajos aplicados esta medida se describe informalmente como *CSS* (*Composite Scaled Sensitivity*); en la terminología del manual de PEST, el estadístico base corresponde a la *composite sensitivity*.

La sensibilidad compuesta del parámetro i se expresa como:

$$s_i = \frac{1}{m}\sqrt{(\mathbf{J}^T\mathbf{Q}\mathbf{J})_{ii}} \tag{3.8}$$

donde $\mathbf{Q}$ es la matriz de pesos de observación (o matriz cofactor), usualmente diagonal y formada a partir de los pesos al cuadrado, y m es el número de observaciones con peso distinto de cero. Esta expresión equivale a la magnitud de la columna i de la Jacobiana ponderada, normalizada por el número de observaciones.

La interpretación de s_i es directa: valores altos indican que, en el entorno del punto analizado, pequeños cambios en θ_i producen cambios importantes en el conjunto de salidas ponderadas del modelo; por tanto, el parámetro tiene una influencia local fuerte y suele estar mejor informado por los datos. En contraste, valores bajos sugieren que el parámetro tiene poco efecto sobre las observaciones utilizadas en la calibración, o bien que su efecto queda enmascarado por escalamiento, correlación o formulación del problema inverso.

En modelos hidrogeológicos, esta medida resulta especialmente útil para distinguir entre parámetros que realmente controlan la respuesta hidráulica y parámetros que, aun siendo físicamente relevantes, no pueden identificarse con los datos disponibles. Por ejemplo, una conductividad hidráulica zonal puede exhibir alta sensibilidad compuesta si las cargas observadas responden claramente a sus variaciones, mientras que un parámetro de

evapotranspiración o recarga puede presentar baja sensibilidad si su efecto es pequeño frente a la incertidumbre del sistema o si queda compensado por otros procesos.

En conjunto, la matriz Jacobiana y las sensibilidades compuestas proporcionan una descripción compacta pero poderosa de la estructura local del problema inverso. Estas herramientas permiten evaluar qué parámetros controlan la respuesta del modelo, cuáles están pobremente informados por los datos y hasta qué punto la calibración puede sostener una interpretación física robusta de los parámetros estimados.

3.2.7. Fundamentos del análisis de sensibilidad global: métodos de Morris y Sobol empleados por PEST++

En modelos hidrogeológicos regionales, la incertidumbre en parámetros como la conductividad hidráulica, la recarga y la evapotranspiración se traduce en incertidumbre en las respuestas del modelo, en este caso, en cargas hidráulicas simuladas en pozos de observación y como complemento experimental, en flujos asociados a descargas costeras.
El *análisis de sensibilidad global* busca cuantificar cómo la variabilidad de un conjunto de parámetros $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \ldots, \theta_p]$ se propaga hacia una o varias salidas del modelo $y = f(\boldsymbol{\theta})$, considerando simultáneamente la no linealidad del modelo, la dependencia del efecto de un parámetro con respecto al rango explorado, y la interacción entre parámetros.

En este trabajo se emplearon dos familias de métodos globales implementados en PEST++: el método de Morris (screening) y el análisis de Sobol (descomposición de varianza). Ambos enfoques son complementarios: Morris se utiliza para *identificar rápidamente* parámetros influyentes a bajo costo computacional, mientras que Sobol cuantifica las *contribuciones de varianza* de estos parámetros (efectos de primer orden y totales) con mayor rigor pero a un mayor costo computacional.

3.2.7.1. Método de Morris (Efectos elementales)

El método de Morris, también conocido como *Elementary Effects* (EE) ó *Efectos Elementales* en español, es un procedimiento de *screening* diseñado para clasificar parámetros según su influencia relativa sobre la salida del modelo. Se trabaja sobre el espacio paramé-

trico reescalado $[0,1]^p$ (o $[-1,1]^p$) y se define un incremento discreto Δ sobre una malla de L niveles. Para una trayectoria r (una secuencia de evaluaciones del modelo), el efecto elemental del parámetro θ_i se define como:

$$EE_i^{(r)} = \frac{f(\boldsymbol{\theta}^{(r)} + \Delta\,\mathbf{e}_i) - f(\boldsymbol{\theta}^{(r)})}{\Delta}, \tag{3.9}$$

donde $\mathbf{e}_i$ es el vector unitario en la dirección del parámetro i. Cada trayectoria genera un conjunto de $EE_i^{(r)}$ para $i = 1, \ldots, p$, y al repetir R trayectorias se obtiene una distribución de efectos elementales para cada parámetro.

Los estadísticos clásicos de Morris utilizados por PEST++ son:

$$\mu_i^* = \frac{1}{R}\sum_{r=1}^{R}\left|EE_i^{(r)}\right|, \qquad \sigma_i = \sqrt{\frac{1}{R-1}\sum_{r=1}^{R}\left(EE_i^{(r)} - \overline{EE}_i\right)^2}. \tag{3.10}$$

Aquí, μ_i^* (media absoluta) mide la influencia global del parámetro: valores altos indican que cambios en θ_i producen cambios importantes en la salida. Por su parte, σ_i mide la variabilidad de los efectos elementales; valores altos suelen asociarse a *no linealidad* y/o *interacciones* con otros parámetros (es decir, el efecto de θ_i depende del punto del espacio paramétrico). En interpretación práctica: parámetros con μ_i^* alto son dominantes, mientras que parámetros con σ_i alto sugieren comportamientos no lineales o acoplamientos entre procesos (por ejemplo, compensaciones entre recarga y conductividad).

En PEST++, Morris se utiliza para obtener un ranking de sensibilidad para una o varias medidas de desempeño, y para orientar el enfoque de calibración y el diseño de experimentos posteriores. En modelos de alta dimensionalidad, este filtrado permite concentrar el esfuerzo de calibración en parámetros identificables y evitar ajustes incorrectos.

3.2.7.2. Análisis de Sobol (descomposición de varianza)

El análisis de Sobol es un método de sensibilidad global basado en la *descomposición de la varianza* de la salida $y = f(\boldsymbol{\theta})$. Asumiendo que los parámetros son variables aleatorias independientes en rangos definidos, la varianza total de y se puede descomponer en

contribuciones debidas a efectos individuales y a interacciones:

$$\mathrm{Var}(y) = \sum_{i=1}^{p} V_i + \sum_{i<j} V_{ij} + \sum_{i<j<k} V_{ijk} + \cdots + V_{1\cdots p}, \tag{3.11}$$

donde $V_i = \mathrm{Var}\big(\mathbb{E}[y|\theta_i]\big)$ representa el aporte a la varianza debido al parámetro i por sí solo (efecto de primer orden), V_{ij} corresponde a la interacción entre i y j, etc.

Con base en esta descomposición, los índices de Sobol más utilizados son:

Índice de primer orden.

$$S_i = \frac{V_i}{\mathrm{Var}(y)} = \frac{\mathrm{Var}\big(\mathbb{E}[y|\theta_i]\big)}{\mathrm{Var}(y)}. \tag{3.12}$$

Este índice mide la fracción de varianza explicada *únicamente* por el parámetro θ_i. Valores grandes indican que θ_i controla de manera directa una porción importante de la incertidumbre de la salida.

Índice total.

$$S_{T_i} = 1 - \frac{\mathrm{Var}\big(\mathbb{E}[y|\boldsymbol{\theta}_{\sim i}]\big)}{\mathrm{Var}(y)}, \tag{3.13}$$

donde $\boldsymbol{\theta}_{\sim i}$ denota el conjunto de todos los parámetros excepto θ_i. El índice total cuantifica el efecto de θ_i *incluyendo* todas sus interacciones con otros parámetros. En general, si $S_{T_i} - S_i$ es grande, entonces las interacciones son relevantes (el parámetro actúa en conjunto con otros para explicar la varianza).

En modelos hidrogeológicos, esta distinción es particularmente útil porque procesos como la recarga, evapotranspiración y/o conductividad pueden compensarse parcialmente: por ejemplo, un incremento en recarga puede ser "absorbido" por un incremento en conductividad o por cambios en la extracción, generando equifinalidad. Los índices S_i y S_{T_i} permiten cuantificar si un parámetro es identificable de forma directa (alto S_i) o si su efecto depende de interacciones (alto S_{T_i} pero bajo S_i).

3.2.7.3. Consideraciones prácticas e interpretación en el presente estudio

En la práctica, tanto el análisis de sensibilidad global (Morris y Sobol) como el análisis de sensibilidad local basado en la matriz Jacobiana requieren definir con claridad cuatro aspectos fundamentales:

1. el conjunto de parámetros a explorar o ajustar,
2. sus rangos (bounds) y transformaciones (muestreo logarítmico para K y muestreo lineal para los demás parámetros),
3. la(s) salida(s) de interés,
4. y, en el caso de la sensibilidad local, el punto del espacio paramétrico en el cual se evalúan las derivadas, ya que la respuesta es dependiente de la solución de referencia.

El uso de dos experimentos (grupos `head` y `head+SGD`) permite evaluar si la inclusión del grupo `SGD` modifica el ranking de sensibilidad, resaltando parámetros vinculados a las zonas de interés (anillo de cenotes, zona elevada y/o franja costera) o a procesos específicos (recarga y/o evapotranspiración). Esta comparación es relevante tanto en el contexto global como local, ya que la incorporación de observaciones adicionales puede cambiar no sólo la importancia relativa de los parámetros, sino también su grado de identificabilidad dentro del problema inverso.

Como guía de interpretación, se adoptan los siguientes criterios generales:

- En Morris, parámetros con μ^* alto se consideran dominantes; parámetros con σ alto sugieren no linealidad y/o interacciones. Este método se emplea principalmente para priorizar parámetros y detectar posibles problemas de identificabilidad.
- En Sobol, parámetros con S_i alto tienen un efecto directo significativo. Parámetros con S_{T_i} alto pero S_i bajo muestran que el efecto principal proviene de interacciones y, por tanto, pueden ser menos identificables de manera única.
- Si varios parámetros presentan efectos totales altos y simultáneamente se observan diferencias $S_{T_i} - S_i$ grandes, es indicio de equifinalidad: múltiples combinaciones paramétricas pueden producir ajustes similares.

- En sensibilidad local, parámetros con sensibilidad compuesta alta indican que pequeñas perturbaciones alrededor de la solución de referencia producen cambios importantes en las observaciones ponderadas del modelo. En consecuencia, estos parámetros suelen estar mejor informados por los datos y tienden a ser más influyentes dentro del proceso de calibración.

- Por el contrario, sensibilidades locales bajas sugieren que el parámetro tiene poca influencia en el entorno de la solución analizada, que su efecto está parcialmente compensado por otros parámetros o que el conjunto de observaciones disponible no lo informa adecuadamente. En estos casos, el parámetro puede presentar baja identificabilidad y su ajuste individual debe interpretarse con cautela.

- Si un parámetro presenta alta sensibilidad local pero baja sensibilidad global, ello indica que su influencia es importante sólo en una región particular del espacio paramétrico, por ejemplo cerca de la solución calibrada. En cambio, si un parámetro exhibe alta sensibilidad global y también alta sensibilidad local, existe evidencia más robusta de que controla de manera consistente la respuesta del modelo.

Desde el punto de vista aplicado, la sensibilidad local se utilizó como una herramienta de diagnóstico complementaria durante la calibración, ya que permite examinar qué parámetros controlan la respuesta del modelo en el entorno inmediato de la solución actual. Esto resulta particularmente útil para evaluar la estabilidad del proceso inverso, detectar parámetros débilmente informados, revisar posibles problemas de escalamiento y sustentar decisiones como fijar, reagrupar o restringir ciertos parámetros durante la calibración.

En contraste, Morris y Sobol permiten explorar el comportamiento del modelo en un dominio paramétrico más amplio, considerando no linealidades e interacciones entre procesos. Por ello, en este estudio ambos enfoques se consideran complementarios: la sensibilidad global se emplea para entender la estructura general de influencia paramétrica y la posible equifinalidad del sistema, mientras que la sensibilidad local permite evaluar la información efectiva contenida en el conjunto de observaciones respecto a la solución calibrada.

Finalmente, se enfatiza que estos resultados dependen de los rangos paramétricos definidos, de las transformaciones adoptadas, de los pesos de observación y, en el caso local, del

punto en el que se calcula la Jacobiana. Por ello, el análisis de sensibilidad global y local se interpreta aquí como una herramienta para comprender el comportamiento del modelo dentro del espacio paramétrico plausible, orientar la calibración y sustentar la discusión de identificabilidad, equifinalidad y limitaciones del enfoque estacionario en un acuífero kárstico.

3.2.7.4. Sensibilidad local (Jacobian/CSS)

A partir del Jacobiano calculado por PEST++ se evaluó la sensibilidad local y la identificabilidad de parámetros mediante:

- **Composite Scaled Sensitivity (CSS):** cuantifica la influencia global de cada parámetro sobre el conjunto de observaciones, y permite un ranking.
- **Matríz de correlación entre parámetros:** identifica dependencia/correlación alta (no-identificabilidad).
- **Leverage por observación:** identifica observaciones con alta influencia en el ajuste.

En términos generales, CSS agrega derivadas parciales de residuales respecto a parámetros (escaladas y ponderadas), permitiendo construir un ranking de influencia local. En el caso del experimento 2, cuando se utilizaron dos grupos de observación (`head+SGD`), se reportó CSS total y, de manera complementaria, CSS por grupo para distinguir qué parámetros controlan principalmente niveles piezométricos y cuáles controlan el ajuste costero:

- **CSS total:** usando todos los grupos de observaciones (`head+SGD`).
- **CSS por grupo:** usando únicamente observaciones del grupo `head` o del grupo `SGD`, lo cual permite distinguir qué parámetros controlan principalmente el nivel freático vs. la descarga costera.

3.2.8. Sensibilidad global (Morris y Sobol)

Además de la sensibilidad local, se implementó un análisis de sensibilidad global basado en muestro del espacio parámetrico y ejecuciones repetidas del modelo. Se seleccionó una

salida escalar por ejecución (por ejemplo, RMSE_{head} y/o RMSE_{SGD}):

- **Morris (screening):** se aplicó para clasificar parámetros por influencia global usando $\mu*$ (efecto promedio absoluto) y σ (no linealidad/interacciones). Esta etapa permite identificar un subconjunto reducido de parámetros dominantes con un costo computacional moderado.
- **Sobol:** se aplicó sobre el subconjunto dominante para cuantificar efectos de primer orden (S_1) y el efecto total (ST), separando contribuciones directas e interacciones.

Este esquema en dos etapas (Morris → Sobol) reduce el costo del análisis global y proporciona un diagnóstico robusto de qué parámetros controlan el ajuste del modelo en un sentido global, más allá del punto calibrado.

3.3. Discusión de la simulación numérica (control de calidad)

3.3.1. Convergencia del solucionador y estabilidad

La solución numérica del modelo se obtuvo mediante el ya descrito paquete IMS (Iterative Model Solver) de MODFLOW 6 A.1.1. La convergencia del solver, se evaluó con base en los criterios de cierre de la solución para carga hidráulica y, cuando aplicó, para flujo. En términos operativos, una ejecución se consideró estable cuando: (i) alcanzó los criterios de cierre definidos, (ii) mantuvo un número razonable de iteraciones por paso, y (iii) no presentó oscilaciones numéricas ni valores no físicos en la distribución de las cargas hidráulicas. En cada simulación se registrarón los indicadores reportados por MODFLOW 6: numero total de iteraciones, número máximo de iteraciones por paso, y residuales finales asociados al sistema lineal. Estos valores se compararon entre mallas para asegurar que los cambios en discretización no indujeran problemas de estabilidad. La estabilidad numérica fue especialmente relevante en zonas donde se definieron contrastes fuertes de conductividad hidráulica que es donde la geometría de la malla es más compleja. Cuando

una simulación mostró dificultades de convergencia, se aplicarón medidas correctivs conservadoras. Estas medidas incluyeron el ajuste de parámetros del IMS como los son las tolerancias, el número máximo de iteraciones y los esquemas de relajación, asi como el refinamiento o control de la malla en zonas con celdas altamente distorsionadas o de área efectiva reducida. En todos los casos se trató de evitar modificar parámetros hidrológicos para forzar la convergencia. El objetivo fue preservar la coherencia física del modelo y controlar únicamente aspectos numéricos.

3.3.2. Balance hídrico y coherencia física

El control de calidad del modelo incluyó la revision sistemática del balance hídrico global y por componentes. Para cada simulación se evaluó el cierre de masa reportado por MODFLOW 6, considerando el volumen total de entradas y salidas del dominio. Un cierre de masa adecuado es condición necesaria para interpretar cargas y flujos con confianza, ya que indica que la solución numérica conserva el flujo dentro de tolerancias aceptables. El balance se analizó en dos niveles:

1. Se revisó el balance gobal para verificar que la diferencia entre entradas y salidas fuera pequeña respecto al flujo total del sistema.

2. Se desagregó el balance por paquete para identificar qué componentes dominan el flujo.

En este estudio se analizaron principalmente los aportes asociados a recarga (RCH), evapotranspiración (EVT), extracción de pozos (WEL) y los flujos a través de fronteras hidráulicas (CHD en este estudio). esta evaluación permitio verificar que los órdenes de magnitud sean coherentes con el marco conceptual del acuífero. Ademas, se comparó el balance entre mallas y entre casos. La consistencia del balance entre discretizaciones respalda que las diferencias en resultados se deben a cambios físicos y no a artefactos numéricos. Finalmente, se verificó la coherencia física mediante la inspección de la dirección general de los gradientes, patrones de flujo hacia zonas de descarga esperadas, y ausencia de fuentes/sumideros no justificados.

3.3.3. Verificación de independencia de malla

La existencia o, no de la *independencia de malla* se evaluó verificando que el campo de cargas hidráulicas y los residuales en los puntos de observación fueran consistentes al cambiar únicamente la discretización espacial, manteniendo constante el modelo conceptual, las condiciones de frontera y el conjunto de parámetros. En particular, para cada caso conceptual (A-D) se calibró únicamente el modelo de referencia con malla `quadtree` y posteriormente se *transfirieron* los parámetros calibrados a las otras discretizaciones (malla estructurada, triangular y de Voronoi). Con cada malla se ejecutó MODFLOW 6 con los parámetros absolutos calibrados y se compararon los niveles simulados en las mismas 135 ubicaciones de los pozos de observación, las métricas globales (RMSE, sesgo y MAE) y la distribución espacial de residuales. Se evaluó e interpretó la consistencia de estos indicadores entre las mallas para probar la existencia de la independencia práctica de discretización, mientras que discrepancias sistemáticas se analizaron en términos de diferencias geométricas en la representación de frontera costera y/o asignación de celdas activas.

3.3.4. Limitaciones e incertidumbre

El modelo representa un sistema kárstico mediante un enfoque de medio equivalente. Esta aproximación es adecuada para análisis regionales y comparaciones de escenarios, pero no reproduce de forma explicita conductos, sumideros discretos o conectividad preferencial a escala local. Por lo tanto, el modelo es más confiable para interpretar tendencias regionales de carga, gradiente y balance hídrico, que para predecir condiciones puntuales a escala de cenote o conducto. Las incertidumbres provienen de los datos de entrada. Como previamente se mencionó, la recarga se estima a partir de la interpolación de la media de los datos de precipitación del periodo 1996-2024 reportados en la base de datos climatológica nacional de la CONAGUA [Comisión Nacional del Agua (CONAGUA), 2026] (visitada el 7 de Diciembre de 2025), lo cual introduce variabilidad espacial y temporal difícil de validar sin mediciones directas. De forma similar, la evapotranspiración representa un proceso complejo que depende del suelo, vegetación y clima. La información de niveles observados

es escasa, no uniforme y no sincrónica, lo que limita la calibración en ciertas zonas del dominio. En consecuencia, la calibración puede no ser única y diferentes combinaciones de parámetros pueden producir ajustes similares. También existen limitaciones asociadas a la discretización. Las mallas evaluadas aproximan la geometría del dominio y de las zonas refinadas. En mallas no estructuradas o altamente refinadas pueden aparecer celdas con geometría menos favorable, lo cual incrementa las exigencias numéricas. Aunque se compararon diferentes discretizaciones, el estudio no garantiza independencia total de malla en todos los indicadores, especialmente en zonas con fuertes contrastes de propiedades (zonas de refinamiento). Finalmente, se reconoce que puede existir incertidumbre paramétrica, principalmente asociada a la conductividad hidráulica y la recarga. Por esta razón, el trabajo complementa la simulación con análisis de sensibilidad. Este análisis identifica los parámetros y regiones que controlan la respuesta del modelo y orienta recomendaciones para la adquisición de datos y trabajos futuros. Los resultados de los conceptos abordados en este Capitulo se presentan en el Capitulo **??** de resultados; se presentan los resultados de los conceptos abordados en este capitulo.

Capítulo 4

METODOLOGÍA

En este capitulo se presenta el flujo de trabajo del modelo numérico del estado de Yucatán de la construcción, ejecución y evaluación de los modelos numéricos. El diseño del presente capitulo garantiza reproducibilidad y trazabilidad entre los modelos, discretizaciones (mallas), paquetes de MODFLOW 6 y escenarios/casos.

El flujo general incluye:

- Preparación de datos
- Construcción de mallas
- Implementación en FloPy/MODFLOW 6
- Ejecución de escenarios
- Evaluación mediante métricas y controles numéricos

4.1. Flujo de trabajo reproducible

El flujo de trabajo se implementó en Python por medio de la libreria FloPy mediante scripts organizados por malla y modelo. Para asegurar reproducibilidad se documentan los siguientes aspectos fundamentales:

- Entorno computacional: **Linux y Windows OS**, Python **version 3.10.0 y 3.9.18**, MODFLOW 6 **version 6.6.3**, FloPy **version 3.9.5 y/o 3.10.0**.

- Organización de carpetas: Espacio de trabajo por caso conceptual y por malla (Véase Apéndice C).
- Parámetros globales: sistema de coordenadas, unidades y constantes usadas.
- Registro de configuraciones: archivos de control o diccionarios con valores por caso.

4.2. Datos de entrada y preprocesamiento

Los datos de entrada incluyen información topográfica, hidrológica/hidrogeológica. Todos los datos/mapas fueron transformados al sistema de referencia del modelo **EPSG/UTM zona 16** y homogenizados en unidades. El preprocesamiento se enfocó en asegurar consistencia espacial y reducir errores por geometrías inválidas, duplicados o registros incompletos.

En este estudio se usaron, como mínimo, los siguientes insumos:

- Topografía: Modelo Digital de Elevaciones con resolución de 15 [m] (Figura 4.1), obtenido de Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI), que define la elevación del estado de Yucatán, y por consecuente, es utilizado como la elevación de los modelos.

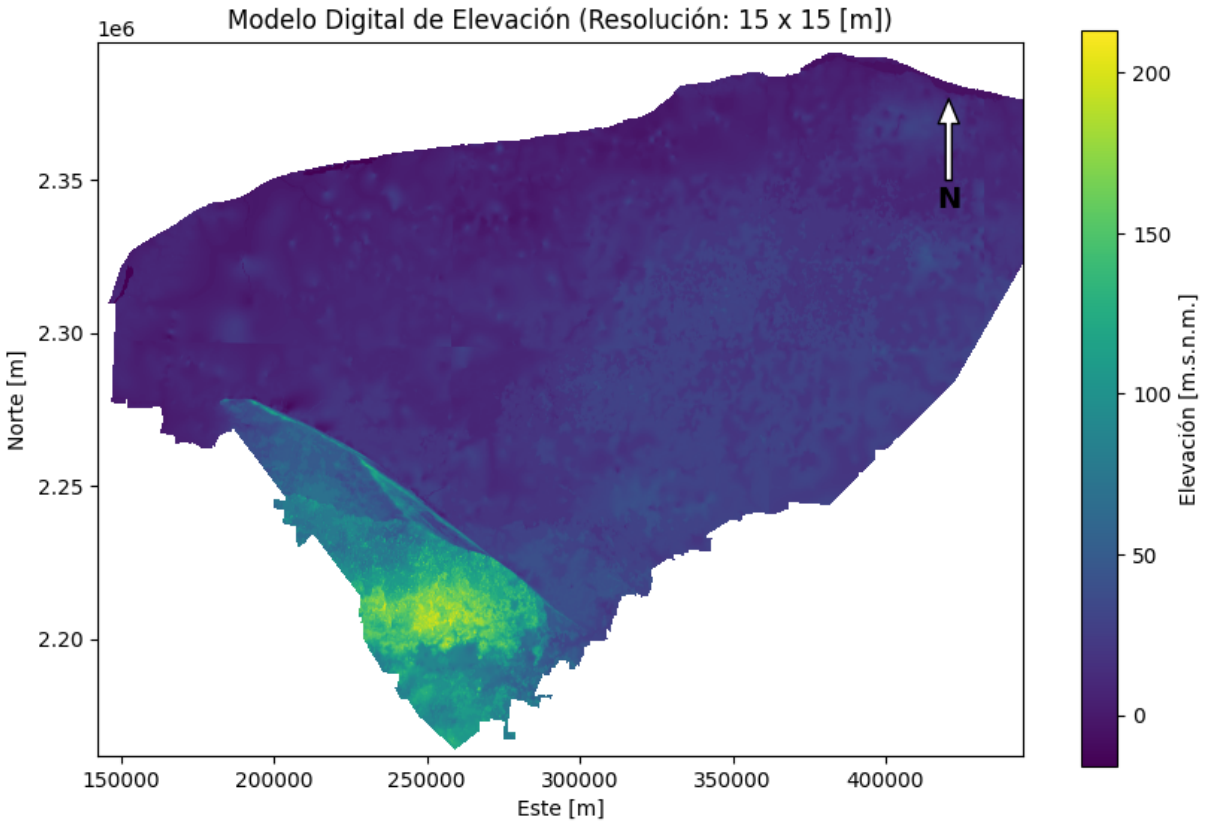


Figura 4.1: Modelo Digital de Elevación del estado de Yucatán.

- Información geológica: mapas geológicos de unidades/zonas del estado de Yucatán obtenidos del Servicio Geológico Mexicano (SGM), los cuales integran cartografía geológico-minera en escalas 1:250,000 para el análisis regional y 1:50,000 para el detalle de unidades estratigráficas, parametrización y límites.

- Información hidrogeológica: Para inicializar el campo inicial de cargas hidráulicas de los modelo, se utilizaron los registros piezómetricos disponibles para el periodo 1996-2024 reportados por CONAGUA Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) [2026]. Este largo periodo de datos se empleó exclusivamente con fines de inicialización numérica de las cargas hidráulicas para las simulaciones, requerido por el paquete *Initial Conditions (IC)* de MODFLOW 6, de esta manera, se obtiene un campo regional suavizado y robusto, reduciendo la influencia de valores atípicos y minimizando gradientes artificiales al inicio de la simulación, ayudando al *solver* de MODFLOW 6 a converger más rápido.

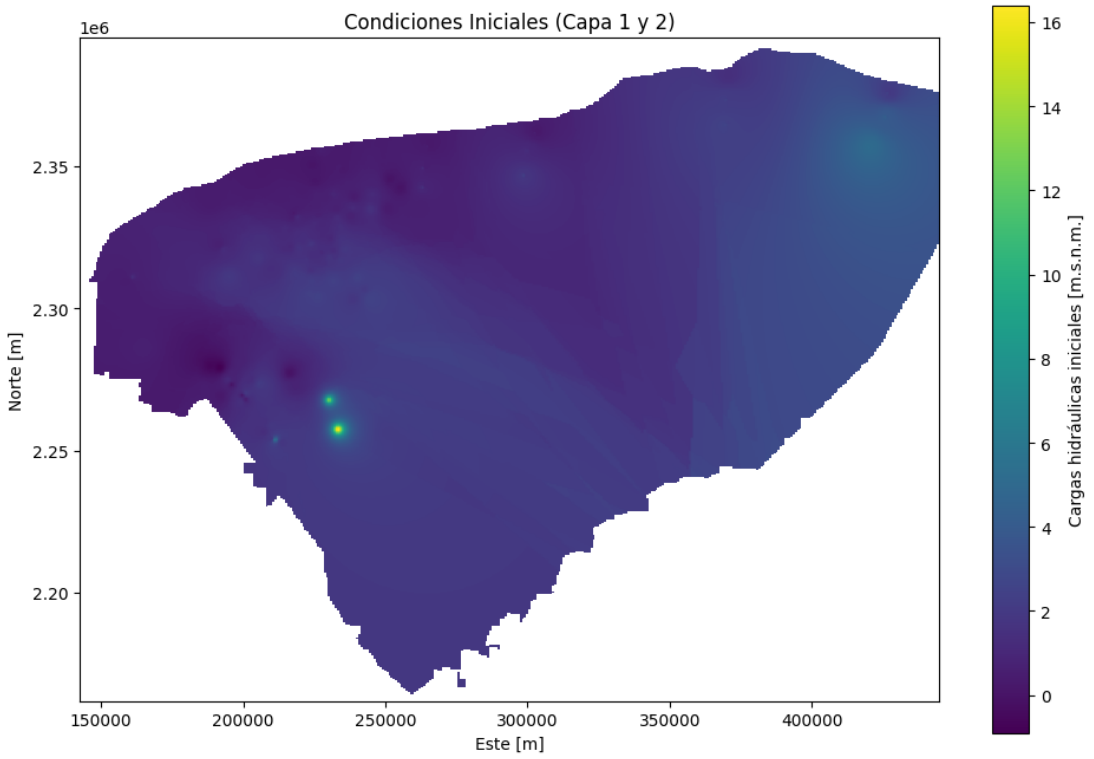


Figura 4.2: Cargas hidráulicas iniciales de las capas 1 y 2, para todos los modelos.

- Datos observados para calibración: Se utilizó el conjunto de datos de niveles piezométricos observados y reportados en los pozos de CONAGUA (Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) [2026]), del periodo 2010-2024. Este intervalo se seleccionó porque representa el estado hidrológico más reciente y mejor documentado del acuífero, reduce la mezcla de condiciones históricas potencialmente no comparables (cambios en pozos, métodos de medición, y evolución del bombeo/uso del suelo), y así maximiza la consistencia temporal de las observaciones usadas como objetivos de la calibración. En consecuencia, el periodo 2010-2024 se considera más apropiado para estimar parámetros .^{ef}ectivos"del sistema de Yucatán bajo condiciones actuales o más cercanas al presente, la Figura 4.3 muestra este insumo.

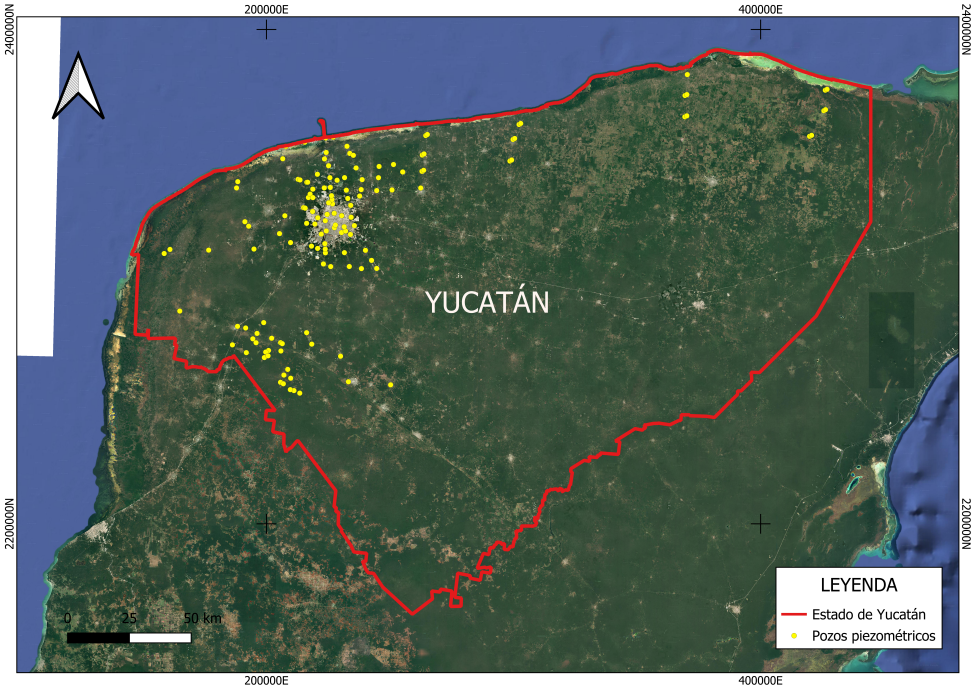


Figura 4.3: 165 pozos piezométricos (puntos amarillos) de observación en el estado de Yucatán, CONAGUA.

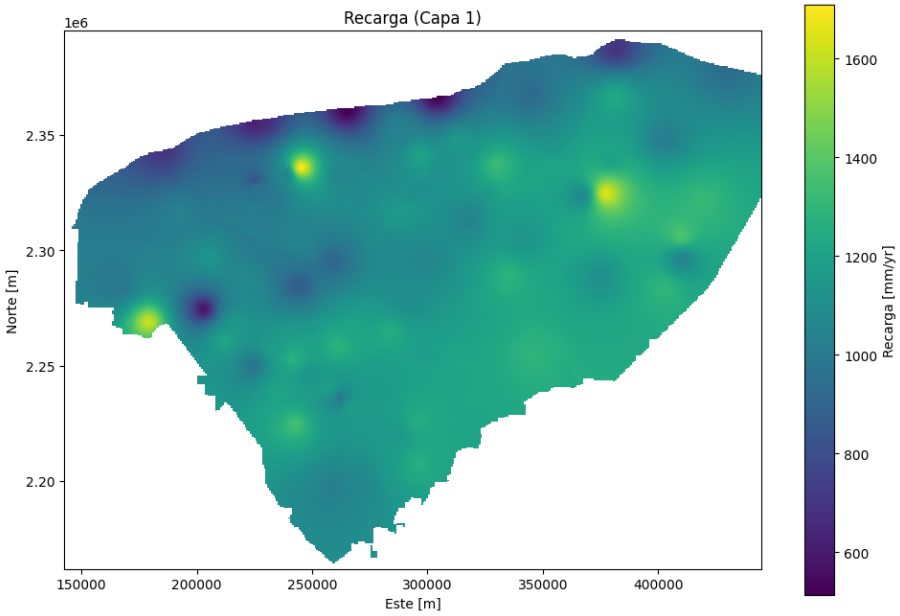
- Forzamientos hidrológico (Recarga-RCH): La recarga se representó como *recarga meteórica efectiva* y se estimó a partir de la precipitación pluvial $\mathcal{P}$ (en [mm]) reportada por la Base de Datos Climatológica Nacional de CONAGUA (CONAGUA-SMN [2024]). Se seleccionó el periodo de 1994-2024 con el fin de capturar la variabilidad climática interanual y obtener un forzamiento regional consistente con el alcance del modelo. El procedimiento implementado para el procesamiento de la precipitación y la construcción del campo espacial de recarga fue el siguiente, se compiló la precipitación a partir de estaciones climatológicas del estado de Yucatán, y se homogenizó el conjunto de datos para el periodo de estudio; posteriormente, la precipitación se interpolo espacialmente al dominio del modelo mediante un método determinístico (IDW) para obtener un campo continuo $\mathcal{P}(\S)$ (4.2.2); en consecuencia, el campo de precipitación se convirtió a recarga aplicando un coeficiente de infiltración c_{inf}, interpretado como la fracción de la precipitación que efectivamente alcanza el acuífero a escala regional, y finalmente, la recarga se transformó a unidades compatibles con MODFLOW 6. De forma compacta:

$$RCH(x) = \frac{P(x)[mm] \times 10^{-3}[m/mm] \times c_{inf}}{365 \times 86400}[m/s] \tag{4.1}$$

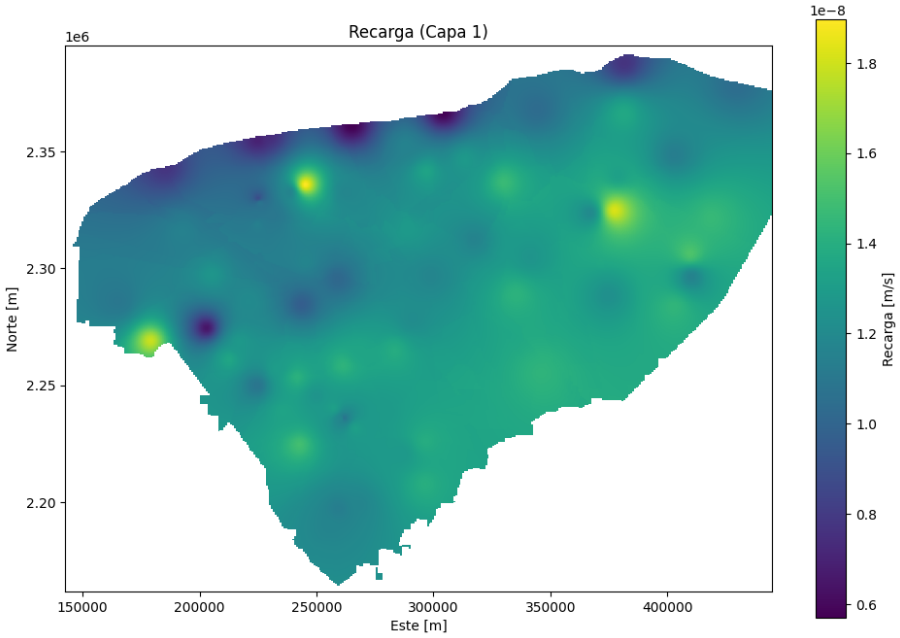
En este trabajo, c_{inf} se trató como parámetro efectivo (y calibrable) porque integra procesos no resueltos explícitamente a escala estatal. Considerando la heterogeneidad hidrogeológica regional y la variabilidad de infiltración, se utilizó una zonificación simple de recarga mediante multiplicadores por región (mR_{upland} y mR_{rest}), como se describió en **??**.

$$\mathrm{RCH}_{final}(\mathbf{x}) = \mathrm{RCH}_{base}(\mathbf{x}) \times \begin{cases} mR_{upland}, & \mathbf{x} \in \text{zona elevada} \\ mR_{rest}, & \mathbf{x} \in \text{resto del dominio.} \end{cases} \tag{4.2}$$

El campo de recarga final (RCH_{final}) se asignó a los modelos únicamente en la capa 1 (en la capa somera, de acuerdo con la conceptualización adoptada), en el paquete `RCH` de MODFLOW 6 como recarga espacialmente distribuida. A escala regional, la precipitación es el principal origen del agua recargada. Si bien es sistemas kársticos la recarga puede ocurrir tanto de forma difusa como concentrada (como dolinas o cenotes), y puede existir recarga antrópica local (retornos de riego o fugas urbanas), la cuantificación espacial y temporal de estas fuentes adicionales requiere inventarios específicos que no están disponibles de manera consistente a escala estatal. Por ello, estos procesos se incorporan de manera implícita, en el término de recarga meteórica efectiva mediante c_{inf} y la zonificación de recarga. En consecuencia, la recarga utilizada en los modelos se interpreta como un término *efectivo* que representa el aporte neto de origen meteórico al acuífero, consistente con el nivel de detalle del estudio y los datos disponibles, la Figura 4.4 muestra la recarga anual en [mm/año] y en [m/s].



((a)) Recarga anual en milímetros al año.

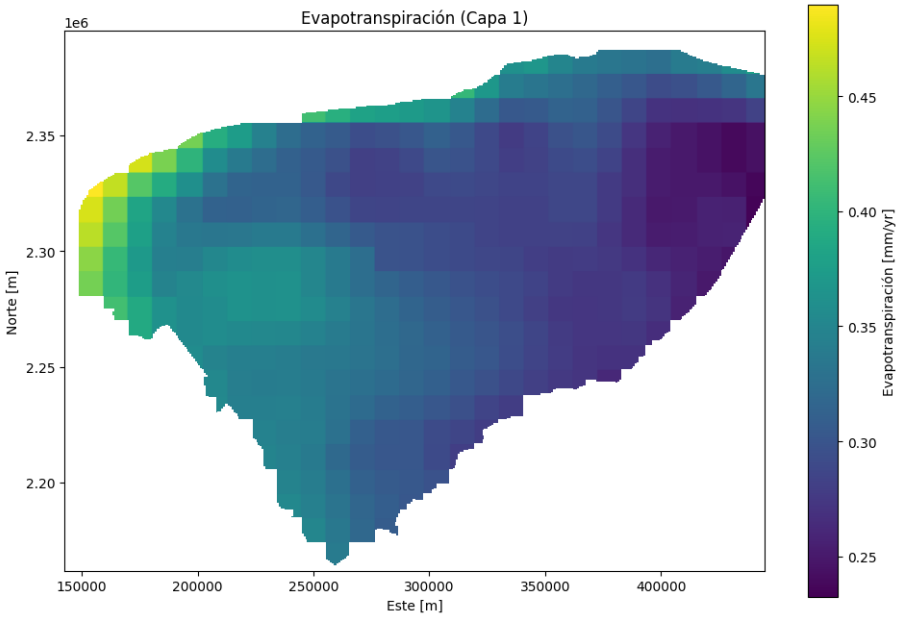


((b)) Recarga en metros sobre segundos.

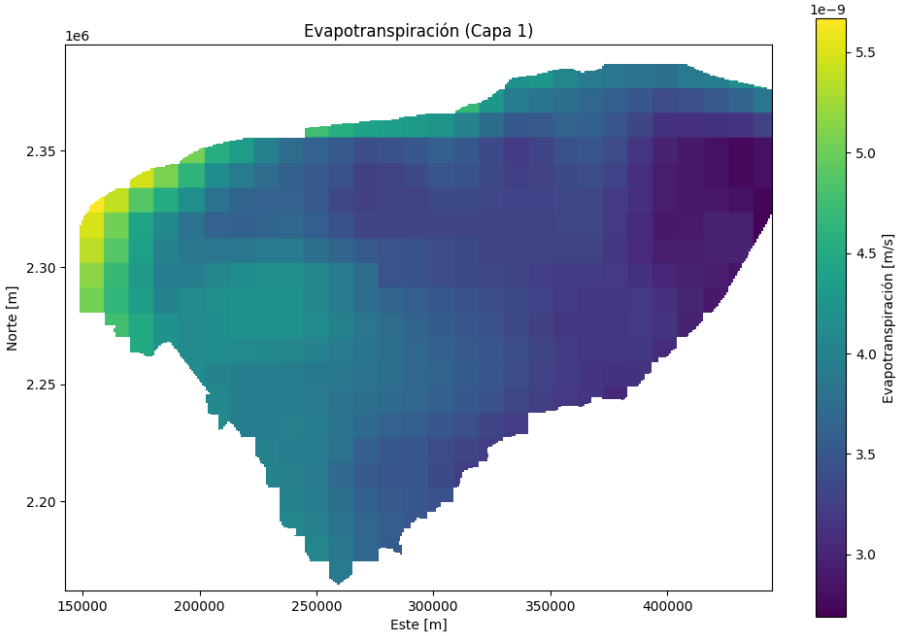
Figura 4.4: Recarga en diferentes unidades de medida, la recarga solo fue aplicada en la capa 1 de los modelos.

- Forzamiento hidrológico (Evapotranspiración-EVT): La evapotranspiración se representó como extracción dependiente de la profundidad al nivel freático mediante el paquete EVT (Figura 4.5). Para EVT, se calculó ET_0 (demanda atmosférica) con

la formulación FAO Penman-Monteith Allen et al. [1998] a partir de del conjunto de datos atmosféricos de ERA5 (Véase Apéndice B) y se transformó a tasas compatibles con MODFLOW 6, moduladas por un factor fgw, por sus siglas en ingles, ground-water fraction (fracción de agua que proviene del acuífero). En conjunto, RCH (entrada) y EVT (salida) constituyen los principales forzamientos climáticos del modelo. El procedimiento de la construcción de este insumo se describe con mayor rígidez en 4.2.1.



((a)) Evapotranspiración anual construida a partir de los datos de ERA5 para el estado de Yucatán, en milímetros al año.



((b)) Evapotranspiración anual construida a partir de los datos de ERA5 para el estado de Yucatán, en metros sobre segundos.

Figura 4.5: Evapotranspiración anual del estado de Yucatán, aplicada a la capa 1 de los modelos.

- Fronteras: se uso el archivo de tipo *shapefile* de la linea de costa nacional obtenido de CONABIO (Figura 4.6), la cual posteriormente se recortó a la zona del estado de

Yucatán, para establecer la condición de carga constante (CHD) igual a 0 (m.s.n.m.) en los primeros 6.3 [km] del ancho de franja costera.

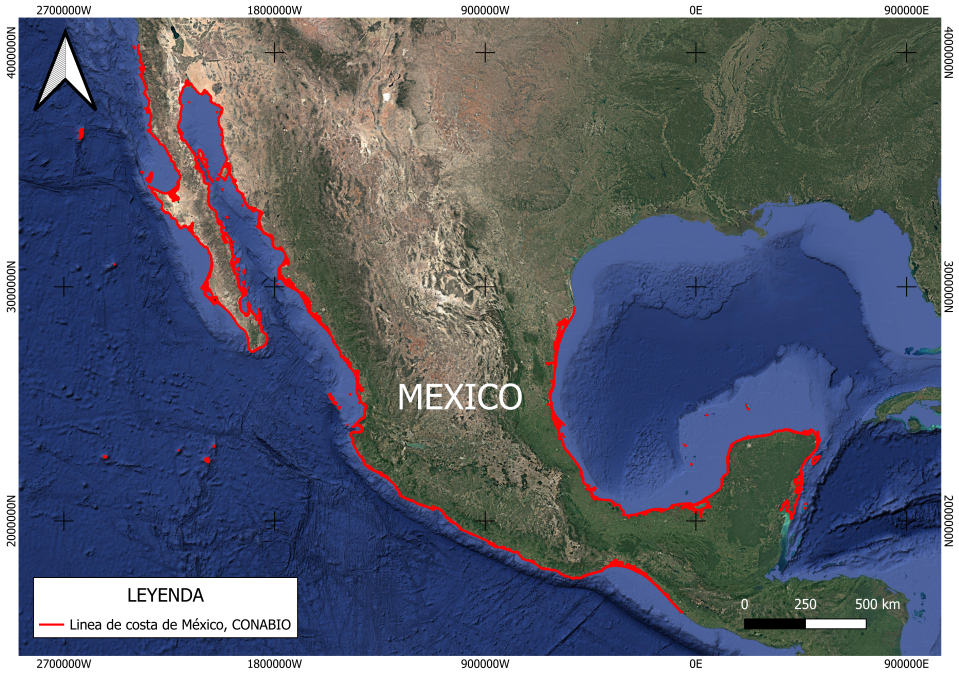


Figura 4.6: Linea de costa de la República Mexicana, CONABIO.

- Bombeo (Well-WEL): La localización de pozos se obtuvo a partir de una capa geográfica de la Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad (CONABIAO), utilizada como insumo para representar la extracción en el modelo mediante el paquete WEL. Esta capa aporta esencialmente las coordenadas de los puntos de extracción y un identificador de pozo; entre otros atributos descriptivos. Esta capa empleada no proporciona de forma completa y consistente para todos los pozos información hidrogeológica/constructiva (profundidad, diámetro, intervalos filtrantes) ni series temporales de volumen de extracción. Es por ello que, en este trabajo el bombeo se representó como un término efectivo. Cabe destacar que, la ausencia de volúmenes por pozo puede introducir no-uniquidad en la estimación de parámetros; por ello, el bombeo se interpreta como parte del balance regional.

- Mapa de densidad de población: ráster obtenido de CONABIO, utilizado junto con el insumo de mapa de pozos, como mapa de pesos para la cantidad de bom-

beo/extracción de agua a partir de la densidad poblacional en el estado de Yucatán (Figura 4.7).

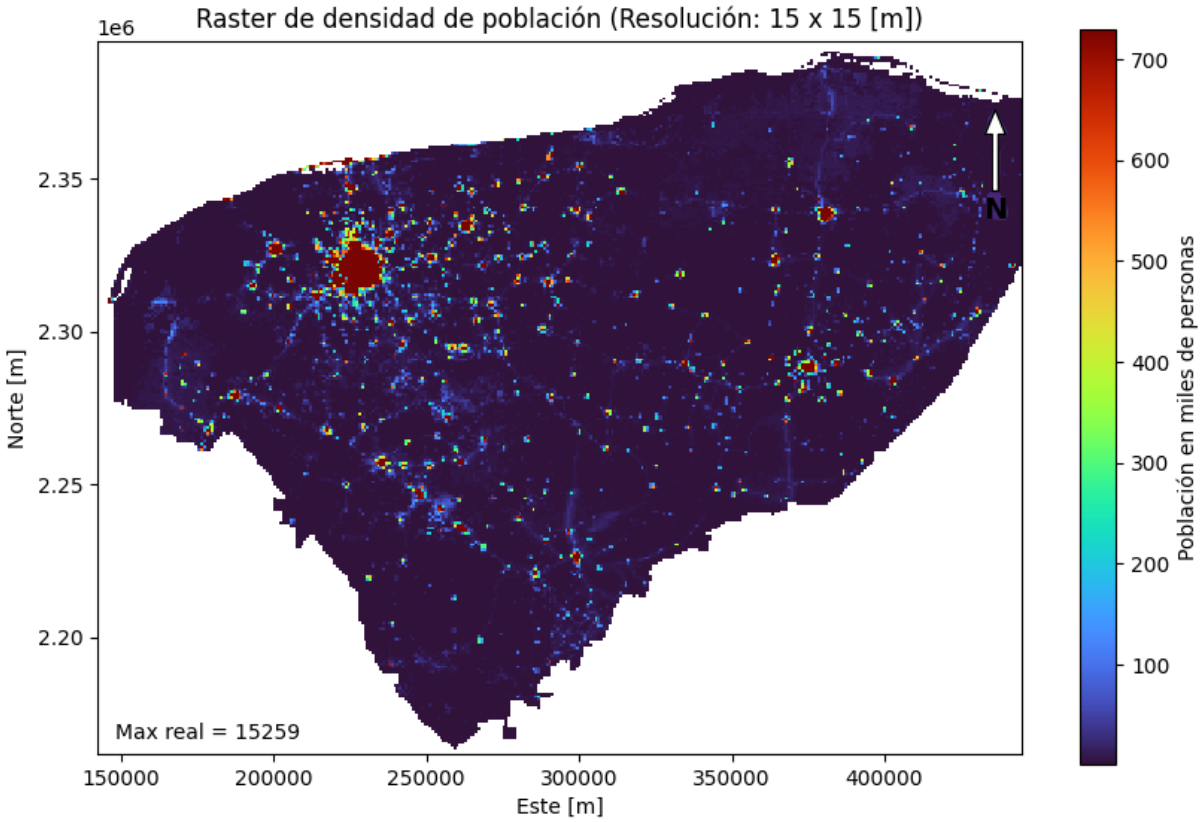


Figura 4.7: Ráster de densidad de población del estado de Yucatán.

- Anillo de cenotes: archivo *shapefile* de los principales cenotes identificados en Yucatán, utilizado para la discretización y refinamiento de esta particular zona, obtenido de [Ortiz-Alemán et al., 2025].

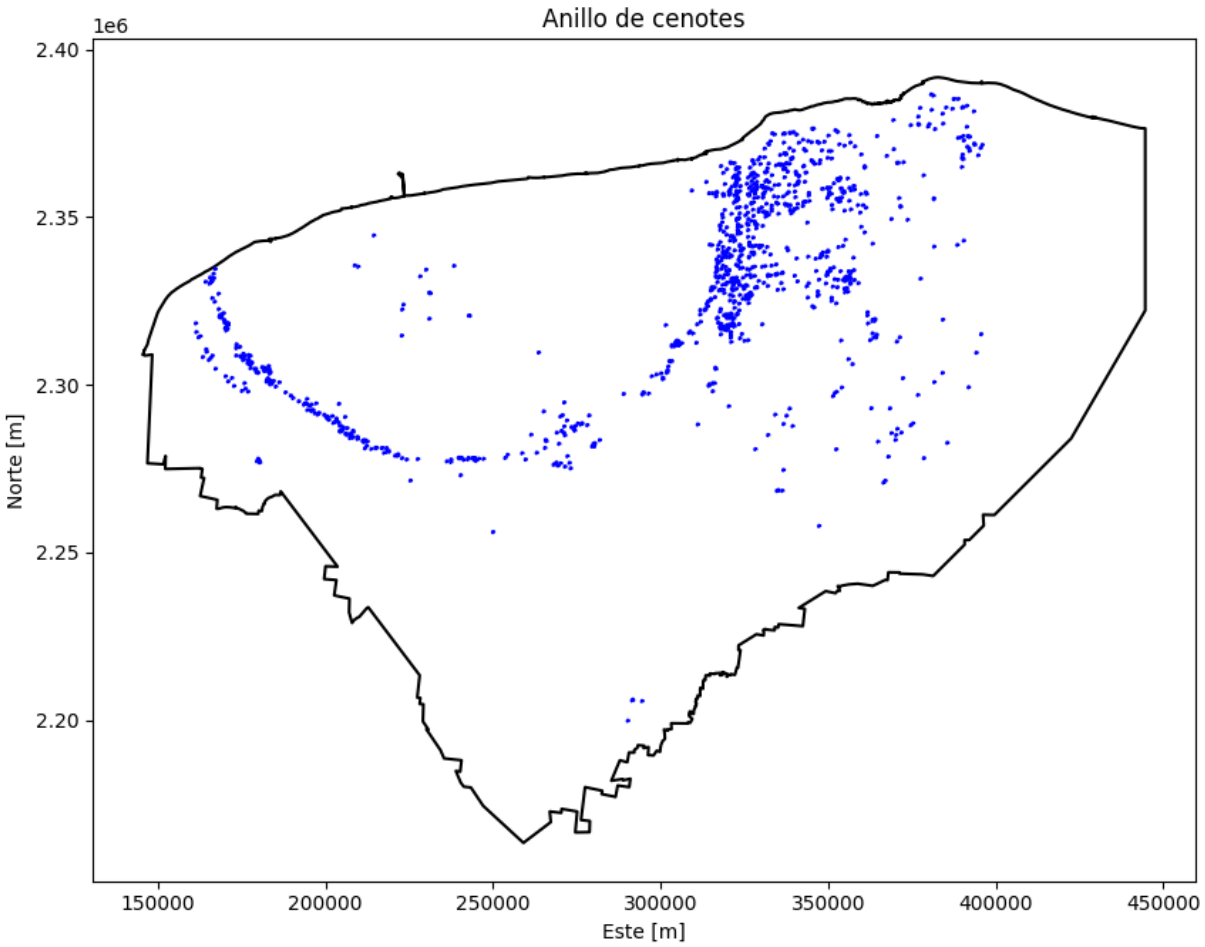


Figura 4.8: Shapefile de anillo de cenotes.

- Zona elevada: archivo *shapefile* creado a partir de el DEM (Figura 4.9), en base a una mascára de elevaciones mayores a 40 (m.s.n.m.) del estado de Yucatán.

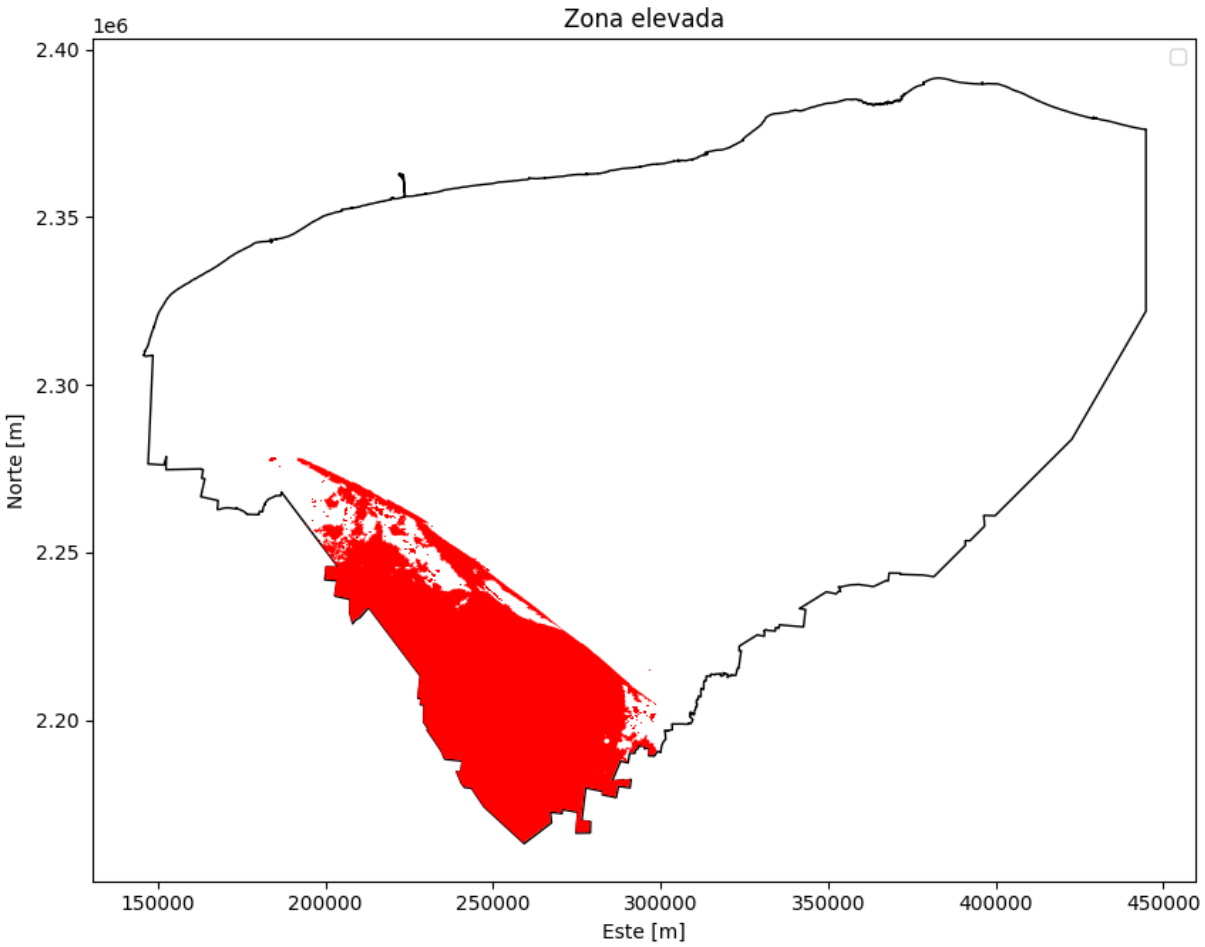


Figura 4.9: Shapefile de la zona elevada del estado de Yucatán.

- Descarga de aguas subterráneas marinas (Submarine Groundwater Discharge):Velocidades de descarga de agua subterránea desde Yucatán hacia el Golfo de México, expresadas en metros por día (m/d). Estos valores se obtuvieron mediante el uso de Radón (^{222}Rn) y fueron reportados por Murgulet et al. [2020]. La ubicación de las mediciones se detalla en el mapa de la Figura 4.10.

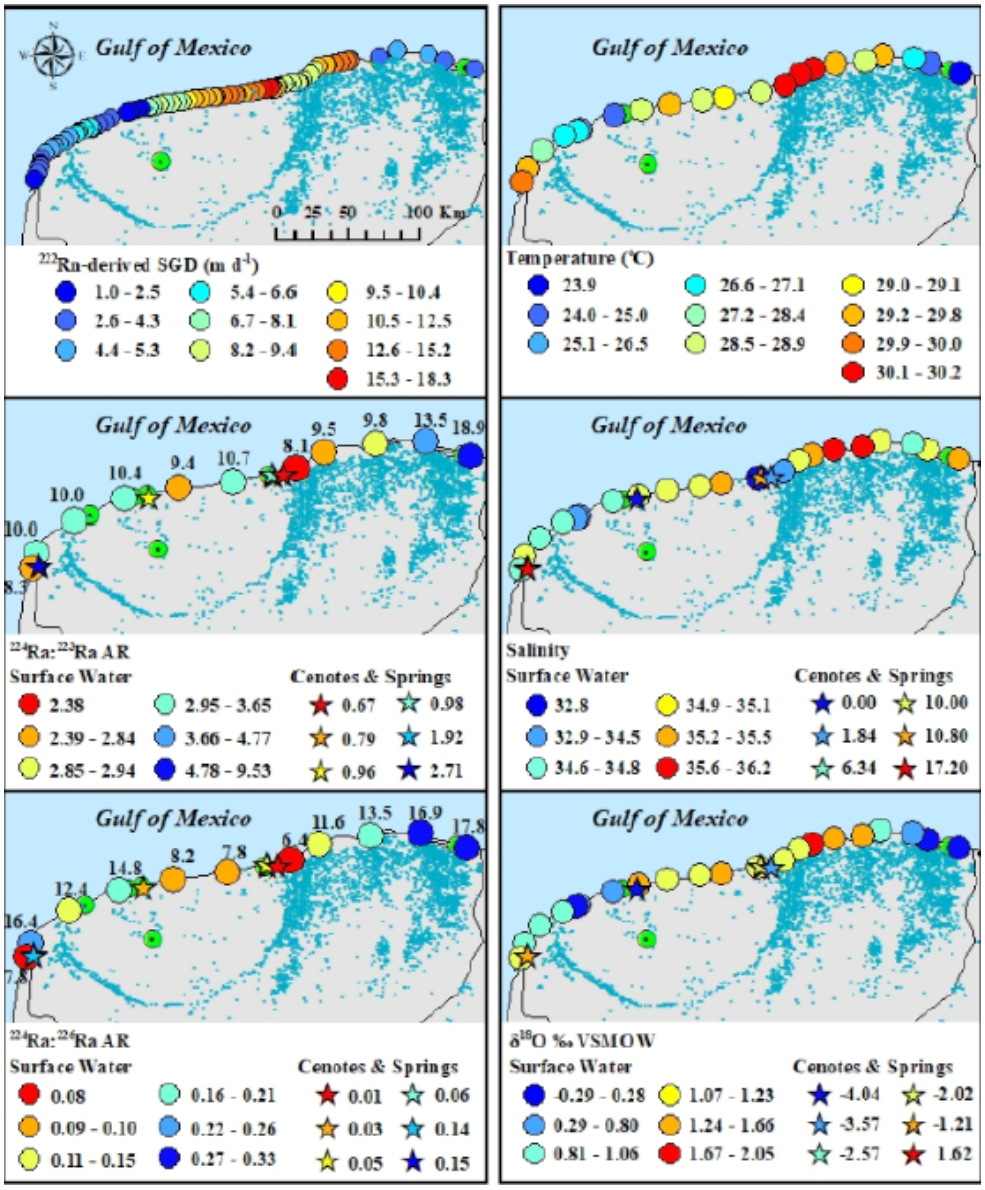


Figura 4.10: Mapa de velocidades de descarga de agua subterránea marina, Figura obtenida de Murgulet et al. [2020].

4.2.1. Generación del insumo de evapotranspiración (EVT) a partir de ERA5

Para estimar la evapotranspiración potencial de referencia (ET_0) se utilizaron datos de re-análisis ERA5 en formato NetCDF. Se descargaron series temporales para el periodo 1996-2024 y se recortaron espacialmente al dominio del estado de Yucatán. El procesamiento se realizo en Python, utilizando lectura y manipulación de NetCDF mediante las

librerías *xarray, y rioxarray* en sus versiones 2025.01.0 y 0.21.0, respectivamente [xarray Developers, 2026] y [rioxarray Developers, 2026].

Variables de entrada La ET_0 se calculó con la formulación FAO Penman-Monteith . Por ello se emplearon variables meteorológicas seleccionadas, compatibles con dicha formulación. De ERA5 se usaron las siguientes variables:

- Temperatura del aire a 2 m.
- Temperatura de punto de rocio a 2 m.
- Componente zonal del viento a 10 m.
- Componente meridional del viento a 10 m.
- Radiación neta solar de onda corta en superficie, acumulada.
- Radiación neta térmica de onda larga en superficie, acumulada.

Fundamento de la formulación FAO Penman–Monteith. La evapotranspiración potencial de referencia ET_0 representa la demanda atmosférica de agua para una superficie de referencia (cultivo estándar tipo pasto bien regado), y se utiliza como base para estimar flujos de evapotranspiración bajo diferentes coberturas y condiciones. La formulación FAO Penman–Monteith combina: (i) un término **radiativo** (energía disponible en superficie) y (ii) un término **aerodinámico** (capacidad de la atmósfera para remover vapor), incorporando explícitamente temperatura, humedad y viento.

A escala diaria, ET_0 se expresa como:

$$ET_0 = \frac{0.408\,\Delta\,(R_n - G) + \gamma\,\frac{900}{T+273}\,u_2\,(e_s - e_a)}{\Delta + \gamma\,(1 + 0.34\,u_2)}, \tag{4.3}$$

donde ET_0 se obtiene típicamente en $\mathrm{mm\,d^{-1}}$; Δ es la pendiente de la curva de presión de vapor de saturación ($\mathrm{kPa\,^\circ C^{-1}}$); R_n es la radiación neta en superficie ($\mathrm{MJ\,m^{-2}\,d^{-1}}$); G es el flujo de calor al suelo ($\mathrm{MJ\,m^{-2}\,d^{-1}}$); γ es la constante psicrométrica ($\mathrm{kPa\,^\circ C^{-1}}$); T es la temperatura media diaria a 2 m ($^\circ$C); u_2 es la velocidad del viento a 2 m ($\mathrm{m\,s^{-1}}$); e_s es la presión de vapor de saturación y e_a la presión de vapor real (kPa).

Conversión de variables ERA5 a términos Penman–Monteith. Las variables de ERA5 utilizadas permiten construir cada término de la ecuación (Apéndice B):

- **Temperatura** T: a partir de temperatura a 2 m (conversión de Kelvin a °C si aplica).
- **Humedad (déficit de presión de vapor** $e_s - e_a$**)**:
  - e_s se calcula con T (por ejemplo mediante expresiones estándar tipo Tetens).
  - e_a se estima a partir de la temperatura de punto de rocío a 2 m, que aproxima el estado real de humedad.
- **Viento** u_2: ERA5 provee componentes zonal y meridional a 10 m; se calcula la magnitud $u_{10} = \sqrt{u^2 + v^2}$ y se ajusta a 2 m mediante un perfil logarítmico estándar:

$$u_2 = u_{10} \, \frac{4.87}{\ln(67.8 \cdot 10 - 5.42)}. \tag{4.4}$$

- **Radiación neta** R_n: se obtiene como la suma de radiación neta de onda corta y onda larga. En ERA5, estas variables suelen estar **acumuladas** (energía por área); por ello se convierten a flujo diario dividiendo por el intervalo temporal y convirtiendo unidades:

$$\mathrm{J\,m^{-2}} \rightarrow \mathrm{MJ\,m^{-2}} \quad (\times 10^{-6}). \tag{4.5}$$

- **Flujo de calor del suelo** G: para escala diaria y análisis promedio (o series diarias en régimen cuasi-estacionario), se suele aproximar $G \approx 0$ en comparación con R_n.

Salida final para MODFLOW 6. El resultado de Penman–Monteith es un campo espacial de ET_0. Este insumo se transformó a unidades compatibles con el paquete EVT de MODFLOW 6 ([m/s]), y posteriormente se moduló mediante parámetros de calibración mediante la fracción efectiva asociada a disponibilidad de agua subterránea en la zona elevada y en el resto del dominio, manteniendo consistencia dimensional durante todo el flujo de procesamiento.

Preprocesamiento y conversiones de unidades. Se homogenizaron unidades antes del cálculo. La temperatura se convirtió de Kelvin a °C. La presión se convirtio de Pa a kPa. La velocidad del viento se calculó a partir de las componentes zonal y meridonal y se ajusto a 2 m de altura cuando fue necesario, para mantener consistencia con FAO Penman-Monteith. La variables radiativas de ERA5 se manejan como energía acumulada; por ello se integraron temporalmente y se convirtieron a $\frac{MJ}{m^2 \cdot day}$ para el cálculo diario.

Cálculo de radiación neta y nota sobre radiación de cielo despejado. La formulación FAO Penman-Monteith requiere radiación neta (R_n) como forzamiento energético principal. En este trabajo se utilizó radiación neta en superficie proveniente de ERA5 (radiación neta de onda corta y radiación neta de onda larga). Con esta elección, la radiación de cielo despejado no fue estrictamente necesaria, ya que en FAO-56 esta variable se usa principalmente para estimar nubosidad y ajustar la radiación de onda larga cuando R_n no se dispone de forma directa. En términos prácticos, usar R_n de ERA5 reduce incertidumbre asociada a parametrizaciones de nubosidad a partir de radiación entrante.

Integración con el paquete EVT de MODFLOW 6. El paquete EVT representa la extracción de agua subterránea por evapotranspiración mediante una tasa máxima en superficie (ET_{max}) que disminuye conforme desciende la carga hidráulica hasta anularse a una profundidad de extinción. Como ya se mencionó previamente, en este trabajo se utilizó ET_0 como aproximación a la demanda atmosférica y se convirtió a unidades de metros por día [m/d] para definir un campo espacialmente distribuido de ET_{max}, modulado mediante el parámetro fgw, correspondiente al factor de fracción de agua subterránea. La profundidad de extinción se definió como constante, con valor `exdp`=2 [m], por lo reportado en la literatura (González-Herrera et al. [2002], Bauer-Gottwein et al. [2011]), interpretada como una profundidad efectiva asociada a la zona de suelo activo a escala regional. Bajo está conceptualización, la respuesta de EVT en MODFLOW 6 es lineal entre la superficie de referencia (`surf`) y la profundidad de extinción (`exdp`). La tasa extraída $ET(h)$ se calcula como:

$$ET(h) = \begin{cases} ET_{\text{máx}}, & h \geq \text{surf} \\ ET_{\text{máx}} \frac{h-(\text{surf}-\text{exdp})}{\text{exdp}}, & \text{surf} - \text{exdp} < h < \text{surf} \\ 0, & h \leq \text{surf} - \text{exdp} \end{cases} \tag{4.6}$$

donde h es la carga hidráulica simulada. En consecuencia, cuando el nivel freático se encuentra cerca de la superficie, el modelo permite una extracción cercana a ET_{max}; conforme el nivel freático desciende, la extracción disminuye linealmente hasta cero al rebasar la profundidad de extinción. La elección de `exdp` constante es una simplificación consistente con la escala regional y la disponibilidad de datos.

4.2.2. Interpolación espacial de variables mediante IDW.

Algunas variables de entrada del modelo se encontraban disponibles como datos puntuales (estaciones, pozos o puntos de muestreo). Para la creación de paquetes como IC, RCH, WEL, etc., y la integración de las mismas al flujo de trabajo del modelo numérico fue necesario generar superficies continuas en formato ráster. En este estudio se utilizó el método de interpolación *Inverse Distance Weighting* (IDW) por su implementación directa, bajo costo computacional y por que produce superficies suaves consistentes con una aproximación regional.

Fundamentos del método. El metódo IDW estima el valor de una variable z en una ubicación x_0 como un promedio ponderado de valores medidos z_i en ubicaciones x_i cercanas. Los pesos dependen de la distancia y se definen de forma inversamente proporcional. La estimación se aproxima como:

$$\hat{z}(x_0) = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i \, z_i}{\sum_{i=1}^{n} w_i}, \tag{4.7}$$

donde el peso w_i se define como:

$$w_i = \frac{1}{d(x_0, x_i)^p}, \tag{4.8}$$

donde $d(x_0, x_i)$ es la distancia entre el punto objetivo y el punto i, y p es el parámetro de potencia que controla la influencia relativa de los datos cercanos. Valores mayores de p incrementan la influencia de puntos próximos y reducen el efecto de puntos lejanos.

Aplicación en este trabajo. La interpolación IDW se aplicó para generar superficies ráster de las cargas hidráulicas iniciales (Figura 4.2), y los forzamiento hidrológicos, (recarga, 4.4), a partir de los datos compilados y procesados. Las condiciones iniciales para todas las simulaciones se muestran en la Figura 4.2. La recarga (RCH) se represento como recarga meteórica efectiva, estimada a partir de la precipitación (1996-2024) y un coeficiente de infiltración c_{inf} variable dependiendo la zona. Esto se debe a que, a escala regional, la fuente dominante de recarga de agua dulce es el aporte atmosférico (precipitación), mientras que otros aportes potenciales, como la recarga antrópica o recarga concentrada, carecen de información espacial y temporal consistente a nivel estatal. Por lo tanto, dichos procesos no se modelaron como fuentes independientes, sino que su efecto se integra de manera implícita dentro del término efectivo de recarga mediante la calibración/zonificación de c_{inf} y los multiplicadores de recarga. Se reconoce que la recarga en sistemas kársticos puede incluir componentes difusas y concentradas; sin embargo, para un modelo regional con discretización equivalente porosa, ambos componentes se representan mediante una recarga meteórica efectiva calibrable.

Selección de parámetros y verificación. La elección del parámetro de potencia p y del criterio de vecindad del algoritmo IDW, se basó en pruebas generando mapas raster de las superficies a representar (cargas hidráulicas iniciales y recarga). Como verificación, se inspeccionó el patrón espacial resultante y se verificó que los valores interpolados se mantuvieran dentro de rangos físicos reportados (Bauer-Gottwein et al. [2011], González-Herrera et al. [2002]).

Limitaciones. IDW es un método determinístico y no cuantifica incertidumbre de forma explícita. El método puede ser sensible a la distribución espacial de puntos (aglomeración) y puede presentar efectos de borde donde la densidad de datos disminuye. Por esta razón, los ráster derivados por IDW se interpretan como aproximaciones regionales consistentes

con la escala del modelo, y su influencia se evalúa posteriormente mediante análisis de sensibilidad.

4.3. Estrategia de calibración y sensibilidad

De manera general, como se comentó en el Capitulo 3.1 se siguió la siguiente estrategia de calibración y pruebas de sensibilidad:

- Calibraciones automáticas mediante PEST++ (módulo `pestpp-glm`).
- Análisis de sensibilidad local y global para cuantificar la influencia de los parámetros sobre el error del ajuste (RMSE) y, sobre restricciones de descarga costera (SGD: Submarine Groundwater Discharge).

Los parámetros (multiplicadores) calibrados son los comentados previamente en el anterior capítulo:

- Conductividad hidráulica por zonas (mK): **anillo de cenotes, zona elavada, resto del dominio (zona plana)**.
- Recarga efectiva (mRCH): factor multiplicativo del coeficiente de infiltración c_{inf} en zona de menor infiltración (zona elevada) y resto del dominio, parámetros denominados como, mR_{upland} y mR_{rest}, respectivamente.
- Evapotranspiración efectiva (mEVT): coeficientes de fracción de agua subterránea fgw como factor multiplicativo en zonas de menor fracción de agua subterránea (zona elevada) y el resto del dominio, parámetros definidos como, $mEVT_{upland}$ y $mEVT_{rest}$, respectivamente.

4.3.1. Definición del problema de calibración

Como se describió previamente (Capitulo 3), se consideraron cuatro formulaciones conceptuales (Casos A, B, C y D), cada caso con cuatro discretizaciones distintas, malla

`estructurada, triangular, Voronoi y quadtree`. Para aislar la **incertidumbre numérica por discretización**, cada caso se calibró en una *malla de referencia* (`quadtree`), posteriormente con los parámetros calibrados, se transfirieron sus valores a las demás mallas sin re-calibrar para así, evaluar la independencia a la discretización numérica y la consistencia de los resultados. De forma complementaria, se compararon los resultados de los cuatro casos en la misma malla para evaluar la **incertidumbre conceptual**.

El primer experimento (E1) utilizó el conjunto de observaciones de los valores de **niveles piezométricos** registrados en $N = 135$ pozos de CONAGUA. En el segundo experimento complementario (E2), se incorporó información de **descarga subterránea al mar** (SGD) como restricción suave.

El diseño experimental estuvo basado en los dos experimentos E1 y E2 (E1: cargas hidráulicas y E2: cargas hidráulicas + SGD), con ello se realizarón dos configuraciones de calibración y análisis de sensibilidad:

1. **E1**: se ajusto el grupo de observaciones `head` (niveles piezométricos) como única fuente de información. Esta configuración se aplicó sistemáticamente a todos los casos conceptuales y mallas para establecer una línea base comparable.

2. **E2**: este ajuste multi-objetivo incorpora al grupo `SGD` que representa la descarga de agua subterránea submarina segmentada a lo largo de la costa, para aumentar la sensibilidad/identificabilidad de los parámetros de interés. Para evitar que el grupo `SGD` dominara la función objetivo (ajuste de error) en este experimento, los valores del grupo `SGD` se normalizarón y sus pesos se escalaron para que su contribución al ajuste de error entre los datos observados y simulados fuera del mismo orden de magnitud que la del grupo `head`.

La ventaja práctica de calibrar multiplicadores de los parámetros, sobre utilizar valores absolutos, es que los multiplicadores son **adimensionales** y permiten imponer restricciones físicas de rangos relativos, mientras que los valores base/absolutos mantienen el contraste espacial del modelo durante y después de la calibración. La mayoria de los parámetros hidráulicos empleados, estrictamente son positivos, es por ello que se utilizó una transformación logarítmica (`partrans = log`). A cada parámetro se le impusieron

límites inferiores/superiores (`parlbnd`,`parubnd`), coherentes con los rangos hidrogeológicos esperados en la literatura, y el modelo base empleado.

4.3.2. Métricas y criterios de ajuste

El ajuste del error entre los datos observados y los datos simulados para los experimentos E1 y E2, se cuantificó mediante las principales métricas de error, RMSE, MAE, sesgo (bias) y percentiles del error absoluto, para evaluar sobreestimaciones o subestimaciones promedio.

Además, se evaluó:

- Mapa de residuales ($r_i = h_i^{sim} - h_i^{obs}$) para identificar sesgos regionales.
- Cierre de balance hídrico como control complementario.

El RMSE se calculó como:

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(d_i^{\mathrm{sim}} - d_i^{\mathrm{obs}}\right)^2}. \tag{4.9}$$

La calibración se detuvo cuando se cumplierón las siguientes condiciones:

- La mejora de RMSE/MAE fue marginal entre iteraciones sucesivas.
- El patrón espacial de residuales dejó de mostrar sesgos regionales fuertes.
- El balance hídrico se mantuvo estable y físicamente consistentes.

4.3.3. Restricción de descarga subterránea al mar (SGD)

Se describe a detalle como fue la construcción de los datos simulados del grupo `SGD` utilizados como una restricción suave, al implementarse con el grupo `head` para calibración. La línea de costa se dividió en segmentos a lo largo de la costa Norte de Yucatán (Figura 4.11), a cada segmento se le asignó un valor de descarga de agua subterránea marina, este valor asignado, corresponde al valor central de los reportados (Murgulet et al. [2020]) y se asoció un valor de incertidumbre como peso. El proceso de creación de los segmentos y los

puntos y su asignación de valores de descarga, son coherentes con el muestreo reportado en la literatura (valores de SGD reportados en $[m/d]$).



Figura 4.11: Mapa de los puntos centrales observados de SGD que fueron calculados en cada segmento de linea de costa del estado de Yucatán.

De flujo volúmetrico a flujo superficial Dado que los modelos implementan la condición de CHD (Constant-HeaD) en el margen costero, se estimó la descarga subterránea como un flujo neto hacía CHD. Para cada segmento j se sumó el caudal volúmetrico Q_j [m^3/s] y se convirtió a flujo superficial s_j [m/s] o [m/d] usando un área efectiva:

$$s_j = \frac{Q_j}{A_j}, \qquad A_j = L_j\, W_j, \tag{4.10}$$

donde L_j es la longitud del segmento y W_j un ancho transversal representativo (parámetro geométrico). En la implementación se usó un valor inicial W_j constante cuando no se disponía de información local.

Normalización y balance de aportes a la función objetivo Φ Para evitar que SGD domine el resultado del ajuste de la función objetivo (ajuste entre datos observados y simulados) por diferencias de escala entre variables, se aplicó una normalización. La normalización consistió en dividir valores observados y simulados por un factor común F

y se re escalaron pesos para lograr magnitudes comparables de Φ_{head} y Φ_{sgd}. Esto permitió dos experimentos:

1. **SGD como restricción suave**: Φ_{sgd} contribuye un porcentaje pequeño (pero no nulo) del total a Φ.

2. **SGD como restricción dominante:** se incrementó el peso del grupo SGD para que Φ_{sgd} controle el ajuste de la función objetivo y así, sea útil para explorar si existe una mayor identificabilidad de estos parámetros costeros.

4.3.4. Prueba de independencia de malla

La independencia respecto a la discretización se evaluó mediante un experimento de *transferencia de parámetros* entre mallas. Para cada caso conceptual (A–D) se realizó una calibración automática únicamente en la malla de referencia (`quadtree`), ajustando multiplicadores de parámetros zonales (conductividad hidráulica por capa y región, recarga y evapotranspiración). Posteriormente, los multiplicadores calibrados se transformaron a valores absolutos aplicándolos sobre los campos base del modelo (por ejemplo, $K_{abs} = K_{\text{base}} \cdot mK$, $\text{RCH}_{\text{abs}} = \text{RCH}_{\text{base}} \cdot mR$, $\text{EVT}_{\text{abs}} = \text{EVT}_{\text{base}} \cdot mFGW$). Con ello se obtiene un conjunto de parámetros físicos absolutos consistentes, que pueden aplicarse en cualquier discretización.

Con los parámetros absolutos del caso calibrado en la malla de referencia, el mismo caso conceptual se re-ejecutó en las demás mallas sin ser recalibradas. El procedimiento general fue:

1. **Calibración en malla de referencia:** calibrar el caso conceptual en la malla `quadtree` para estimar los multiplicadores óptimos de parámetros.

2. **Transferencia de parámetros:** convertir valores multiplicadores a valores absolutos y aplicar esos mismos parámetros al caso conceptual equivalente en las mallas estructurada, triangular y Voronoi (sin re-calibrar).

3. **Comparación entre mallas:** evaluar consistencia mediante (i) métricas de ajuste (RMSE, MAE y sesgo), (ii) mapas de cargas hidráulicas simuladas y diferencias de

cargas Δh en los puntos de observación, respecto a la malla de referencia, y (iii) términos del balance hídrico, entradas y salidas del flujo de agua (p. ej., RCH_IN, EVT_OUT, CHD_OUT, y error de cierre de balance).

Este diseño separa explícitamente el efecto numérico asociado a la discretización (geometría, conectividad y tamaño de celda) del efecto conceptual (formulación del caso A-D), ya que mantiene constante la física (mismos parámetros) y evalúa únicamente la variación inducida por la malla.

4.3.5. Prueba de sensibilidad local (derivadas, CSS, leverage)

La sensibilidad local se evaluó a partir del Jacobiano calculado por `pestpp-glm`. Para ello se reportaron:

- **Composite Scaled Sensitivities** CSS: resumen por parámetro de la sensibilidad del conjunto de observaciones.
- **Correlación entre parámetros:** diagnóstico de no-identificabilidad y equifinalidad.
- **Leverage por observación:** identificación de pozos/segmentos que dominan el ajuste.

Para el experimento de sensibilidad que usa los grupos `head+sgd`, se reporta el CSS **total** y también el CSS **por grupo**, utilizando el subconjunto de observaciones de cada grupo, de esta manera se puede distinguir qué parámetros controlan el ajuste de cargas hidráulicas y cuáles controlan la descarga costera.

4.3.6. Prueba de sensibilidad global (Morris y Sobol)

La sensibilidad global se desarrolló en dos etapas:

1. **Morris** (screening): se generaron diferentes trayectorias en el espacio de los parámetros dentro de límites establecidos para cada uno de ellos, se ejecutó para cada

muestra y se obtiene su influencia global μ^* y su no-linealidad/interacciones entre parámetros σ.

2. **Sobol** (descomposición de varianza): se aplicó sólo a un subconjunto de parámetros influyentes obtenidos con Morris, estimando índices de primer orden (S_1) y total (S_T).

Capítulo 5

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La herramienta MODFLOW 6 es tan útil y confiable como lo sean los datos introducidos y la interpretación que el usuario haga de ellos; un modelo calibrado y verificado proporciona un valioso marco para entender el sistema y explorar escenarios, ya sea en estado estacionario o transitorio, pero siempre debe usarse con juicio crítico y considerando las limitaciones inherentes a las simplificaciones realizadas.

Este capitulo presenta los resultados de los modelos numéricos de flujo de agua subterránea para el acuífero kárstico del estado de Yucatán. Los resultados están organizados de manera que separan: calidad numérica de las simulaciones, comparación entre discretizaciones espaciales (DIS, DISV y DISU), y la respuesta del sistema ante diferentes escenarios hidrogeológicos (Casos A-D).

5.1. Verificación numérica y consistencia de las simulaciones

Se verificó la **calidad numérica** de todas las simulaciones realizadas, antes de interpretar cualquier patrón hidrogeológico. Para cada combinación (malla × caso), se evaluarón tres controles principales:

- **Convergencia del solver (IMS):** que el problema se resolviera en tiempo finito sin divergencias.

- **Número de iteraciones:** requeridas para alcanzar los criterios de convergencia establecidos.
- **Cierre del balance hídrico (consistencia de masa):** medido como el **error porcentual** reportado en los archivos de salida.

En términos generales, los modelos finales muestran una **buena estabilidad numérica**. Sin embargo, al inicio, antes de llegar a estos resultados finales se presentarón una serie de problemáticas, los principales retos se presentaron de forma **localizada**, sobretodo en la porción sur del dominio, en la región asociada la zona elevada de la Sierra de Ticul, y en menor medida a la zona costera, donde los gradientes y la transición de condiciones hidrogeológicas tienden a producir mayor una rigidez numérica. Es por ello que se exploró una serie de experimentos con distintos aspectos como el nivel de discretizacion de cada zona de refinamiento, el aumento o disminución del area de estas zonas, por mencionar algunos, también se empleó experimentos con herramientas solucionadoras del módelo numérico como *under-relaxation* y experimentos con la discretización horizontal y vertical, hasta llegar a solucionar el problema mediante la discretización vertical utilizada, sin necesidad de emplear algun solucionador numérico que solo ayudaba a converger al solucionador, más no se resolvia en si, el acuífero, como se explicó en 3.1.4.1.

Una vez resueltas las dificultades, las simulaciones lograron **convergencia satisfactoria** y mantuvieron un **cierre de balance de masa aceptable**. En la práctica, el suavizado consistió en evitar saltos celda-a-celda excesivos mediante una transición más gradual en una franja corta (de pocas celdas), el término *suavizado* hace referencia a que a un ajuste numérico local para mejorar la estabilidad del solver en celdas donde se presentaban discontinuidades fuertes a escala de celda (p. ej., transiciones abruptas de propiedades entre zonas o celdas cercanas a condiciones de frontera) . Este procedimiento se aplicó únicamente con fines de robustez numérica y no altera el modelo conceptual regional, sino la representación discreta en celdas localizadas.

La Tabla 5.1 resume los indicadores de control numérico por discretización para todos los casos conceptuales. En todos los casos, se obtuvo convergencia y el **error porcentual del balance** se mantuvo **por debajo de 0.01 %**, lo cual indica que las diferencias entre

las entradas y salidas netas del sistema son despreciables a la escala del experimento numérico y que las comparaciones posteriores entre mallas/casos se realizan sobre soluciones numéricamente consistentes.

Tabla 5.1: Resumen de control numérico por discretización.

Malla	Casos	Convergió	Iteraciones (max)	Error balance (%)
DIS	A-D	**Sí**	$\approx 70 - 130$	$<$**0.01 %**
DISV (triangular)	A-D	**Sí**	$\approx 70 - 120$	$<$**0.01 %**
DISV (Voronoi)	A-D	**Sí**	$\approx 80 - 160$	$<$**0.01 %**
DISU (quadtree)	A-D	**Sí**	$\approx 80 - 200$	$<$**0.01 %**

5.2. Resultados de los casos A/B/C/D: consistencia e independencia de discretización

En esta sección se presentan las respuestas simuladas de cada modelo conceptual (casos A-D) frente a las diferentes discretizaciones empleadas. Los objetivos por cada caso conceptual son, verificar que el patrón regional de cargas hidráulicas y de gradientes sean **coherentes** con el marco conceptual hidrogeológico del estado de Yucatán, y que la solución obtenida sea lo más **robusta** posible respecto a la geometría y conectividades de las malla, es decir, que la discretización no introduzca artefactos que modifiquen de manera sustantiva la interpretación hidrogeológica de los resultados.

Para cada caso conceptual se muestran las cargas hidráulicas simuladas en la capa somera y profunda de los modelos, capas 1 y 2, respectivamente, para las cuatro discretizaciones.

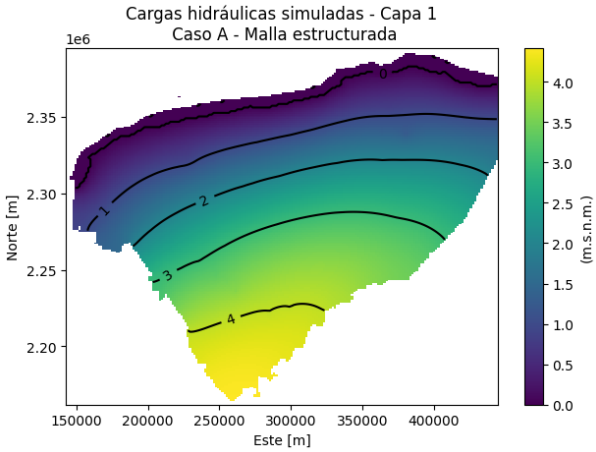
En términos generales, los resultados de cada simulación muestran que si, la discretización (resolución) es un factor que influye en el resultado con al menos un desplazamiento máximo de 1 metro en las cargas hidráulicas simuladas, sobre todo, este problema se presentó mayormente en el caso de la malla estructurada, más, sin embargo, se manejo este dilema para que cada caso conceptual tuvieran resoluciones lo más similares posibles entre mallas, consiguiendo así que **el patrón regional de cargas hidráulicas simulado se**

conservara en cada discretización de cada caso conceptual. Las diferencias más notorias tienden a concentrarse en zonas donde el gradiente hidráulico es más marcado (zonas de refinamiento) y/o donde la malla cambia su conectividad local (como en zonas de transición costa/interior). Sin embargo, a escala regional, las cuatro discretizaciones reproducen estructuras de carga hidráulica comparables, lo cual sugiere que el comportamiento global del sistema está controlado principalmente por el esquema conceptual (casos A-D) y por la discretización (resolución). Para verificar si existe o no la independencia a la discretización, se compararon los valores de cargas hidráulicas simuladas en los puntos donde se ubican los pozos piezométricos de CONAGUA, además del calculo de los residuales entre la malla *quadtree* (malla de referencia) y la demás mallas para cada conceptual.

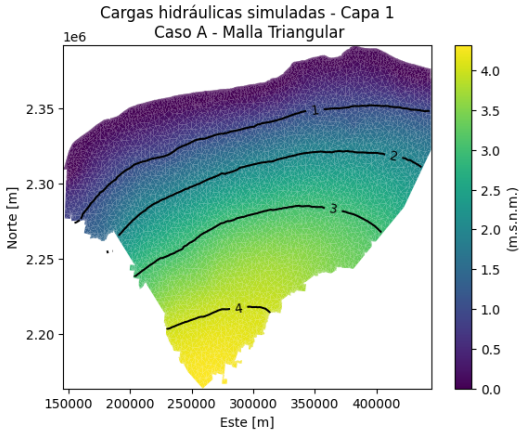
5.2.1. Cargas hidráulicas simuladas iniciales por caso conceptual y discretización

A continuación se muestran los resultados de las simulaciones iniciales de cada caso conceptual, utilizando los valores de conductividad hidráulicas descritos en 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5. Los valores de carga hidráulicas simuladas para cada Caso A, B, C y D, son consistentes con modelos similares reportados en otros estudios González-Herrera et al. [2002], Bauer-Gottwein et al. [2011].

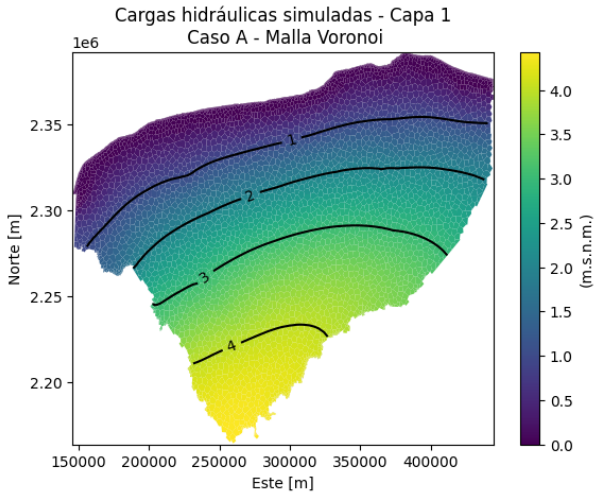
Las Figuras 5.1 y 5.2 muestran los resultados del Caso A (caso homogéneo) en capas 1 y 2, respectivamente. Este caso representa un escenario en donde el campo de cargas responde de forma suave a los forzamientos regionales y a la frontera con la costa, generando un gradiente consistente que disminuye de 4 [m.s.n.m] desde el interior hacia la costa a 0 [m.s.n.m.], tanto en la capa 1 como la capa 2. La comparación cualitativa entre mallas, indica que, aunque la textura espacial de la solución cambia con el tamaño/forma de la celda, para el Caso A, **no se altera el patrón regional que domina**, lo cual indica la consistencia numérica entre discretizaciones.



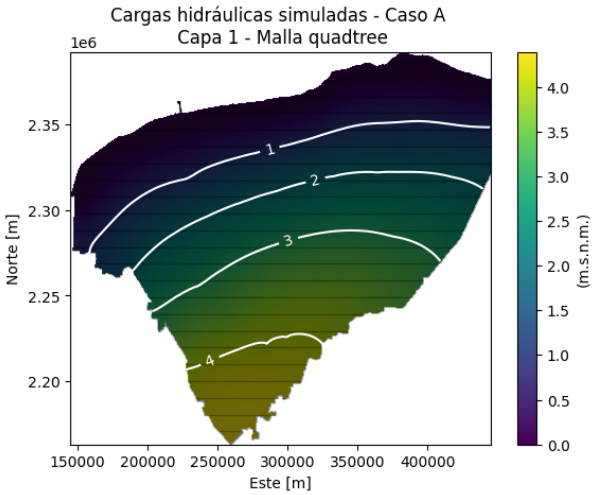
((a)) Malla estructurada, caso A, capa 1.



((b)) Malla triangular, caso A, capa 1.

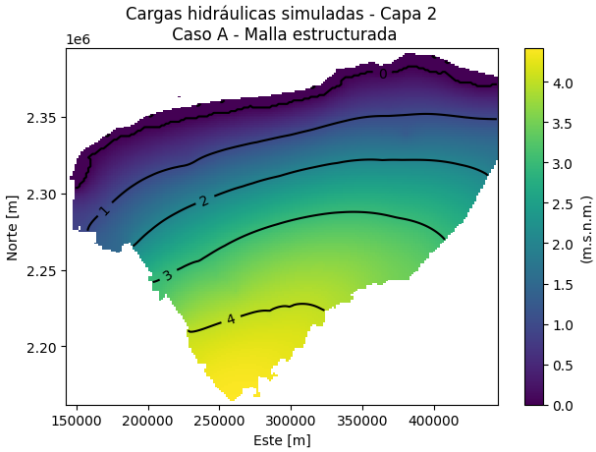


((c)) Malla Voronoi, caso A, capa 1.

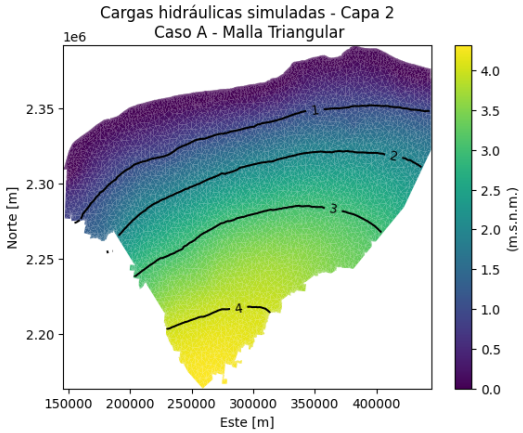


((d)) Malla quadtree, caso A, capa 1.

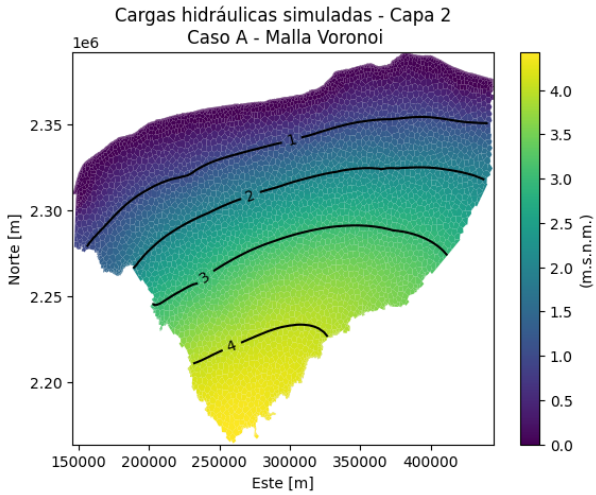
Figura 5.1: Cargas hidráulicas simuladas del caso A en todas las mallas, capa 1.



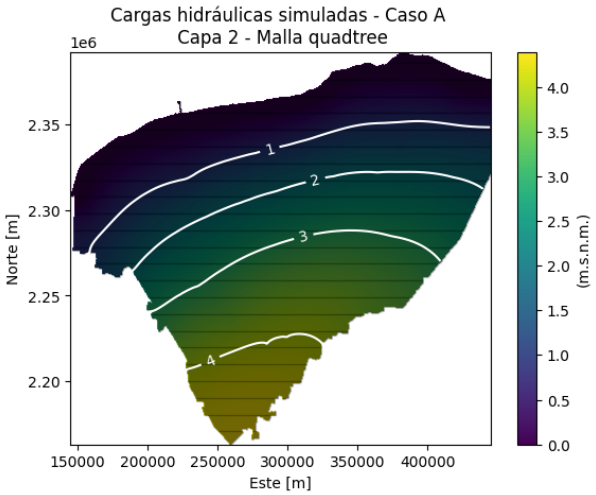
((a)) Malla estructurada, caso A, capa 2.



((b)) Malla triangular, caso A, capa 2.



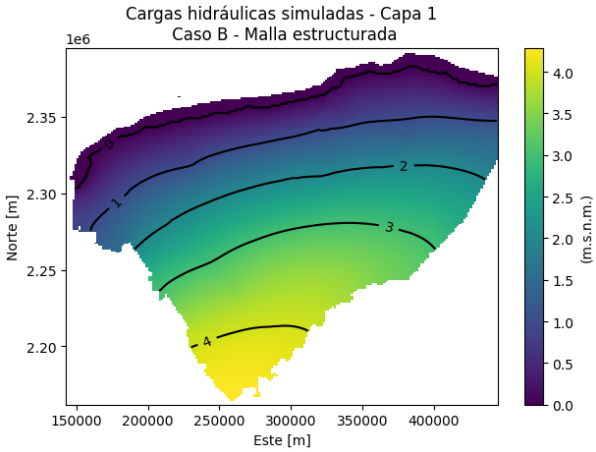
((c)) Malla Voronoi, caso A, capa 2.



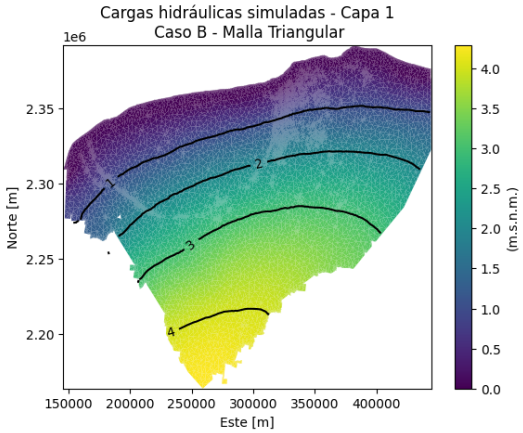
((d)) Malla quadtree, caso A, capa 2.

Figura 5.2: Cargas hidráulicas simuladas del caso A en todas las mallas, capa 2.

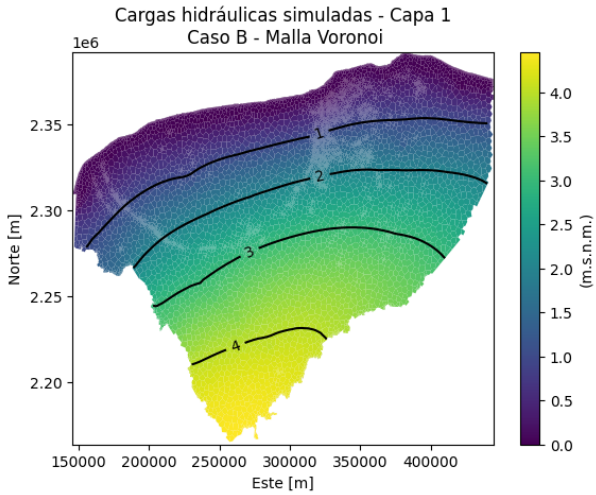
En el caso B (Figuras 5.3 y 5.4), se introduce una zonificación hidráulica que hace énfasis en la región asociada al anillo de cenotes. En este escenario se observa que la solución mantiene un patrón regional similar entre mallas, con una variación muy pequeña, por lo que se presenta estabilidad numérica. Esta similitud de las respuestas entre las discretizaciones sugiere que el efecto de la región del anillo de cenotes es un rasgo del modelo conceptual y no un artefacto de malla.



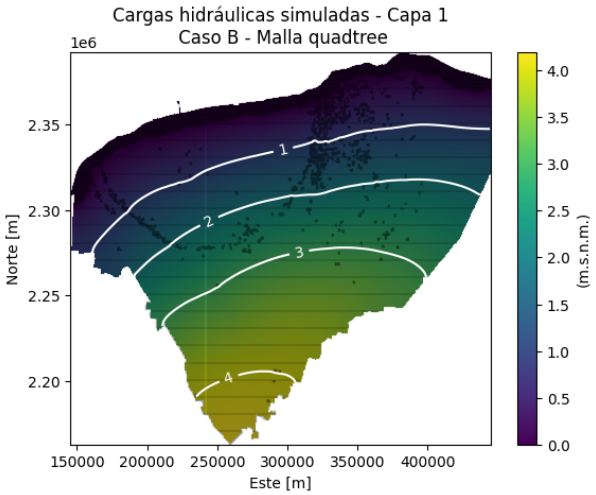
((a)) Malla estructurada, caso B, capa 1.



((b)) Malla triangular, caso B, capa 1.

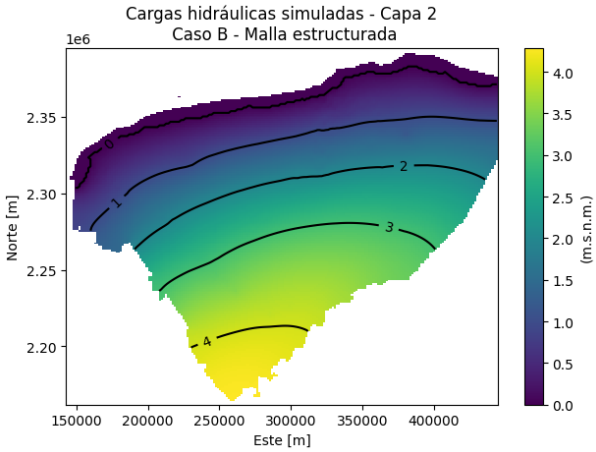


((c)) Malla Voronoi, caso B, capa 1.

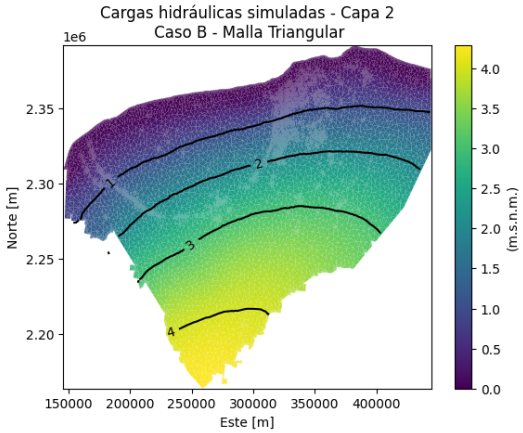


((d)) Malla quadtree, caso B, capa 1.

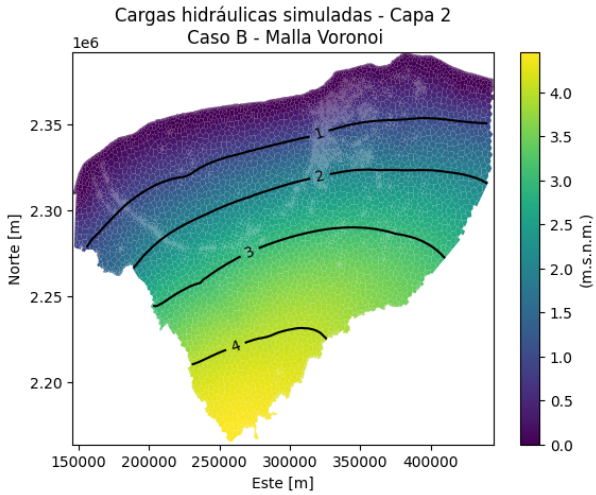
Figura 5.3: Cargas hidráulicas simuladas del caso B en todas las mallas, capa 1.



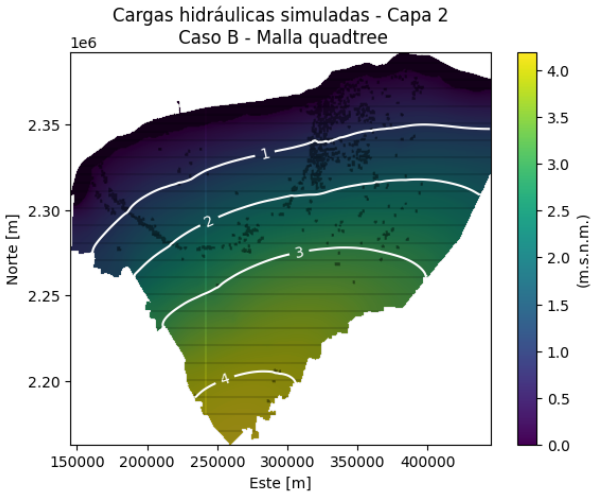
((a)) Malla estructurada, caso B, capa 2.



((b)) Malla triangular, caso B, capa 2.



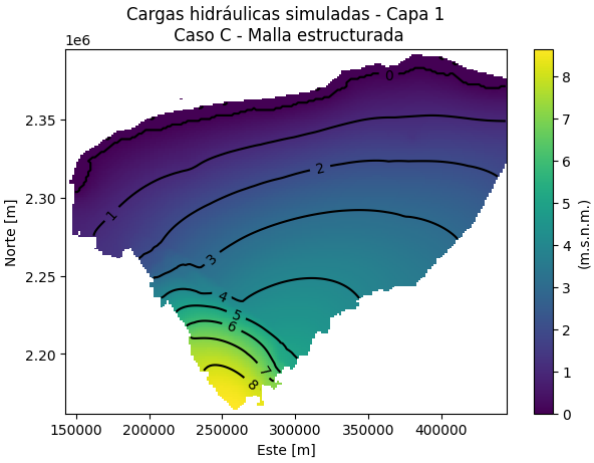
((c)) Malla Voronoi, caso B, capa 2.



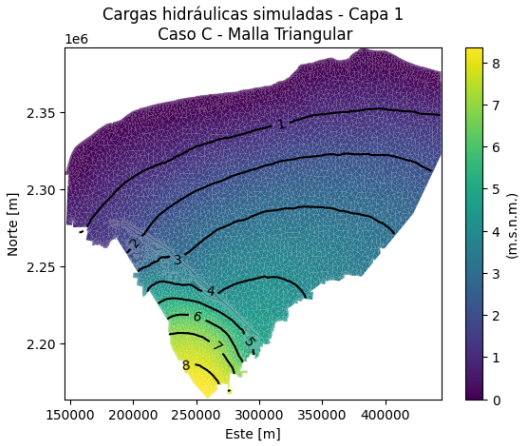
((d)) Malla quadtree, caso B, capa 2.

Figura 5.4: Cargas hidráulicas simuladas del caso B en todas las mallas, capa 2.

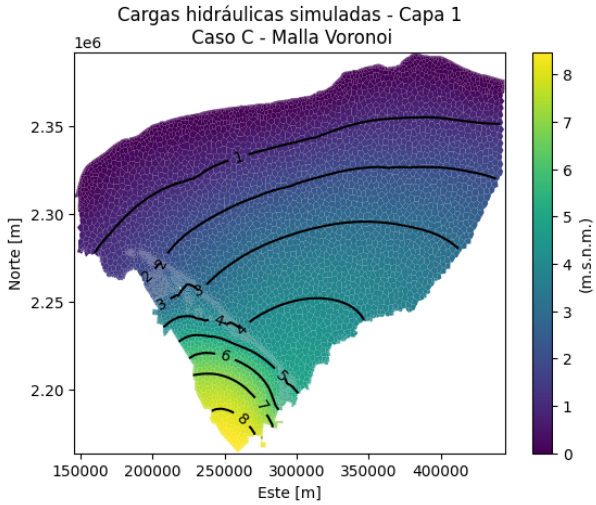
El caso C (Figuras 5.5 y 5.6) incorpora un refinamiento en la región elevada del estado de Yucatán (zona alta asociada a la Sierra de Ticul). En este tipo de escenario, es esperable que la solución sea más sensible a la forma en que cada malla representa los gradientes fuertes o transiciones abruptas entre el refinamiento de las celdas. Aun así, los mapas muestran que el comportamiento global es consistente entre si: los máximos regionales de carga de 8 [m.s.n.m.] se mantienen en posiciones comparables y la dirección general del gradiente se conserva entre las discretizaciones, con diferencias espaciales asociadas a las resoluciones locales, para ambas capas, 1 y 2.



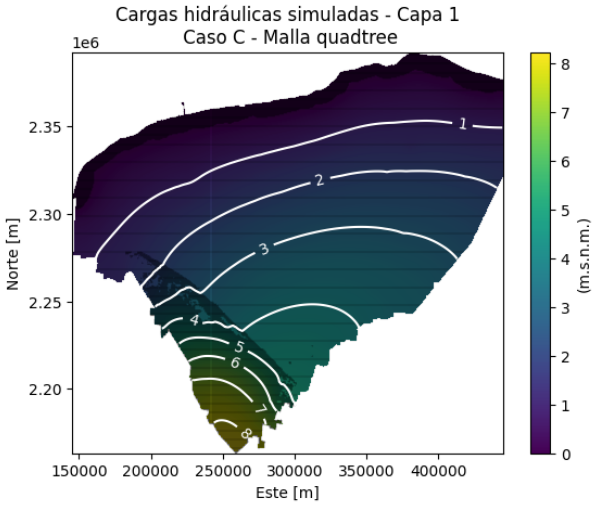
((a)) Malla estructurada, caso C, capa 1.



((b)) Malla triangular, caso C, capa 1.

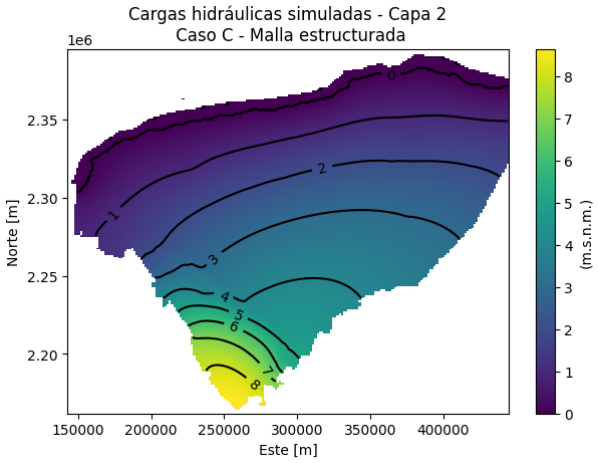


((c)) Malla Voronoi, caso C, capa 1.

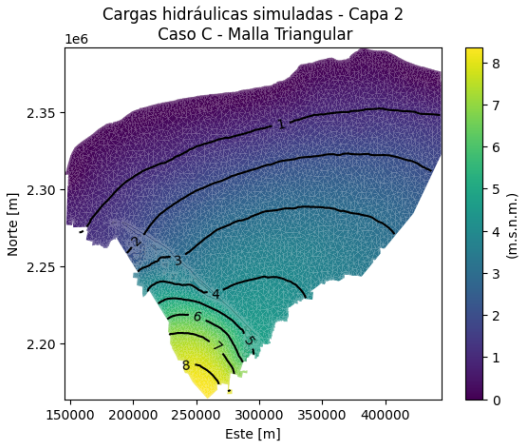


((d)) Malla quadtree, caso C, capa 1.

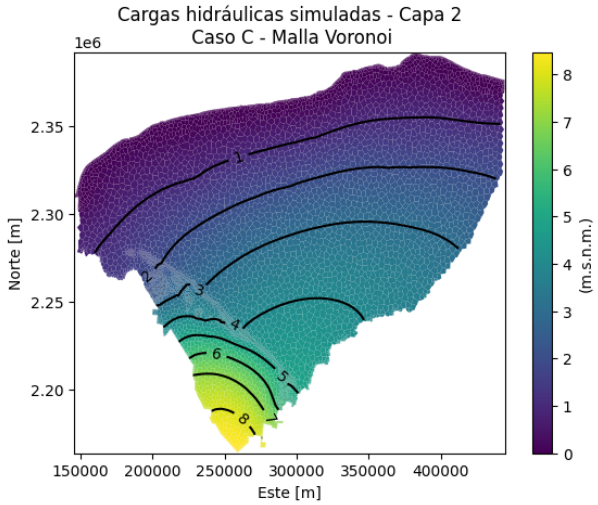
Figura 5.5: Cargas hidráulicas simuladas del caso C en todas las mallas, capa 1.



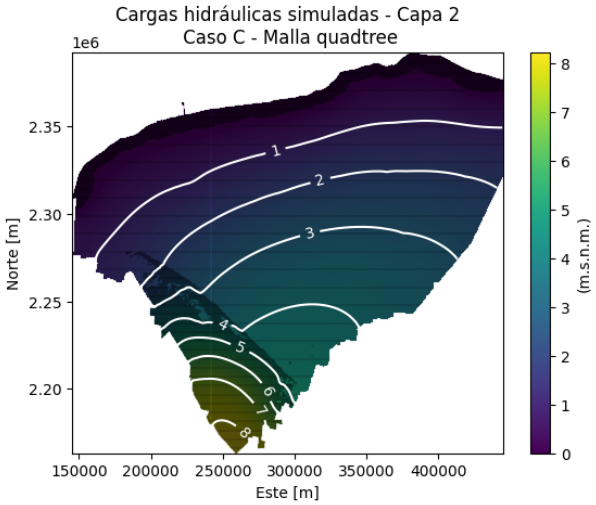
((a)) Malla estructurada, caso C, capa 2.



((b)) Malla triangular, caso C, capa 2.



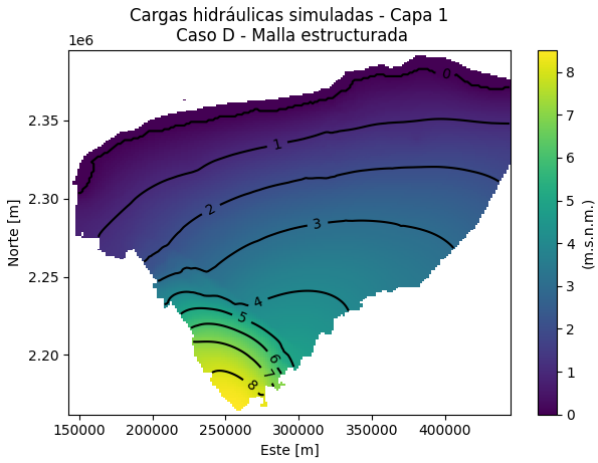
((c)) Malla Voronoi, caso C, capa 2.



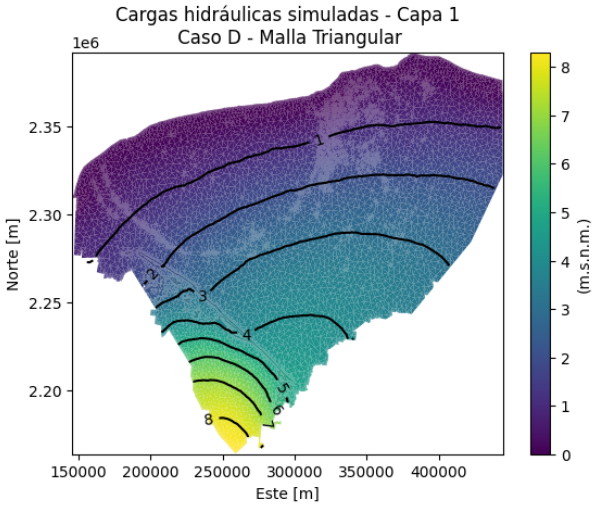
((d)) Malla quadtree, caso C, capa 2.

Figura 5.6: Cargas hidráulicas simuladas del caso C en todas las mallas, capa 2.

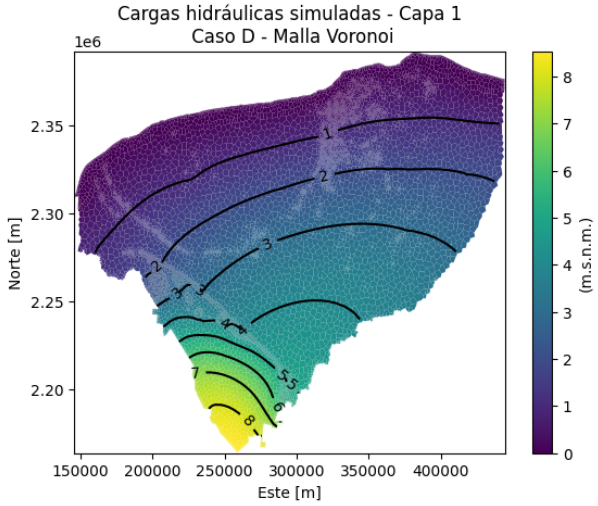
Finalmente, el caso D (Figuras 5.7 y 5.8) combina los efectos y refinamientos principales de los casos anteriores, representando el escenario conceptual más completo del conjunto. Se observa consistencia entre discretizaciones, esto es realmente relevante, ya que implica que, incluso bajo una zonificación más compleja (mayor heterogeneidad efectiva), el patrón regional de cargas simuladas permanece estable al variar la discretización. En otras palabras, los cambios de malla no cambian la hidrología de los resultados, sino únicamente el nivel de detalle geométrico con que se representa.



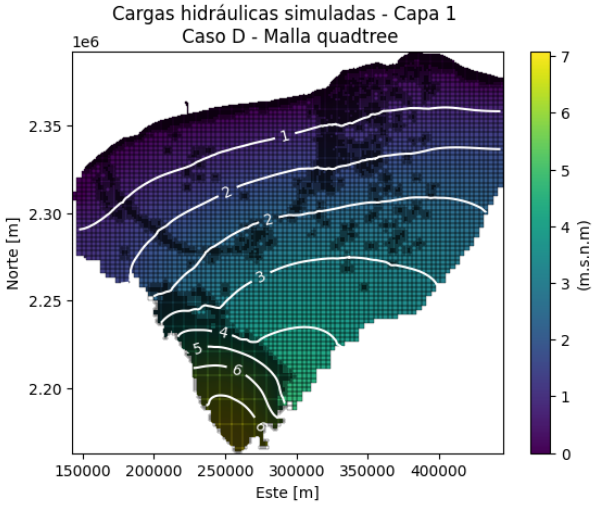
((a)) Malla estructurada, caso D, capa 1.



((b)) Malla triangular, caso D, capa 1.

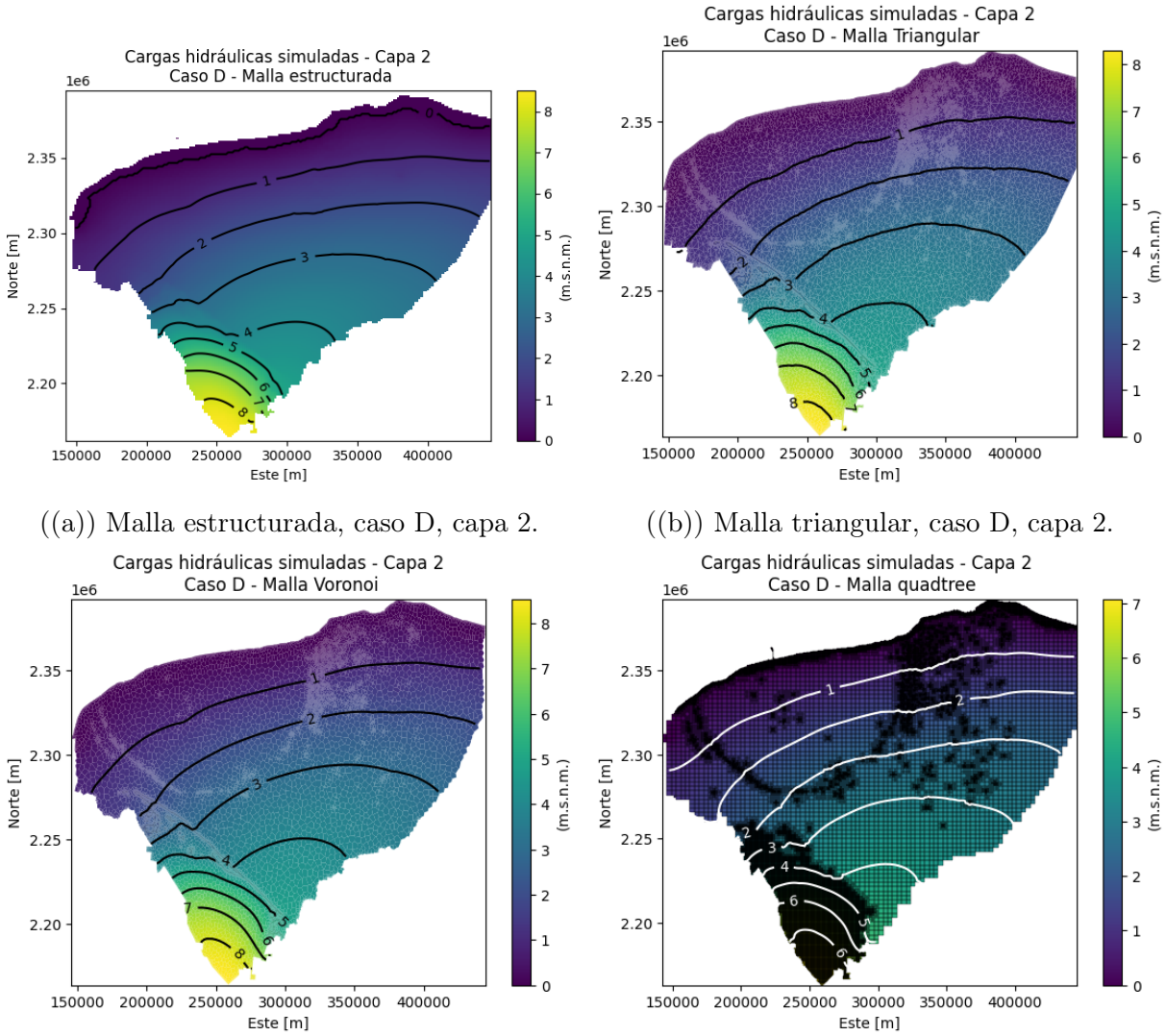


((c)) Malla Voronoi, caso D, capa 1.



((d)) Malla quadtree, caso D, capa 1.

Figura 5.7: Cargas hidráulicas simuladas del caso D en todas las mallas, capa 1.



((a)) Malla estructurada, caso D, capa 2.

((b)) Malla triangular, caso D, capa 2.

((c)) Malla Voronoi, caso D, capa 2.

((d)) Malla quadtree, caso D, capa 2.

Figura 5.8: Cargas hidráulicas simuladas del caso D en todas las mallas, capa 2.

5.2.2. Vectores específicos de descarga por Caso y discretización

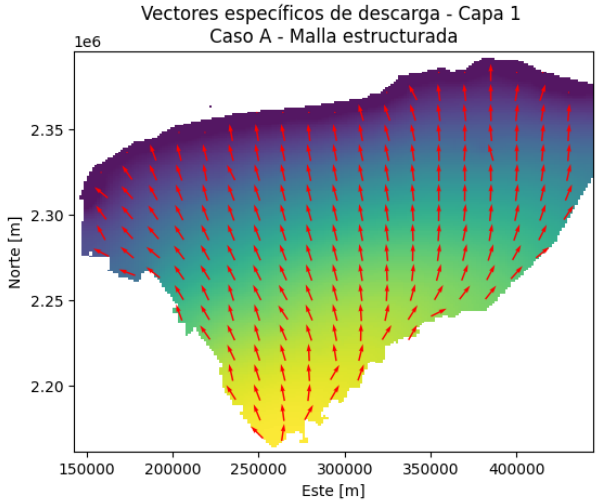
Una parte muy importante para la verificación de la coherencia de los modelos es el análisis cualitativo del flujo de agua del agua a través del estado, posterior al computo y análisis del campo de cargas hidráulicas inicial, se analizaron los **vectores específicos de descarga (q)** en cada malla para cada caso conceptual, debido a que son una parte muy importante para la verificación de la coherencia de los modelos con respecto al acuífero de Yucatán Bauer-Gottwein et al. [2011].

Estos vectores sintetizan el patrón de flujo regional y permiten verificar la coherencia hidrodinámica de los resultados obtenidos con los resultados reportados en varios estudios Bauer-Gottwein et al. [2011], Gondwe et al. [2010], González-Herrera et al. [2002], Marín et al. [2000]: un modelo puede reproducir cargas 'razonables' pero puede fallar en el patrón de flujo si la conectividad numérica o la discretización introducen rutas preferenciales artificiales o fueras de lugar con respecto al caso de estudio. Los vectores de descarga obtenidos son consistentes entre cada malla y cada caso, y sobre todo son coherentes con el flujo reportado en la literatura Gondwe et al. [2010], Bauer-Gottwein et al. [2011].

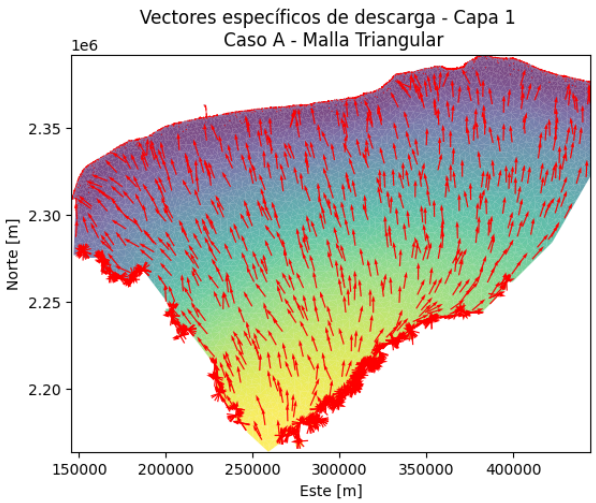
Las Figuras muestran los vectores del Caso A; las Figuras los del Caso B;las Figuras los del Caso C; y las Figuras 5.15 y 5.16 los del Caso D, para las capas 1 y 2, respectivamente.

Los vectores de descarga muestran y verifican que el flujo sigue las direcciones impuestas por el gradiente regional, ques es del interior, especificamente desde la zona elevada hacia la costa, con una intensificación local donde los gradientes aumentan (zonas de refinamiento y bordes del estado). Como es de esperarse, la representación de los vectores específicos de descarga puede llegar a ser afectado por la geometría de las celdas (densidad de celdas, orientación de aristas, conectividad), por lo que pequeñas diferencias en magnitud y 'suavidad' visual entre mallas no implica necesariamente discrepancia físicas, sino diferencias en resolución y discretización, más sin embargo, los resultados cualitativos mostrados en las figuras demuestran que existe un patrón de flujo consistente entre cada Caso y sus discretizaciones, es decir, la estructura regional de direcciones de flujo se conserva y es coherente con el campo de cargas hidráulicas del estado de Yucatán reportado.

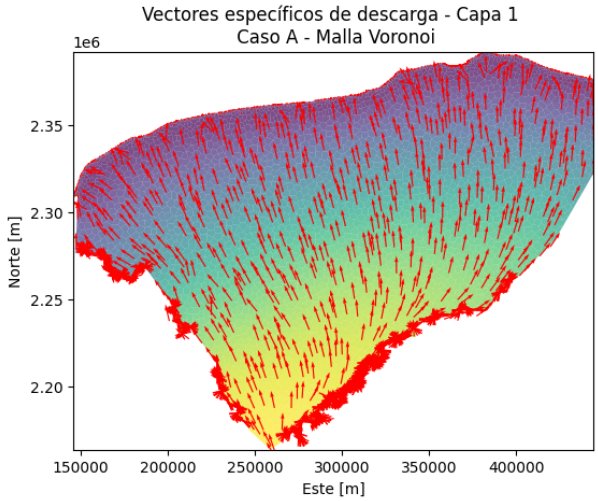
Los vectores de las capas 1 y 2 para el Caso A (Figuras 5.9 y 5.10) concuerdan con el comportamiento esperado: el flujo se dirige desde las zonas elevadas del interior hacia la costa, concentrándose además en los límites estatales



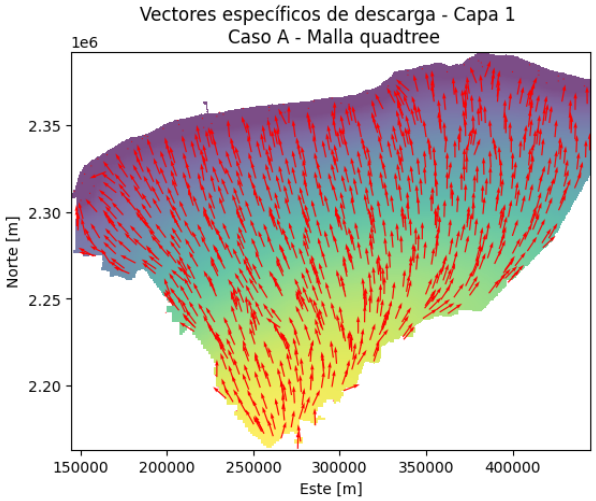
((a)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla estructurada, capa 1.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla triangular, capa 1.

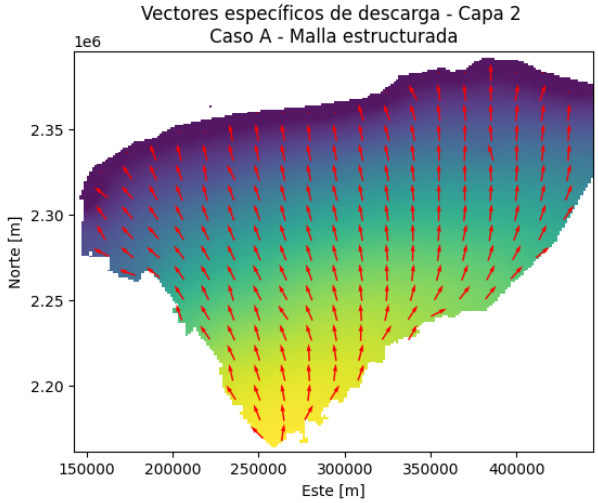


((c)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla Voronoi, capa 1.

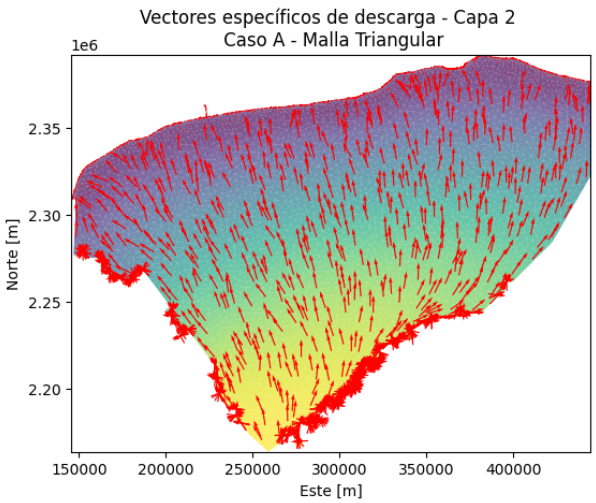


((d)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla quadtree, capa 1.

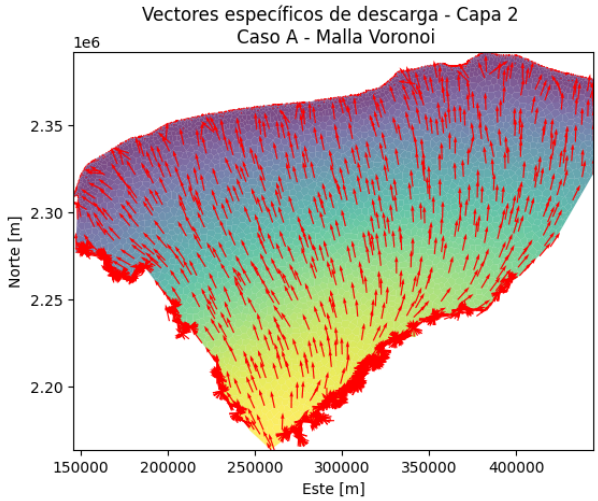
Figura 5.9: Vectores específicos de descarga del caso A en todas las mallas, capa 1.



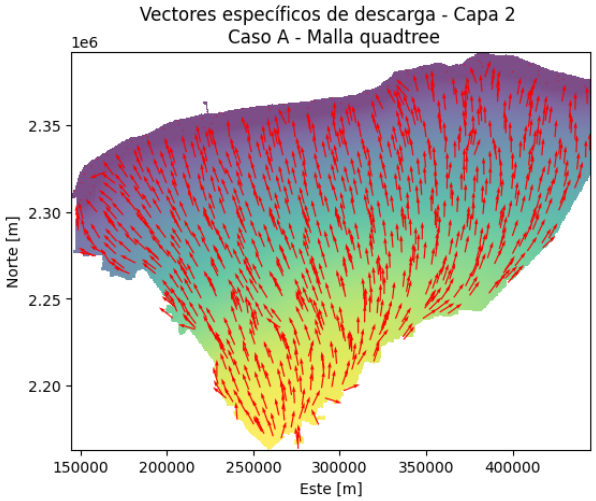
((a)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla estructurada, capa 2.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla triangular, capa 2.



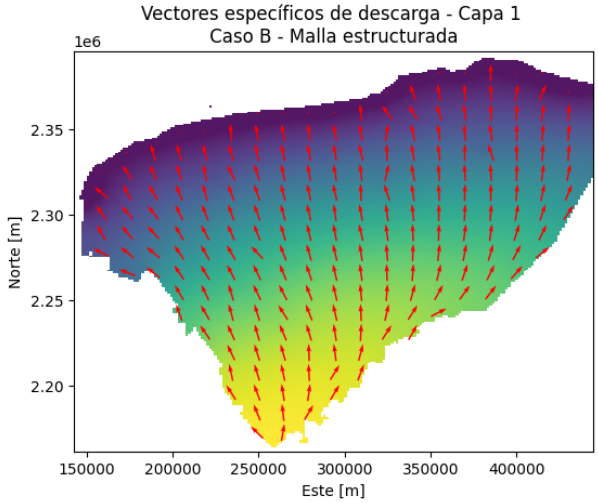
((c)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla Voronoi, capa 2.



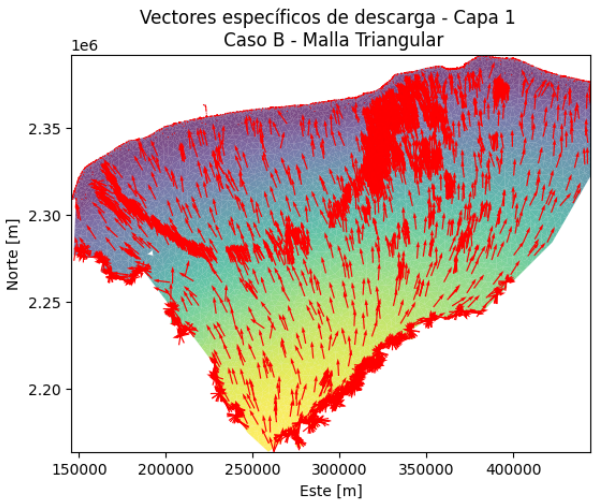
((d)) Vectores específicos de descarga del caso A en malla quadtree, capa 2.

Figura 5.10: Vectores específicos de descarga del caso A en todas las mallas, capa 2.

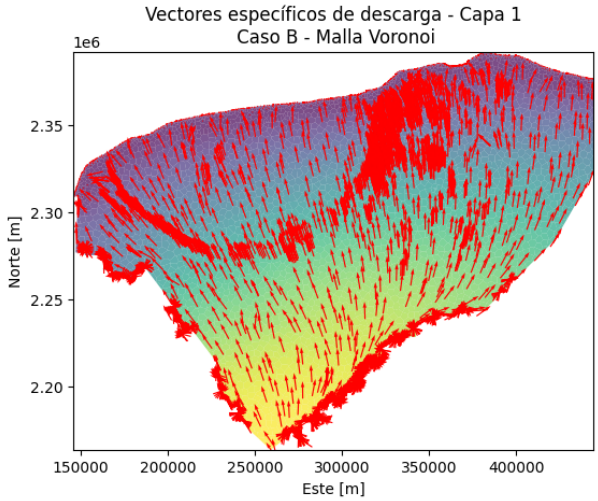
Los vectores del Caso B de las capas 1 y 2, (Figuras 5.11 y 5.12), respectivamente, muestran el flujo desde las zonas elevadas del interior hacia la costa, con una notable concentración en los límites estatales. Destaca especialmente la región del Anillo de Cenotes, cuyo comportamiento es consistente con la literatura: este actúa como un canalizador preferencial que dirige el flujo de agua hacia su descarga en el mar.



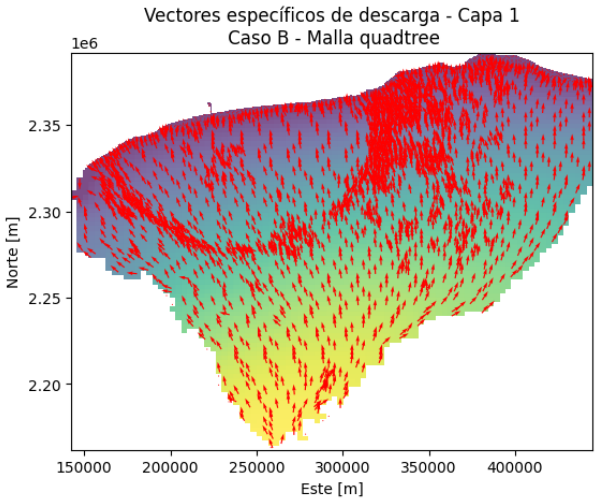
((a)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla estructurada, capa 1.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla triangular, capa 1.

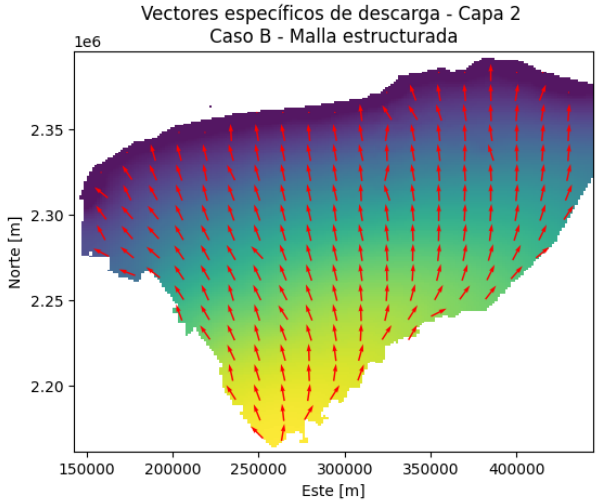


((c)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla Voronoi, capa 1.

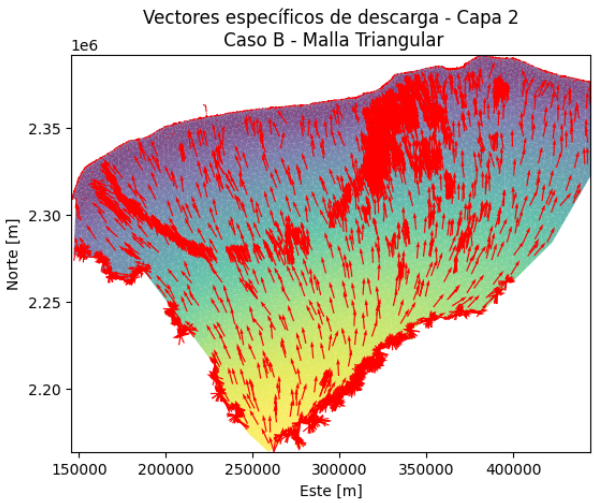


((d)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla quadtree, capa 1.

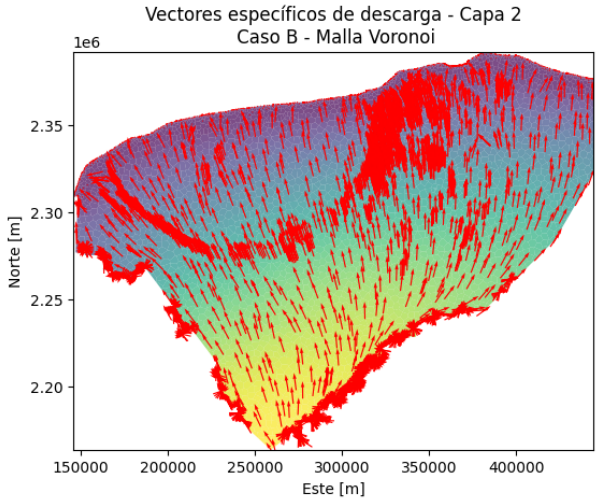
Figura 5.11: Vectores específicos de descarga del caso B en todas las mallas, capa 1.



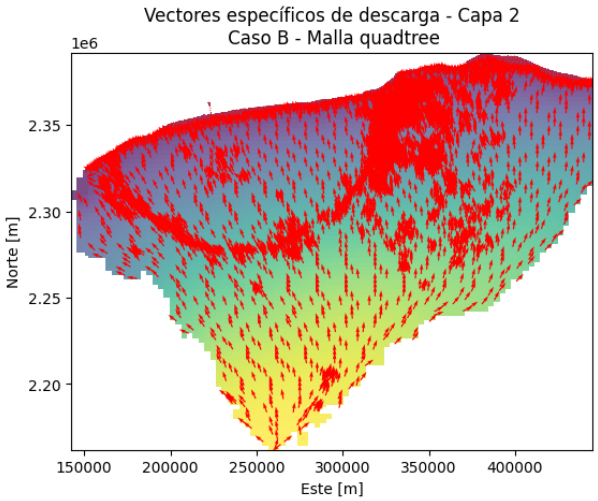
((a)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla estructurada, capa 2.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla triangular, capa 2.



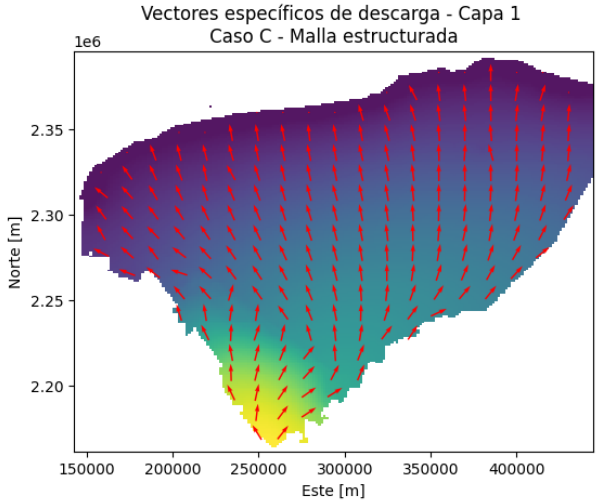
((c)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla Voronoi, capa 2.



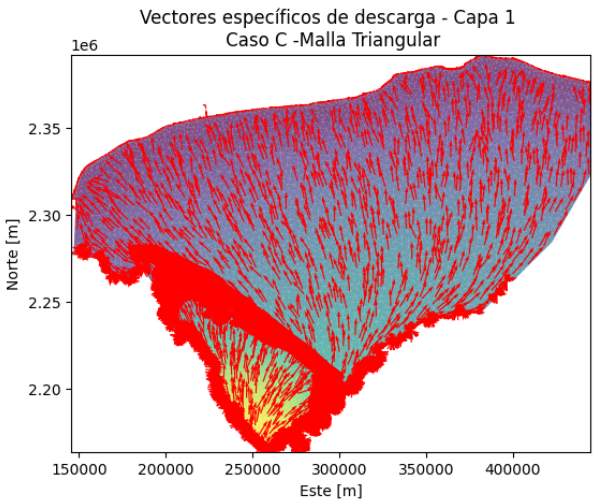
((d)) Vectores específicos de descarga del caso B en malla quadtree, capa 2.

Figura 5.12: Vectores específicos de descarga del caso B en todas las mallas, capa 2.

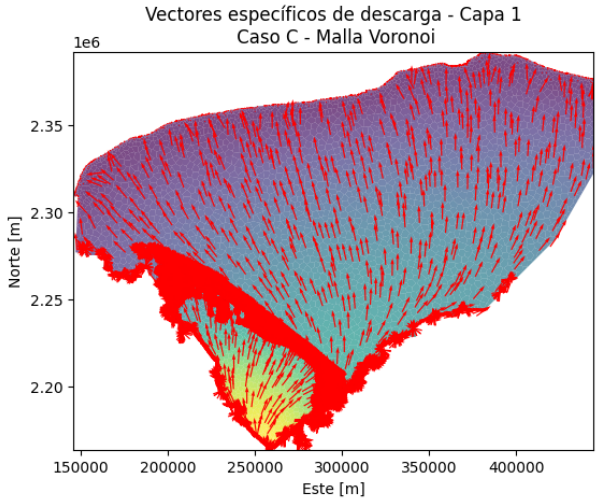
Para el Caso C, los vectores en las capas 1 y 2 (Figuras 5.13 y 5.14) muestran nuevamente un flujo desde las zonas elevadas hacia la costa. Se observa una dirección preferencial hacia el noroeste en los límites de dicha elevación, lo cual corresponde a la zona de la Falla de Ticul en la Sierrita de Ticul.



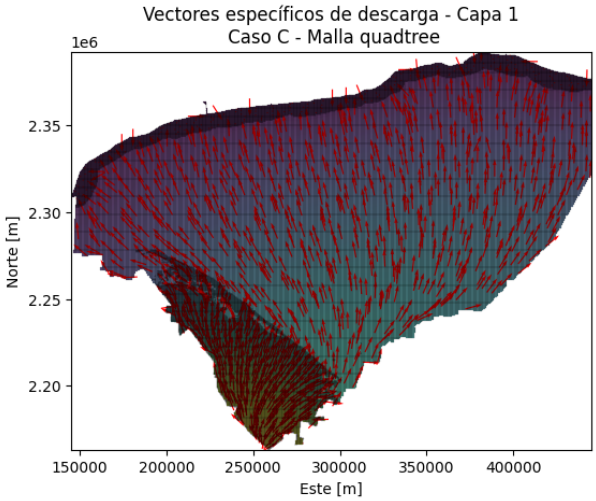
((a)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla estructurada, capa 1.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla triangular, capa 1.

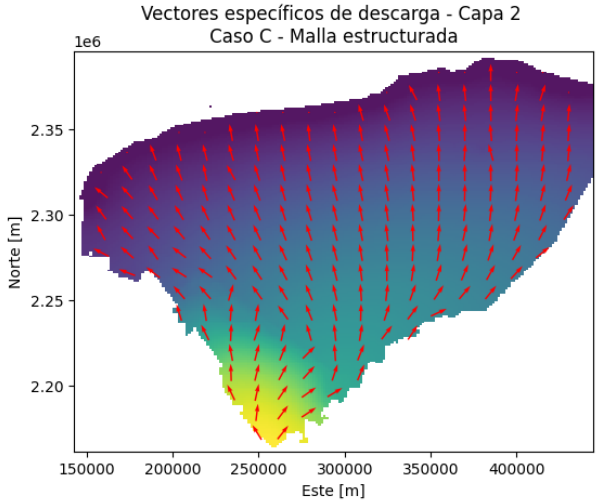


((c)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla Voronoi, capa 1.

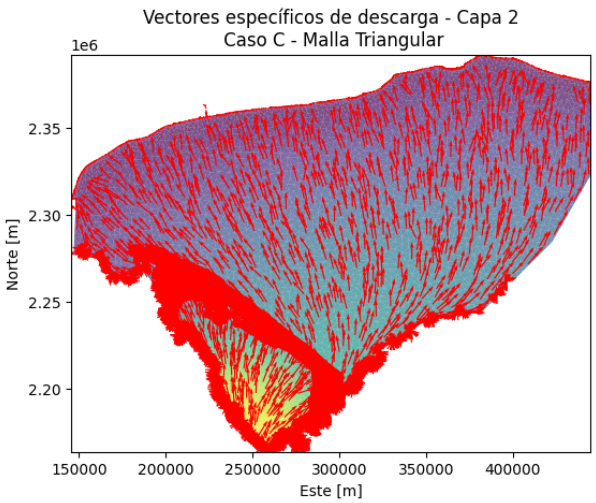


((d)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla quadtree, capa 1.

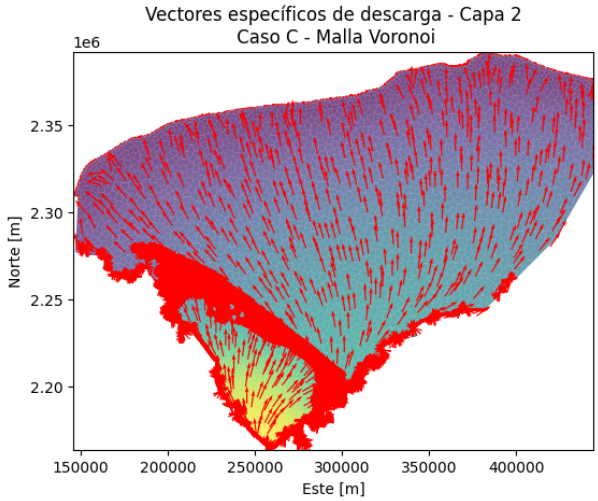
Figura 5.13: Vectores específicos de descarga del caso C en todas las mallas, capa 1.



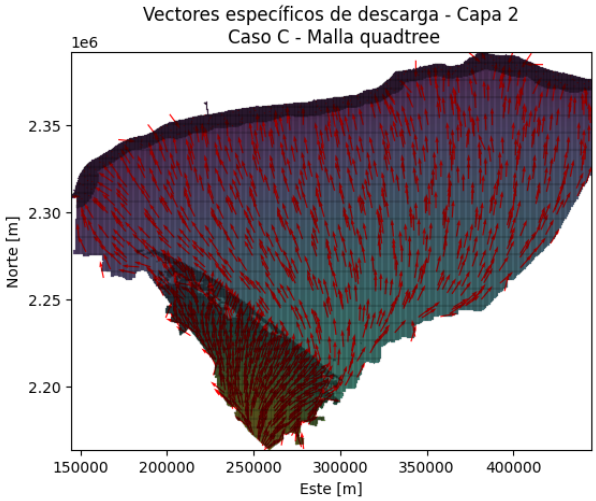
((a)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla estructurada, capa 2.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla triangular, capa 2.

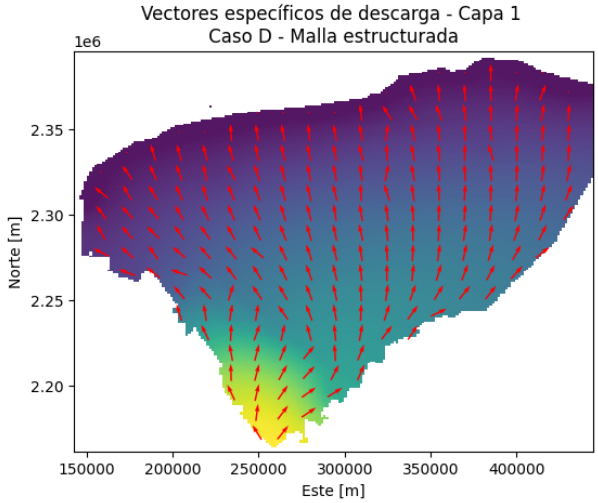


((c)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla Voronoi, capa 2.

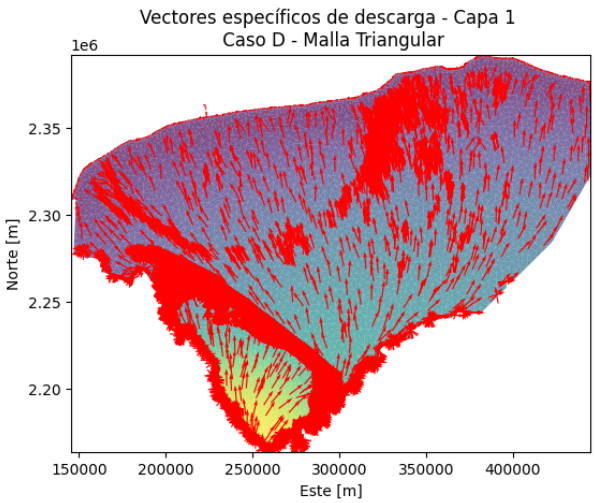


((d)) Vectores específicos de descarga del caso C en malla quadtree, capa 2.

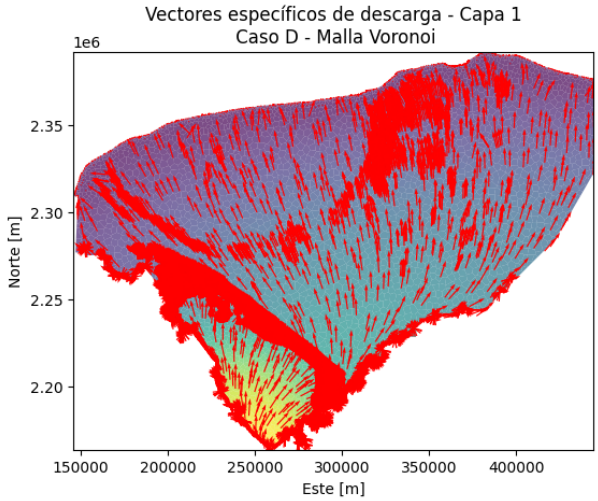
Figura 5.14: Vectores específicos de descarga del caso C en todas las mallas, capa 2.



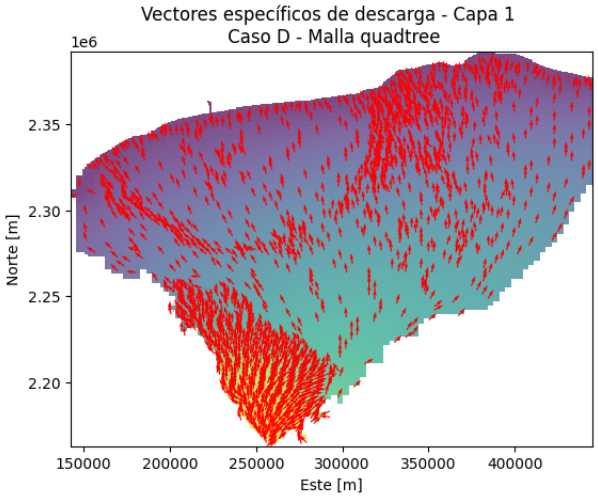
((a)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla estructurada, capa 1.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla triangular, capa 1.

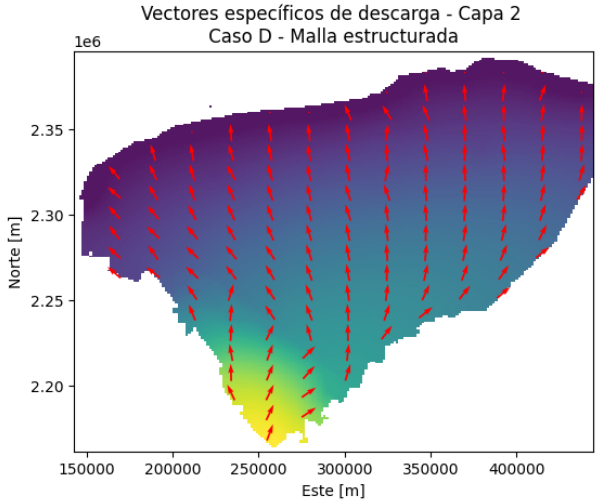


((c)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla Voronoi, capa 1.

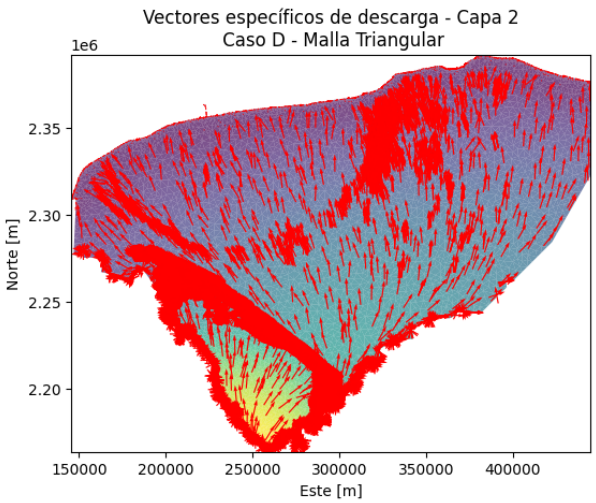


((d)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla quadtree, capa 1.

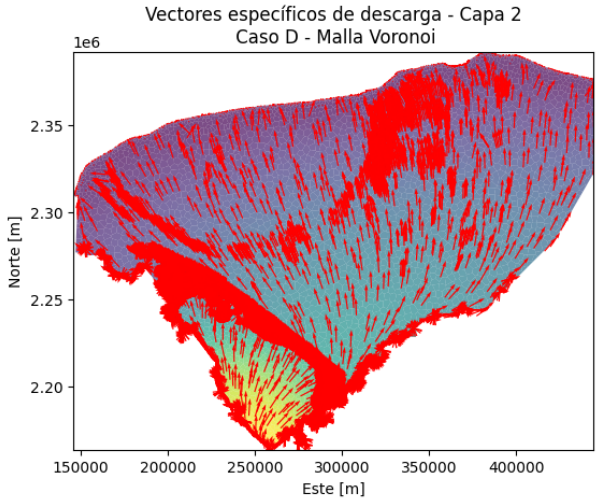
Figura 5.15: Vectores específicos de descarga del caso D en todas las mallas, capa 1.



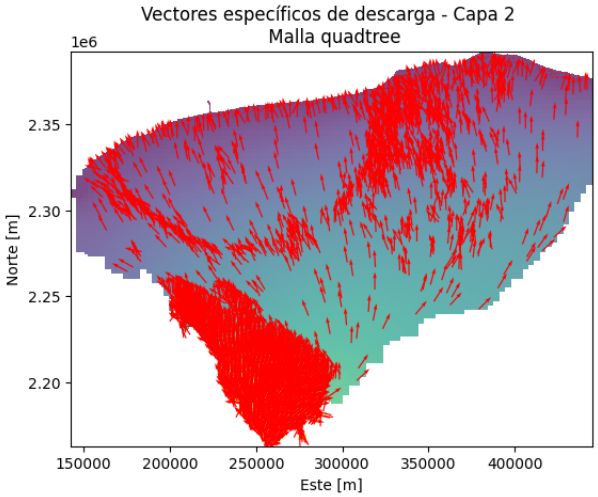
((a)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla estructurada, capa 2.



((b)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla triangular, capa 2.



((c)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla Voronoi, capa 2.



((d)) Vectores específicos de descarga del caso D en malla quadtree, capa 2.

Figura 5.16: Vectores específicos de descarga del caso D en todas las mallas, capa 2.

5.3. Resultados de calibración

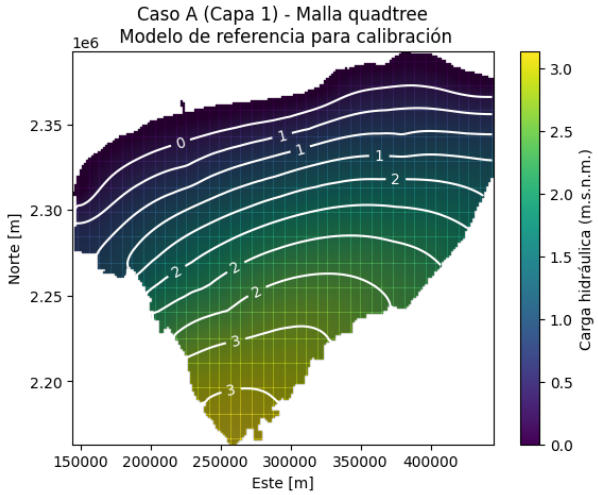
5.3.1. Calibración automática con PEST++ (malla de referencia: quadtree)

La calibración automática de los modelos se realizó con PEST++ mediante el ejecutable `pestpp-glm`, se calibró cada caso conceptual (A, B, C y D) utilizando la malla *quadtree*

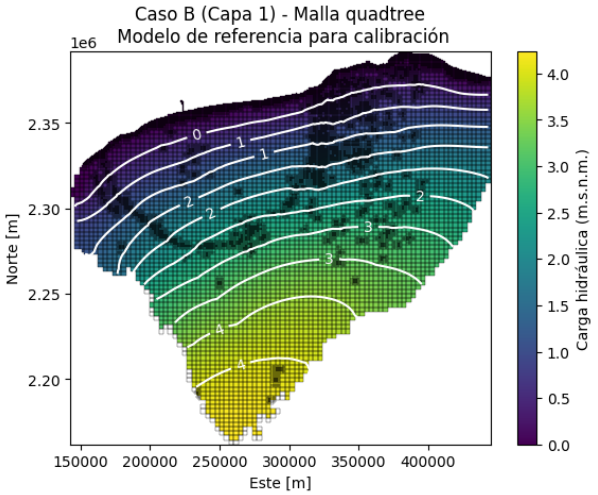
como malla de referencia, es decir, únicamente se calibro la malla de referencia para cada caso. El objetivo consistió en estimar un conjunto de parámetros efectivos (conductividades hidráulicas zonificadas por capa, multiplicadores de recarga y fracciones/escala de EVT 10) que minimizara el desajuste entre las cargas hidráulicas observadas y las cargas simuladas en N=135 pozos piezométricos de observación, bajo un esquema de mínimos cuadrados ponderados. En este trabajo las métricas reportadas se expresan en **metros**, debido a que cuantifican **diferencias de carga hidráulica** entre los datos observados y los simulados. La carga hidráulica como variable física está referida al **datum vertical** del modelo (datum nivel medio del mar); sin embargo, el error siempre se reporta como una diferencia en metros ($h_{sim} - h_{obs}$), independientemente del datum. Como métrica principal de referencia se reporta el RMSE:

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(h_i^{\mathrm{sim}} - h_i^{\mathrm{obs}}\right)^2}. \tag{5.1}$$

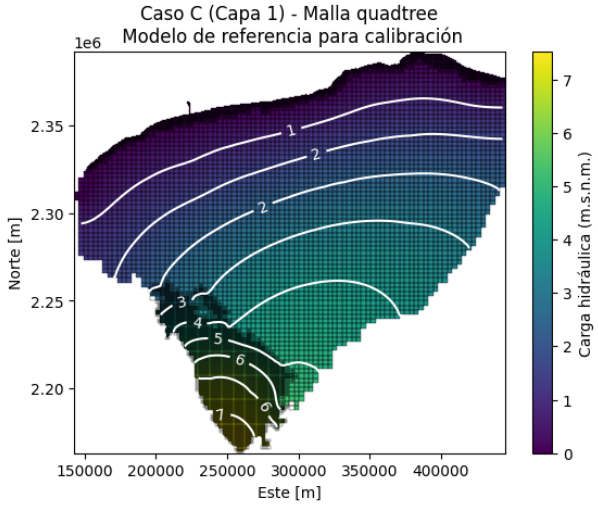
Las Figuras 5.17 y 5.18 presentan los modelos A-D sobre la malla quadtree (capas 1 y 2) como **configuración base previa a calibración**.



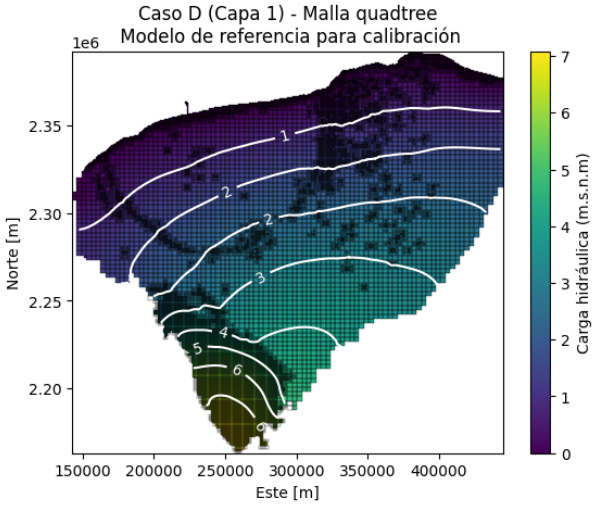
((a)) Caso A en malla quadtree para calibración, capa 1.



((b)) Caso B en malla quadtree para calibración, capa 1.

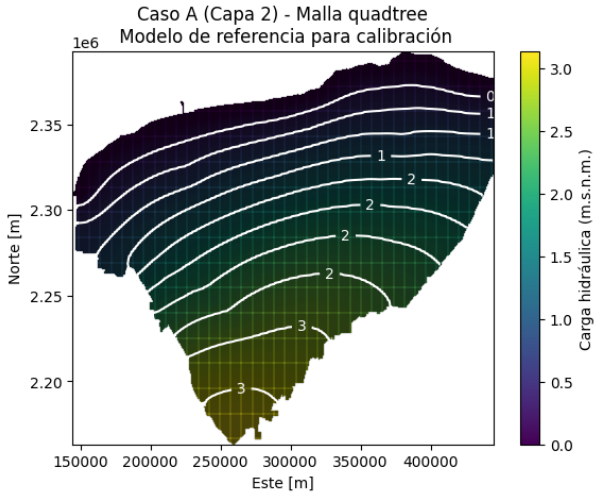


((c)) Caso C en malla quadtree para calibración, capa 1.

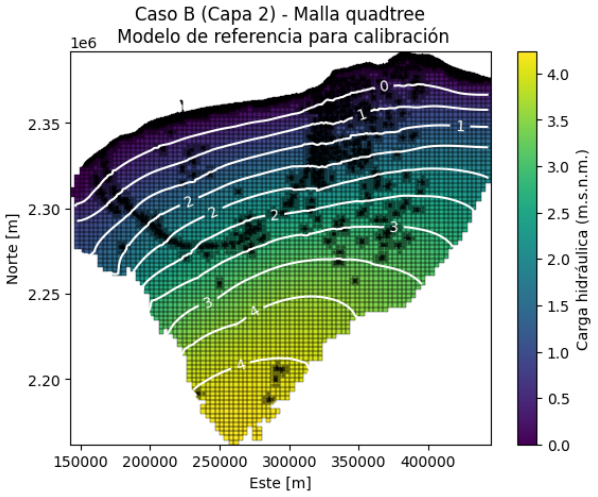


((d)) Caso D en malla quadtree para calibración, capa 1.

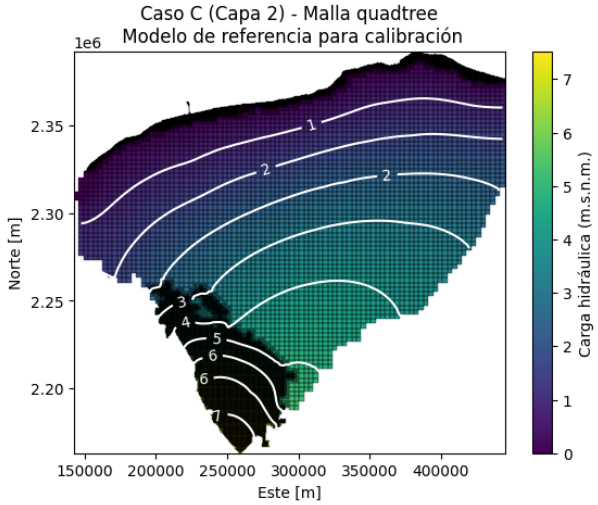
Figura 5.17: Caso A, B, C y D, respectivamente, en malla quadtree para calibración, capa 1.



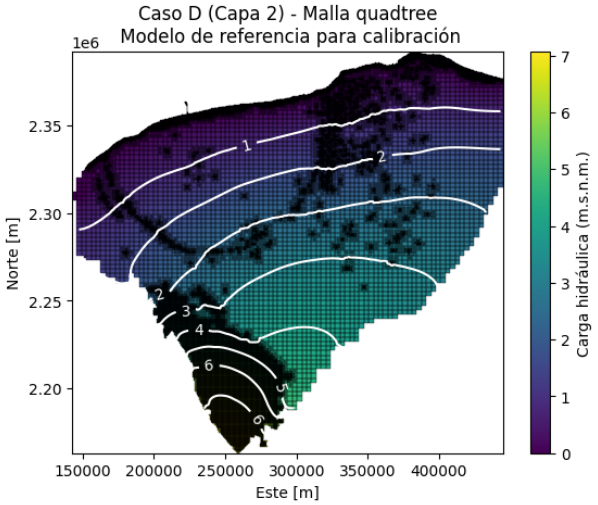
((a)) Caso A en malla quadtree para calibración, capa 2.



((b)) Caso B en malla quadtree para calibración, capa 2.



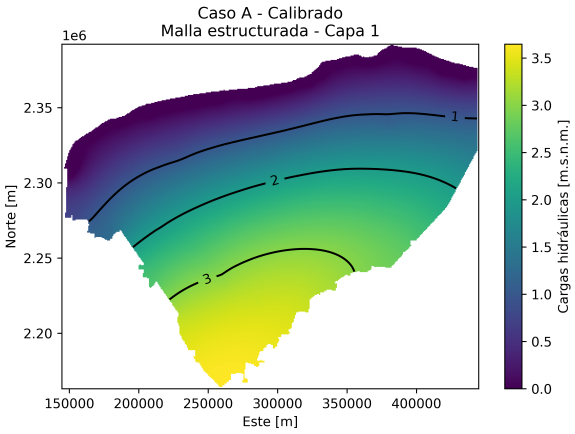
((c)) Caso C en malla quadtree para calibración, capa 2.



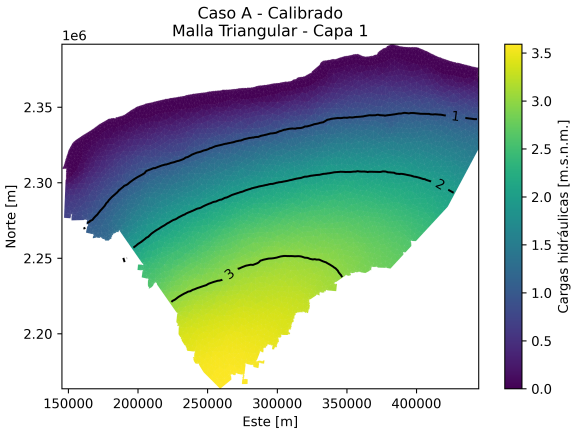
((d)) Caso D en malla quadtree para calibración, capa 2.

Figura 5.18: Casos A, B, C y D, respectivamente, en malla quadtree para calibración, capa 2.

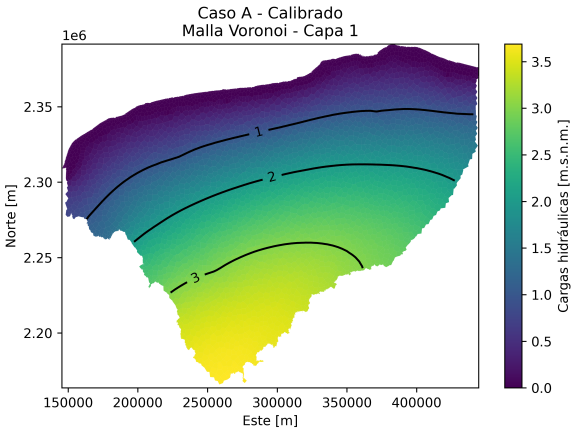
Posteriormente, las Figuras 5.19-5.22 muestran los resultados calibrados para la capa 1 y las Figuras 5.23-5.26 para la capa 2, incluyendo la comparación visual en las cuatro discretizaciones.



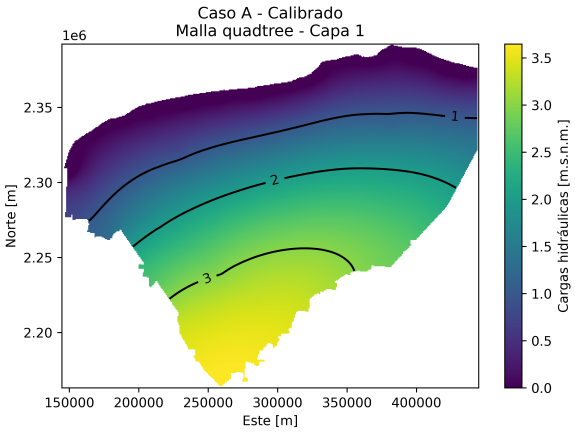
((a)) Caso A calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso A calibrado, malla triangular.

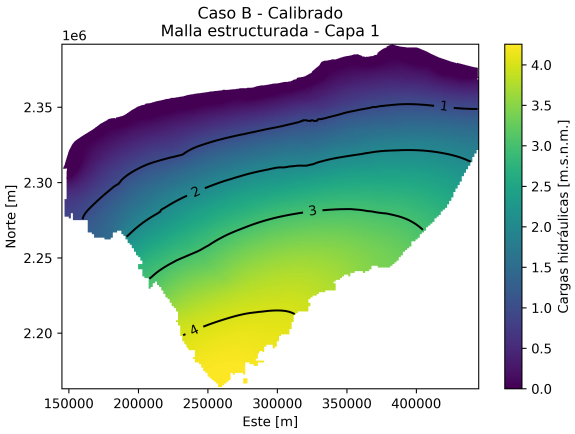


((c)) Caso A calibrado, malla Voronoi.

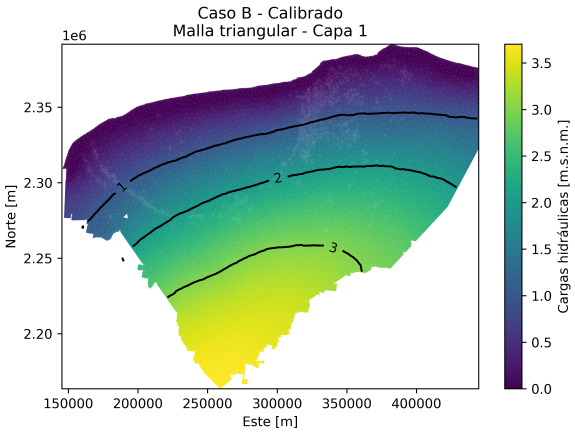


((d)) Caso A calibrado, malla quadtree.

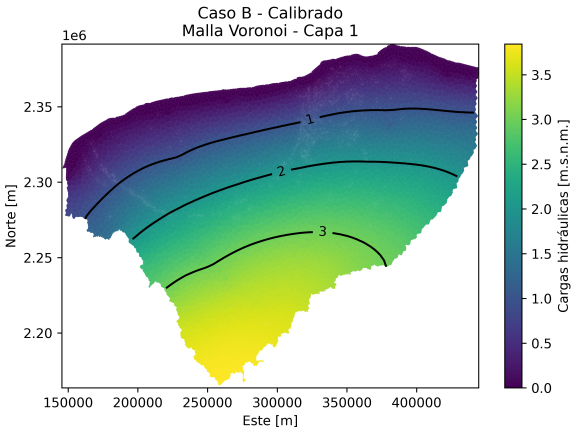
Figura 5.19: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso A calibradas, capa 1.



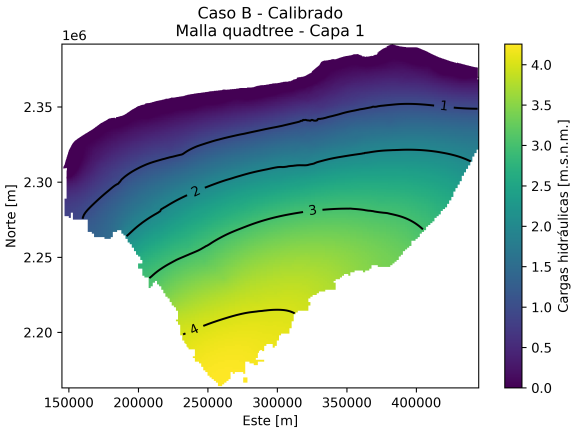
((a)) Caso B calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso B calibrado, malla triangular.

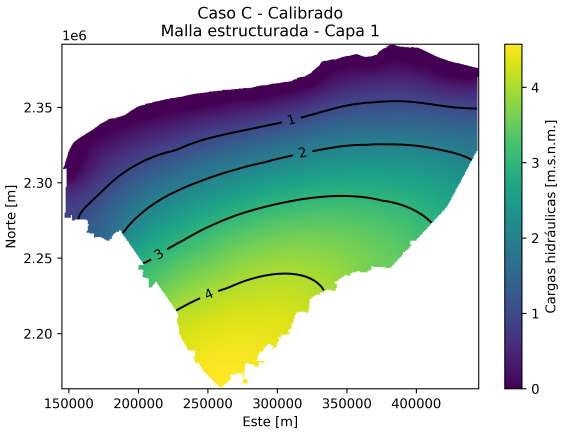


((c)) Caso B calibrado, malla Voronoi.

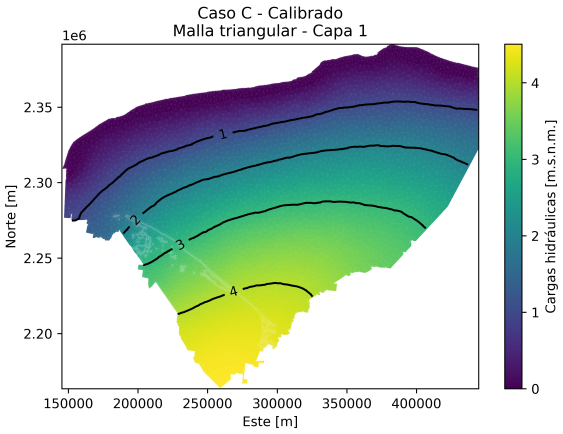


((d)) Caso B calibrado, malla quadtree.

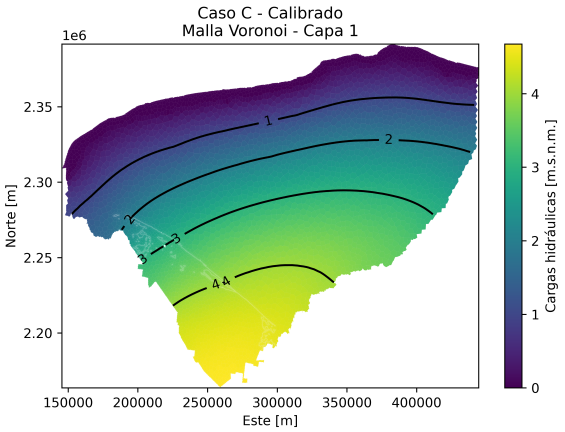
Figura 5.20: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso B calibradas, capa 1.



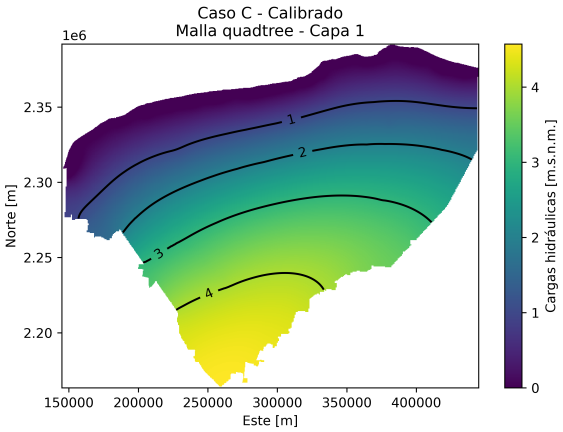
((a)) Caso C calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso C calibrado, malla triangular.

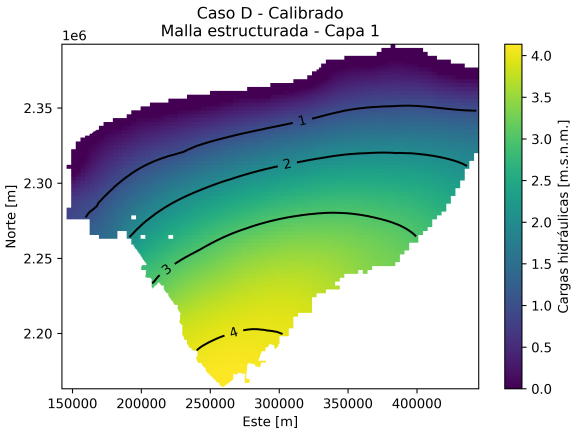


((c)) Caso C calibrado, malla Voronoi.

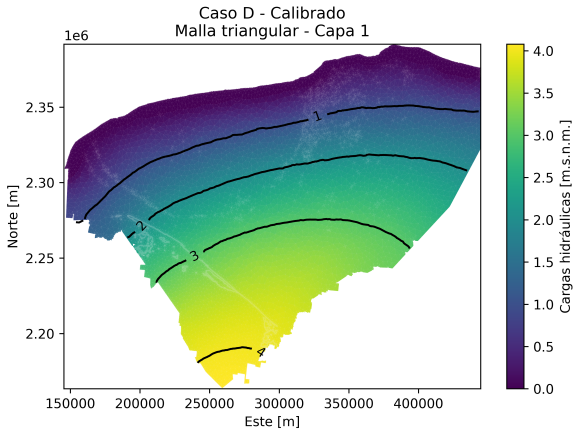


((d)) Caso C calibrado, malla quadtree.

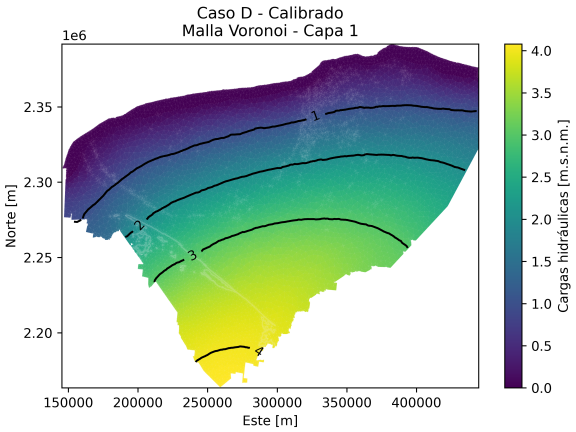
Figura 5.21: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso C calibradas, capa 1.



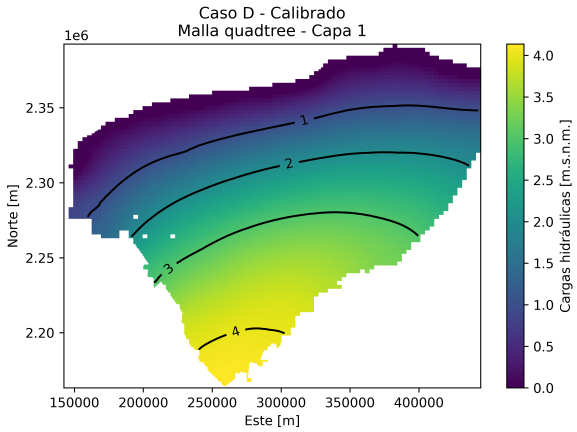
((a)) Caso D calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso D calibrado, malla triangular.

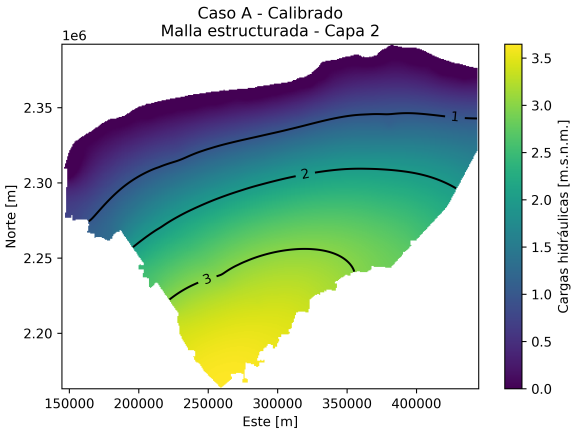


((c)) Caso D calibrado, malla Voronoi.

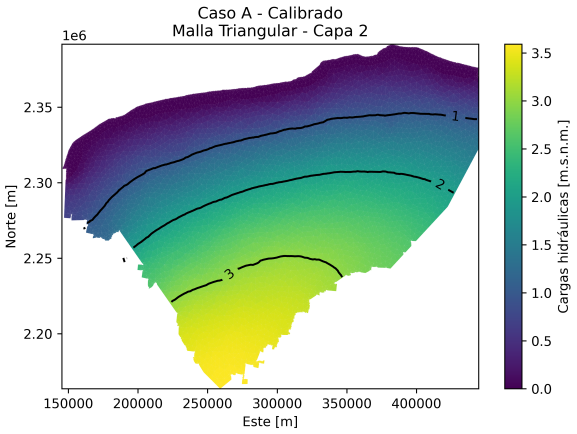


((d)) Caso D calibrado, malla quadtree.

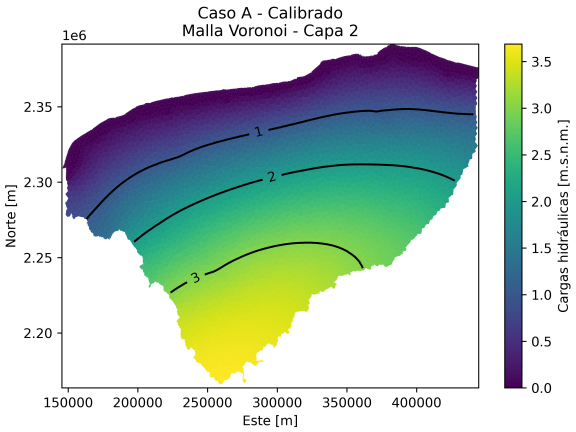
Figura 5.22: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso D calibradas, capa 1.



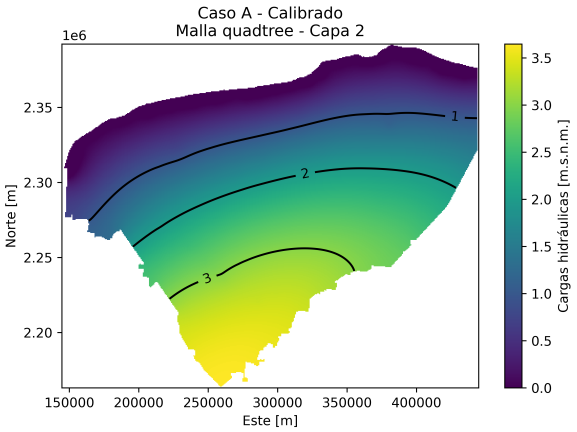
((a)) Caso A calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso A calibrado, malla triangular.

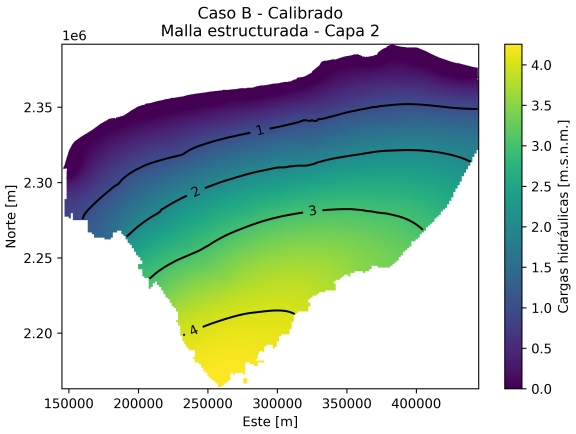


((c)) Caso A calibrado, malla Voronoi.

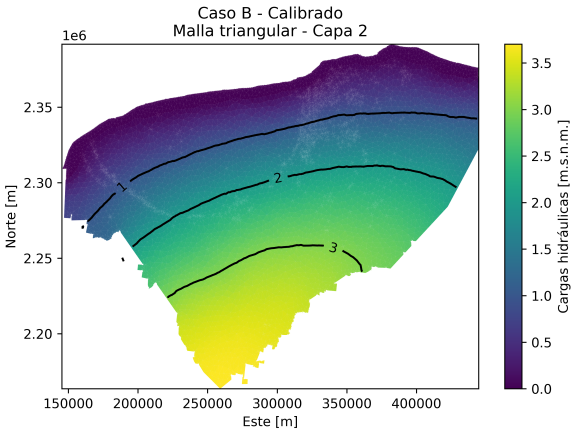


((d)) Caso A calibrado, malla quadtree.

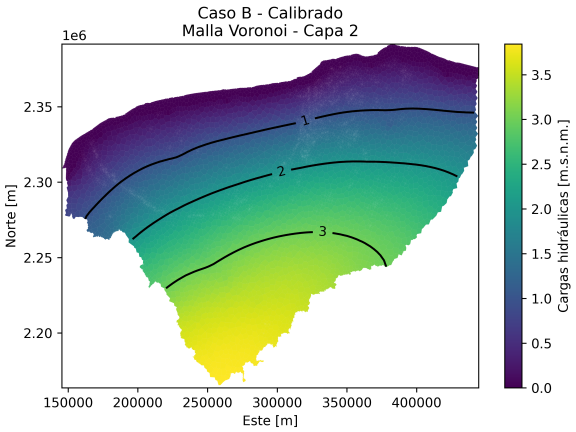
Figura 5.23: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso A calibradas, capa 2.



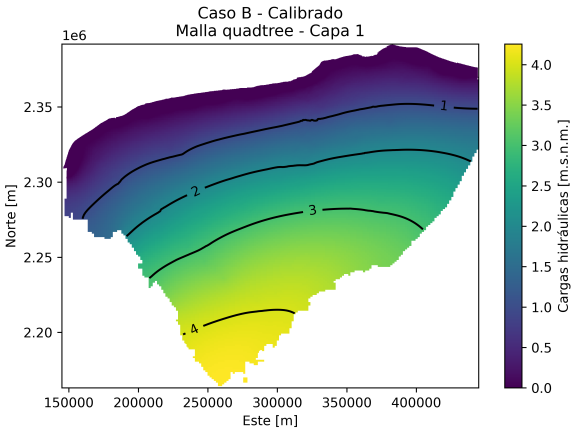
((a)) Caso B calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso B calibrado, malla triangular.

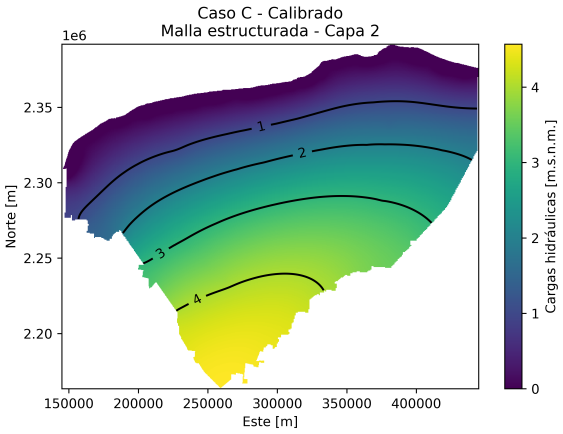


((c)) Caso B calibrado, malla Voronoi.

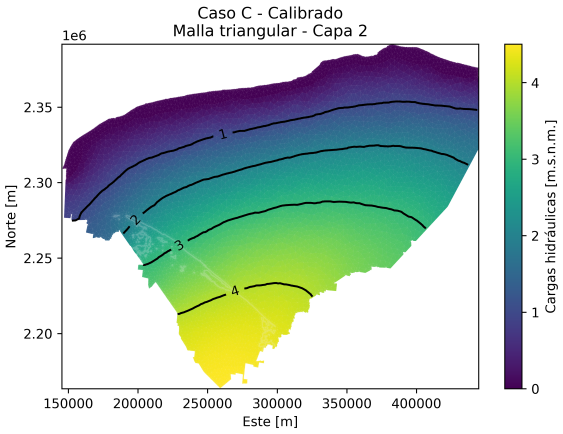


((d)) Caso B calibrado, malla quadtree.

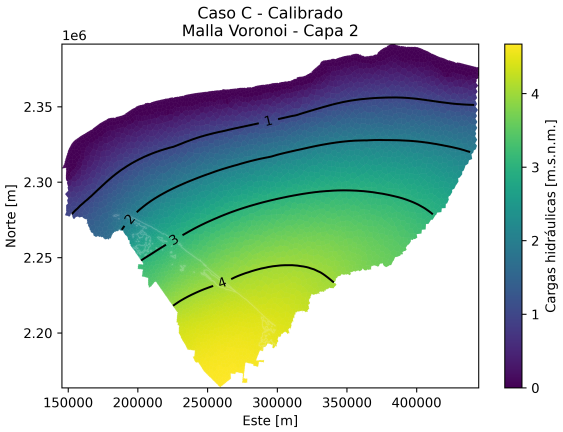
Figura 5.24: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso B calibradas, capa 2.



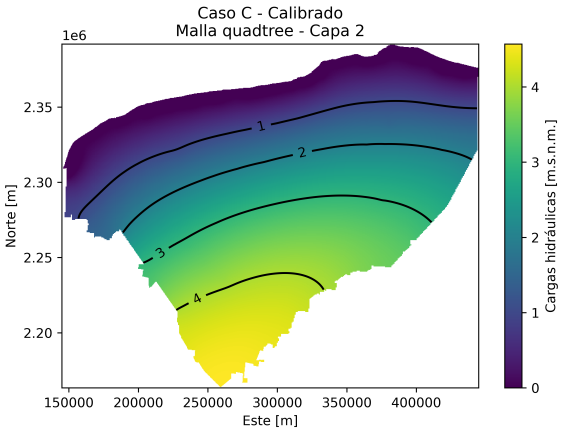
((a)) Caso C calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso C calibrado, malla triangular.

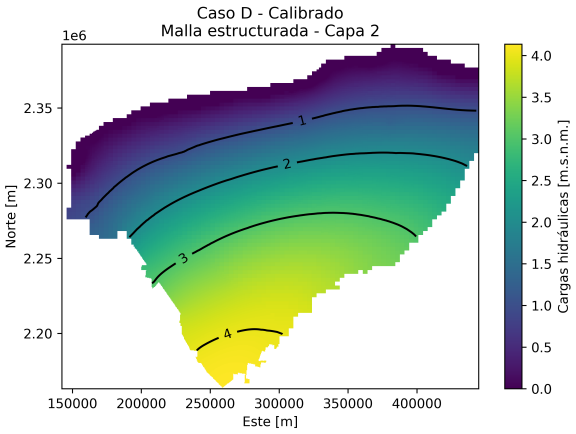


((c)) Caso C calibrado, malla Voronoi.

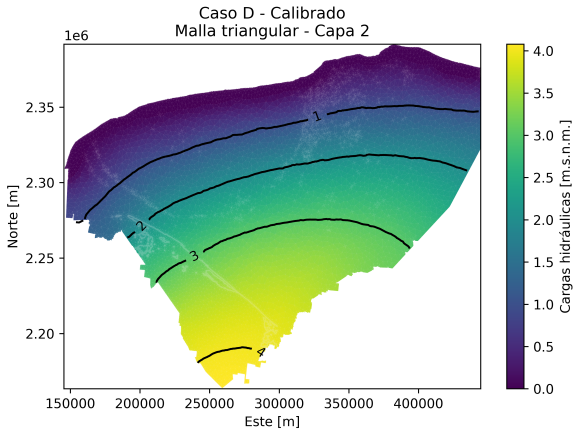


((d)) Caso C calibrado, malla quadtree.

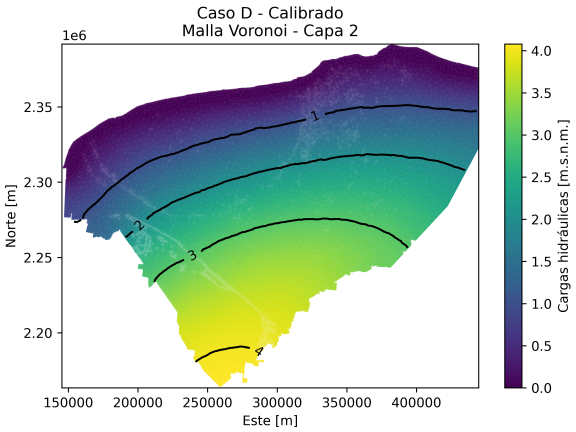
Figura 5.25: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso C calibradas, capa 2.



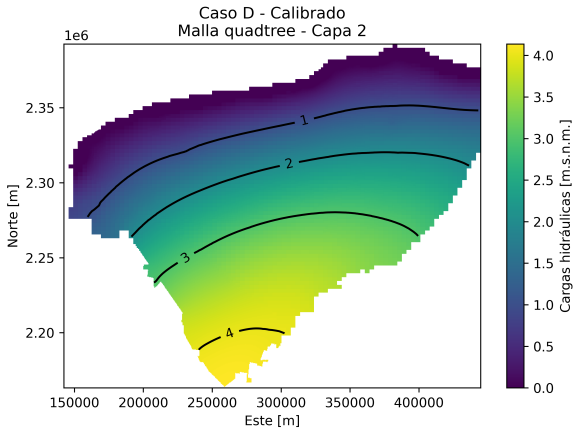
((a)) Caso D calibrado, malla estructurada.



((b)) Caso D calibrado, malla triangular.



((c)) Caso D calibrado, malla Voronoi.



((d)) Caso D calibrado, malla quadtree.

Figura 5.26: Malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree del caso D calibradas, capa 2.

Una vez calibrados los modelos en la malla de referencia, los parámetros efectivos se conviertierón a parámetros absolutos, mediante la multiplicación de los valores efectivos por los campos base de cada parámetro, dichos parámetros fuerón transferidos a las otras discretizaciones y con ello se calcularón las métricas que cuantifican el ajuste del error entre los datos observados y los valores simulados calibrados. Las Tablas 5.2-5.5 reportan los **valores absolutos** estimados en la malla quadtree para cada caso conceptual. Estos valores se adoptan como referencia para los análisis de transferencia entre mallas, y representan parámetros efectivos condicionados al modelo conceptual (zonificación) y al conjunto de observaciones disponibles. Los parámetros estimados deben interpretarse como 'parámetros efectivos' a escala del modelo, no como mediciones directas puntuales

de laboratorio o sintéticas.

Tabla 5.2: Parámetros absolutos del caso A (DISU) calibrado.

Modelo calibrado	Parámetro	Valor absoluto
Caso A - Malla quadtree	k_rest_l1	0.008
	k_rest_l2	0.122
	r_upland	0.067
	r_rest	0.45
	fgw_upland	0.287
	fgw_rest	0.300

Tabla 5.3: Parámetros absolutos del caso B (DISU) calibrado.

Modelo calibrado	Parámetro	Valor absoluto
Caso B - Malla quadtree	k_ring_l1	0.087
	k_ring_l2	0.784
	k_rest_l1	0.002
	k_rest_l2	0.176
	r_upland	0.05
	r_rest	0.45
	fgw_upland	0.3
	fgw_rest	0.462

Tabla 5.4: Parámetros absolutos del caso C (DISU) calibrado.

Modelo calibrado	Parámetro	Valor absoluto
Caso C - Malla quadtree	$K_{upland_{L1}}$	0.0003
	$K_{upland_{L2}}$	0.003
	$K_{rest_{L1}}$	0.0009
	$K_{rest_{L2}}$	0.175
	R_{upland}	0.05
	R_{rest}	0.45
	FGW_{upland}	0.3
	FGW_{rest}	0.5

Tabla 5.5: Parámetros absolutos del caso D (DISU) calibrado.

Modelo calibrado	Parámetro	Valor absoluto
Caso D - Malla quadtree	$K_{upland_{L1}}$	0.0005
	$K_{upland_{L2}}$	0.003
	$K_{ring_{L1}}$	0.065
	$K_{ring_{L2}}$	0.486
	$K_{rest_{L1}}$	0.001
	$K_{rest_{l2}}$	0.161
	R_{upland}	0.052
	R_{rest}	0.447
	FGW_{upland}	0.249
	FGW_{rest}	0.486

De manera general, los resultados calibrados mantienen **patrones regionales coherentes** entre las mallas en cada Caso conceptual, los valores calibrados muestran una gran similitud entre si y las métricas de ajuste permanecen del orden de ~ 0.8 [m]. Esta consistencia sugiere que, una vez que se ha fijado los esquemas conceptuales (caso A-D) y el conjunto de parámetros calibrables, la solución numérica es **robusta** ante cambios razonables de discretización (malla estructurada, triangular, Voronoi y quadtree).

Las Tablas 5.6-5.9 resumen las métricas principales (RMSE, MAE, sesgo, mediana del error absoluto y error absoluto máximo) ontenidas por cada Caso y malla. En todos los casos, el RMSE se mantiene en un rango estrecho entre las discretizaciones, lo cual apoya la interpretación de independencia numérica (o baja sensibilidad a la discretización) a escala regional. Las Tablas 5.10-5.13 complementan los resultados con los valores obtenidos de la función Φ y el RMSE ponderado $\sqrt{\Phi/N}$, consistentes con el enfoque de mínimos cuadrados ponderados de PEST++.

Tabla 5.6: Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual A.

Escenario	Malla	N	RMSE [m]	MAE [m]	Bias [m]	$\lvert err \rvert_{50}$ [m]	$\lvert err \rvert_{máx}$ [m]
Caso A	Estructurada	135	0.882	0.607	-0.276	0.376	4.568
	Triangular	135	0.836	0.600	-0.150	0.340	4.420
	Voronoi	135	0.825	0.590	-0.167	0.356	4.428
	Quadtree	135	0.827	0.552	-0.177	0.345	4.433

Tabla 5.7: Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual B.

Escenario	Malla	N	RMSE [m]	MAE [m]	Bias [m]	$\|err\|_{50}$ [m]	$\|err\|_{máx}$ [m]
Caso B	Estructurada	135	0.889	0.600	-0.270	0.360	4.563
	Triangular	135	0.845	0.597	-0.280	0.369	4.510
	Voronoi	135	0.839	0.590	-0.200	0.354	4.420
	Quadtree	135	0.822	0.549	-0.170	0.335	4.430

Tabla 5.8: Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual C.

Escenario	Malla	N	RMSE [m]	MAE [m]	Bias [m]	$\|err\|_{50}$ [m]	$\|err\|_{máx}$ [m]
Caso C	Estructurada	135	0.840	0.610	-0.280	0.380	4.569
	Triangular	135	0.830	0.600	-0.273	0.360	4.530
	Voronoi	135	0.823	0.580	-0.220	0.344	4.510
	Quadtree	135	0.812	0.550	-0.173	0.340	4.410

Tabla 5.9: Principales métricas de ajuste de cada malla para el caso conceptual D.

Escenario	Malla	N	RMSE [m]	MAE [m]	Bias [m]	$\|err\|_{50}$ [m]	$\|err\|_{máx}$ [m]
Caso D	Estructurada	135	0.846	0.500	-0.150	0.320	4.210
	Triangular	135	0.835	0.551	-0.176	0.340	4.430
	Voronoi	135	0.833	0.549	-0.174	0.337	4.427
	Quadtree	135	0.829	0.530	-0.169	0.330	4.420

Tabla 5.10: Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual A.

Escenario	Malla	N	Phi $\sum(\mathbf{w} * \text{residual})^2$	RMSE ponderado $\sqrt{Phi/N}$
Caso A	Estructurada	135	57.372	0.651
	Triangular	135	53.840	0.638
	Voronoi	135	53.850	0.633
	Quadtree	135	53.866	0.631

Tabla 5.11: Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual B.

Escenario	Malla	N	Phi $\sum(\mathbf{w} * \text{residual})^2$	RMSE ponderado $\sqrt{Phi/N}$
Caso B	Estructurada	135	57.320	0.656
	Triangular	135	53.310	0.625
	Voronoi	135	53.840	0.639
	Quadtree	135	53.836	0.631

Tabla 5.12: Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual C.

Escenario	Malla	N	Phi $\sum(\mathbf{w} * \text{residual})^2$	RMSE ponderado $\sqrt{Phi/N}$
Caso C	Estructurada	135	56.756	0.656
	Triangular	135	53.856	0.646
	Voronoi	135	53.729	0.630
	Quadtree	135	51.739	0.619

Tabla 5.13: Métricas secundarias de ajuste de cada malla para el caso conceptual D.

Escenario	Malla	N	Phi $\sum(\mathbf{w} * \text{residual})^2$	RMSE ponderado $\sqrt{Phi/N}$
Caso D	Estructurada	135	57.100	0.659
	Triangular	135	53.346	0.640
	Voronoi	135	53.210	0.639
	Quadtree	135	52.164	0.621

5.3.2. Restricción costera mediante SGD

Comparación de experimentos (`head` vs `head` + `sgd`). Con el fin de evaluar si la incorporación de información costera mejora la identificabilidad de parámetros relevantes en la zona litoral (y, por extensión, en el control regional del flujo hacia la costa), se realizaron **dos experimentos** en la **malla quadtree** para cada caso conceptual (A-D):

- **E1: Grupo `head`.** Calibración realizada usando únicamente el grupo de observaciones piezométricas.
- **E2: Grupo `head` + `sgd`.** Calibración multi-objetivo que integra el grupo de observaciones de cargas hidráulicas y SGD segmentado a lo largo de la costa.

La lógica de E2 es que, con solo los datos piezométricos, el ajuste puede quedar dominado por parámetros que controlan la respuesta promedio regional (ya sea RCH/EVT efectivas), mientras que el intercambio costa-acuífero puede quedar débilmente identificado. La incorporación de SGD introduce una 'segunda vista' del sistema: ya que no sólo ajusta niveles, sino que también penaliza soluciones que producen una descarga costera fuera de lugar.

Definición de observaciones SGD y normalización: Las observaciones de SGD se definieron por segmentos a lo largo de la costa norte, asignando valores a partir de la literatura ([Murgulet et al., 2020]). En el modelo, la descarga costera se evaluó a partir del **flujo neto hacía el margen costero** representado por celdas tipo CHD en el borde del dominio activo. Debido a que los valores de SGD pueden diferir de escala respecto a las cargas hidráulicas, en el experimento E2 se aplicó:

1. **Normalización consistente** (mismo factor aplicado a observado y simulado), con el fin de tratar la comparación como un **misfit de patrón** (pattern-only) o como un misfit en una magnitud reescalada, evitando discrepancias numéricas por unidades/escala;

2. **Ajuste de pesos** para que SGD no dominara artificialmente la función objetivo.

Como resultado, la función objetivo final presentó una distribución de contribuciones del tipo:

$$\Phi_{\text{total}} \approx 53.2, \tag{5.2}$$

$$\Phi_{\text{head}} \approx 52.2, \tag{5.3}$$

$$\Phi_{\text{sgd}} \approx 1.0. \tag{5.4}$$

lo cual indica que **SGD operó como restricción suave**, claramente no reemplaza a las cargas hidráulicas como controlador principal del ajuste, pero evita soluciones que ajustan 'bien' niveles a costa de una descarga costera físicamente poco plausible.

Desglose de la función objetivo y rol de SGD (Experimento 2). En el Experimento 2 se utilizó una función objetivo conjunta con dos grupos de información: (i) residuales de cargas hidráulicas (`heads`) y (ii) un término de penalización asociado a la descarga costera/SGD (`SGD`). La función objetivo puede escribirse de forma compacta como:

$$\Phi_{\text{total}}(\boldsymbol{\theta}) = \Phi_{\text{heads}}(\boldsymbol{\theta}) + \Phi_{\text{SGD}}(\boldsymbol{\theta}), \tag{5.5}$$

donde $\Phi_{\text{heads}} = \sum_i (w_i r_i)^2$ corresponde a mínimos cuadrados ponderados en cargas, y Φ_{SGD} es una penalización suave controlada por un factor de escala λ_{SGD}. El propósito de este término no es "ganarle" a las cargas hidráulicas ni reemplazarlas como observación principal, sino **descartar soluciones no físicas** que ajustan bien las cargas a costa de una descarga costera inconsistente con el comportamiento esperado del sistema.

Para asegurar que el término SGD opere como *restricción suave* y no domine artificialmente la calibración, se verificó explícitamente el desglose de contribuciones:

$$\Phi_{\text{total}} \approx 53.2, \qquad \Phi_{\text{heads}} \approx 52.2, \qquad \Phi_{\text{SGD}} \approx 1.0, \tag{5.6}$$

lo cual indica que Φ_{SGD} representa una fracción pequeña del total (del orden de $\sim 2\,\%$) y actúa como penalización de consistencia costera. En otras palabras, la solución sigue estando controlada principalmente por las cargas hidráulicas, pero el término SGD evita regiones del espacio paramétrico donde el ajuste de cargas es "bueno" de forma espuria (p. ej., compensaciones extremas de recarga/conductividad) y conduce a una descarga costera físicamente poco plausible.

Impacto esperado en métricas y en interpretación. Bajo este diseño, se espera que el Experimento 2 produzca: (i) un desempeño comparable en métricas de cargas (RMSE/MAE/bias), porque el grupo `heads` continúa dominando Φ; y (ii) una solución más consistente desde el punto de vista hidrogeológico en la zona costera, al penalizar explícitamente comportamientos extremos de descarga. Por ello, el efecto del término SGD debe interpretarse como una *regularización física* y no como una fuente independiente de ajuste.

Impacto sobre métricas y comparación (ejemplo con Caso D) La Tabla 5.14 resume el desempeño para el caso D en la malla quadtree. En general, E2 tiende a producir:

- un desempeño comparable en RMSE de cargas;
- y una solución más consistente con el comportamiento costero esperado, al introducir una penalización explícita sobre la descarga.

Tabla 5.14: Comparación entre calibración solo con `head` (E1) y calibración `head`+`sgd` (E2) para el Caso D (malla quadtree).

Experimento	RMSE [m]	MAE [m]	Bias [m]
E1: `head`	0.882	0.607	-0.276
E2: `head`+`sgd`	0.829	0.526	-0.127

Además del impacto en métricas, el aporte más relevante de E2 es su efecto en la **identificabilidad**: al cambiar el contenido informacional de Φ, cambian la **sensibilidad compuesta escalada (CSS)** y la **estructura de correlación** entre parámetros. Dicho de otra forma: el experimento E2 no sólo busca disminuye el valor del RMSE, sino también, hace que los parámetros de los modelos seas más **diagnosticable** con respecto a las zonas de interés (costa/anillo de cenotes/zona elevada).

Nota: El experimento E2 (`head` + `sgd`), se evaluó unicamente en la malla quadtree, ya que el objetivo fue cuantificar el efecto de la restricción costera sobre la identificabilidad en la malla de referencia; la prueba de independencia numérica se basó en la transferencia de parámetros del experimento E1.

5.3.3. Transferencia de parámetros y consistencia entre mallas

Una vez calibrado cada caso en la malla quadtree bajo el experimento E1, se transfirieron los **parámetros absolutos** a las demás discretizaciones (estructurada, triangular y Voronoi) **sin recalibración**. Este procedimiento permite aislar el efecto puramente numérico de la discretización: se mantiene constante la 'fisica' (los mismos parámetros) y se observa cuanto cambia la respuesta simulada al cambiar la malla. Los resultados muestran métricas consistentes entre discretizaciones, con RMSE del orden de ~ 0.8 [m] en los cuatro casos. Esta estabilidad confirma que las diferencias entre mallas introducen una variabilidad relativamente pequeña a escala regional, y apoya la interpretación de que el modelo es suficientemente robusto para comparar entre casos conceptuales (A-D) sin que la discretización sesgue la interpretación principal.

5.4. Resultados del análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad se realizó en la malla quadtree (DISU), utilizada como malla de referencia para la calibración automática, y se enfocó en el caso D como escenario integrador de la parametrización zonificada. Se aplicaron dos niveles de análisis complementarios:

1. Sensibilidad local, basada en el Jacobiano calculado por PEST++ y resumida mediante **Composite Scaled Sensitivities (CSS)**.
2. **Sensibilidad global**, mediante los métodos de Morris (cribado y ranking inicial) y Sobol (descomposición de varianza), evaluando por separado el efecto de los parámetros sobre:
   - el RMSE de cargas hidráulicas (RMSE_{head}),
   - y el misfit de SGD (RMSE_{sgd} con SGD normalizado).

Este enfoque permitió distinguir entre parámetros que controlan el ajuste piezométrico regional y aquellos con influencia específica sobre la restricción costera asociada a la descarga subterránea al mar.

5.4.1. Sensibilidad local con PEST++ (CSS) por grupo (`head` vs. `SGD`)

La sensibilidad local se evaluó usando el Jacobiano generado por PEST++ al final de la calibración, y se resumió mediante CSS, correlación entre parámetros y leverage por observación. Como ya se comentó previamente, con el objetivo de evaluar si la restricción costera aporta información adicional y mejora la identificabilidad de parámetros en regiones litorales, se ejecutó el segundo experimento (E2) incorporando observaciones de **submarine groundwater discharge (SGD)** por segmentos costeros. Está descomposición es importante porque el parámetro puede ser 'dominante' para explicar niveles piezométricos, pero irrelevante para explicar SGD, o viceversa. En términos prácticos, CSS_{head} responde al control de la recarga y la evapotranspiración, así como también a la transmisividad

sobre el campo regional de cargas hidráulicas, por otra parte, CSS_{sgd} responde al control de parámetros sobre el flujo neto hacia el margen costero, de esta manera, condicionado por la configuración de las celdas CHD (Constante-Head), geometría de los segmentos y el esquema de conversión a flujo/flujo superficial. En este experimento se reportan tres variantes de sensibilidad:

1. CSS total: calculada usando todas las observaciones (`head` + `sgd`)
2. CSS_{head}: calculada solo con observaciones del grupo `head`.
3. CSS_{sgd}: calculada solo con observaciones del grupo `sgd`.

La Tabla 5.15 resume los valores de CSS para el caso D con malla quadtree, reportando tanto el CSS total como su descomposición por grupos de observación (`head` y `sgd`), así como el ranking relativo de sensibilidad por grupo. Un resultado metodológico central es que, en el régimen balanceado adoptado, el aporte de SGD a la función objetivo se mantuvo deliberadamente bajo para evitar dominancia artificial, resultando en contribuciones típicas del tipo:

$$\Phi_{head} \gg \Phi_{sgd} \tag{5.7}$$

Tabla 5.15: Valores obtenidos del CSS total y el los grupos 'head' y 'sgd' por separado, del caso D malla quadtree.

Escenario	Parámetro	CSS total	CSS_head	CSS_sgd	rank_total	rank_head	rank_sgd
Caso D	R_{rest}	19.772	19.772	7.223e-2	1	1	1
	$K_{rest_{L2}}$	16.809	16.809	1.843e-3	2	2	3
	R_{upland}	0.638	0.638	1.202e-3	3	3	4
	$K_{ring_{L2}}$	0.335	0.335	9.115e-4	4	4	5
	FGW_{rest}	0.331	0.331	2.059e-3	5	5	2
	$K_{rest_{L1}}$	0.270	0.270	0.805e-4	6	6	6
	$K_{upland_{L2}}$	0.083	0.083	1.016e-4	7	7	8
	$K_{ring_{L1}}$	0.050	0.050	1.163e-4	8	8	7
	$K_{upland_{L1}}$	0.026	0.026	5.287e-5	9	9	9
	FGW_{upland}	0.002	0.002	2.905e-16	10	10	10

En este escenario, el término SGD se incorpora como una restricción suave sobre el balance costero: es decir, introduce una penalización asociada a la descarga subterránea

hacia el mar, sin sustituir el criterio principal de ajuste basado en las cargas hidráulicas observadas. Como se muestra en la Tabla 5.15, la contribución de sensibilidad asociada al grupo `SGD` es, en general, mucho menor que la asociada al grupo `head` (y por tanto, también mucho menor en el CSS total). Este resultado es consistente con el diseño de experimento: al mantenerse el ajuste de niveles piezométricos como componente dominante de la función objetivo, la información 'extra' aportada por SGD opera principalmente como un **término regularizador**, capaz de influir en casos específicos, pero sin desplazar el patrón dominante de sensibilidad del sistema. Aun así, la incorporación de SGD no es irrelevante: aunque su magnitud global sea pequeña, introduce **direccionalidad física** hacia soluciones compatibles con el intercambio costero, lo cual puede modificar el orden relativo de ciertos parámetros cuando existe equifinalidad entre combinaciones que ajustan bien los niveles, pero implican balances costeros diferentes. En términos generales, el patrón observado confirma lo esperado en la calibración regional: el modelo es más sensible a parámetros que controlan el **balance hídrico regional** y la **transmisividad efectiva** (en particular en la zona 'rest'), porque éstos gobiernan los gradientes regionales y la distribución espacial de la carga hidráulica. En contraste, la señal de SGD aparece como un ajuste adicional acotado, coherente con un enfoque donde la descarga costera se utiliza como restricción secundaria y no como variable dominante de ajuste. En términos generales se puede decir que, si el grupo `sgd` tiene menos 'peso efectivo' (menos términos, menor magnitud o mayor incertidumbre), su contribución al gradiente de la función objetivo cae. Además, como ya se comentó, SGD tiende a ser un **integral costero**: responde a combinaciones de parámetros y puede 'promediar' señales locales, por eso su sensibilidad por parámetro puede verse comprimida frente a la señal directa de niveles piezométricos.

5.4.2. Sensibilidad global tipo Morris (screening)

Como primera etapa de sensibilidad global, se aplicó el método de Morris para construir un ranking de influencia de los parámetros sobre métricas escalares de desempeño. Se realizarón dos análisis:

- Morris para RMSE_{head} (cargas hidráulicas)

- Morris para RMSE_{sgd} (SGD normalizado)

5.4.2.1. (a) Morris sobre RMSE_{head}

En esta prueba tipo **Morris (screening)**, el ranking por $\mu*$ para $RMSE_{head}$ evidencia un patrón muy claro: la respuesta del modelo está dominada por un subconjunto reducido de parámetros asociados al **balance regional** y a la **transmisividad efectiva**. En particular, los dos parámetros con mayor influencia son $K_{rest_{L2}}$ y R_{rest}, es decir, los parámetros de la conductividad hidráulica en la zona plana de la capa 2, y la recarga en la zona plana (Tabla 5.16), lo que indica que el ajuste de cargas hidráulicas en el dominio está controlado principalmente por la capacidad del sistema de **transmitir** flujo a escala regional en la **capa más transmisiva, capa profunda** (capa 2) y el nivel efectivo de **entrada** al sistema mediante la recarga a traves de la precipitación. La separación entre los parámetros dominantes y el resto es marcada: mientras $K_{rest_{L2}}$ presenta $\mu* \approx 4.7$ y R_{rest} presenta $\mu* \approx 3.8$, los parámetros siguientes aparecen muy por debajo ($\mu* < 1$). Este tipo de jerarquía es típico de modelos regionales con parametrización zonal: una vez definidos los grandes controles (transmisividad y recarga efectiva), parámetros más locales o de zonas particulares aportan ajustes secundarios y su influencia queda limitada por la red de observaciones disponible y por la estructura conceptual adoptada. Además del ranking, la comparación entre μ y $\mu*$, junto con los valores de σ, sugiere que la sensibilidad no es puramente lineal. En los parámetros dominantes, los valores elevados de σ (del mismo orden que $\mu*$) son indicativos de **no linealidad** y/o **interacciones** con otros parámetros. En términos prácticos, esto significa que la mejora del ajuste no depende únicamente de ajustar un parámetro de forma aislada, sino de combinaciones coherentes entre recarga y transmisividad (por ejemplo, ajustes compensarios o sinergia entre R_{rest} y $K_{rest_{L2}}$). Por está razón, Morris es útil como 'tamiz' para identificar controles principales, pero no sustituye un análisis posterior de interacciones (por ejemplo, Sobol o diagnósticos de correlación/identificabilidad). Por otra parte, los parámetros asociados al **anillo de cenotes** en ambas capas y el parámetro FGW_{upland} muestran $\mu*$ muy bajo (cercano a cero), lo que implica que, bajo la formulación actual y para el conjunto de observaciones utilizado, su influencia en $RMSE_{head}$ es limitada. Esta baja sensibilidad puede interpretarse de dos for-

mas no excluyentes: el sistema, a escala regional, está mejor restringido por el balance y la transmisividad del 'resto', del dominio que por contrastes adicionales en zonas específicas; y/o la red de observación no aporta suficiente información independiente para identificar con fuerza esos parámetros, lo que aumenta la probabilidad de equifinalidad en ese subespacio. En conjunto, los resultados de Morris apoyan una conclusión operativa para la calibración: si el objetivo es mejorar el ajuste global de cargas hidráulicas, la prioridad debe centrarse en los parámetros dominantes (principalmente $K_{rest_{L2}}$ y R_{rest}), mientras que parámetros de baja influencia pueden mantenerse acotados regularizados, a menos que se incorporen observaciones adicionales, como datos costeros/SGD, observaciones multinivel o información estructural local, que aumenten su identificabilidad. En resumen, el método de Morris identifica como controles principales del $RMSE_{head}$ la **transmisividad efectiva regional (capa 2)** y la **recarga efectiva**; el resto de los parámetros tiene influencia secundaria o no identificable con la información disponible, lo cual orienta tanto la estrategia de calibración como las necesidades de datos adicionales.

Tabla 5.16: Valores obtenidos de Morris sobre $RMSE_{head}$.

Parámetro	$\mu*$	μ	σ	μ_{star}
$K_{rest_{L2}}$	4.67	-4.58	4.68	2.12
R_{rest}	3.77	3.39	4.67	2.06
R_{upland}	0.96	0.79	0.94	0.38
$K_{rest_{L1}}$	0.60	-0.59	0.95	0.50
FGW_{rest}	0.40	-0.39	0.81	0.37
$K_{upland_{L2}}$	0.15	0.15	0.28	0.14
$K_{upland_{L1}}$	0.04	0.04	0.08	0.03
$K_{ring_{L2}}$	0.04	-0.03	0.05	0.02
$K_{ring_{L1}}$	0.01	-0.01	0.03	0.01
FGW_{upland}	7.5e-4	-7.4e-4	1.61e-3	7.2e-4

La Figura 5.27 muestra el diagrama de sensibilidad global tipo Morris con los 5 parámetros dominantes.

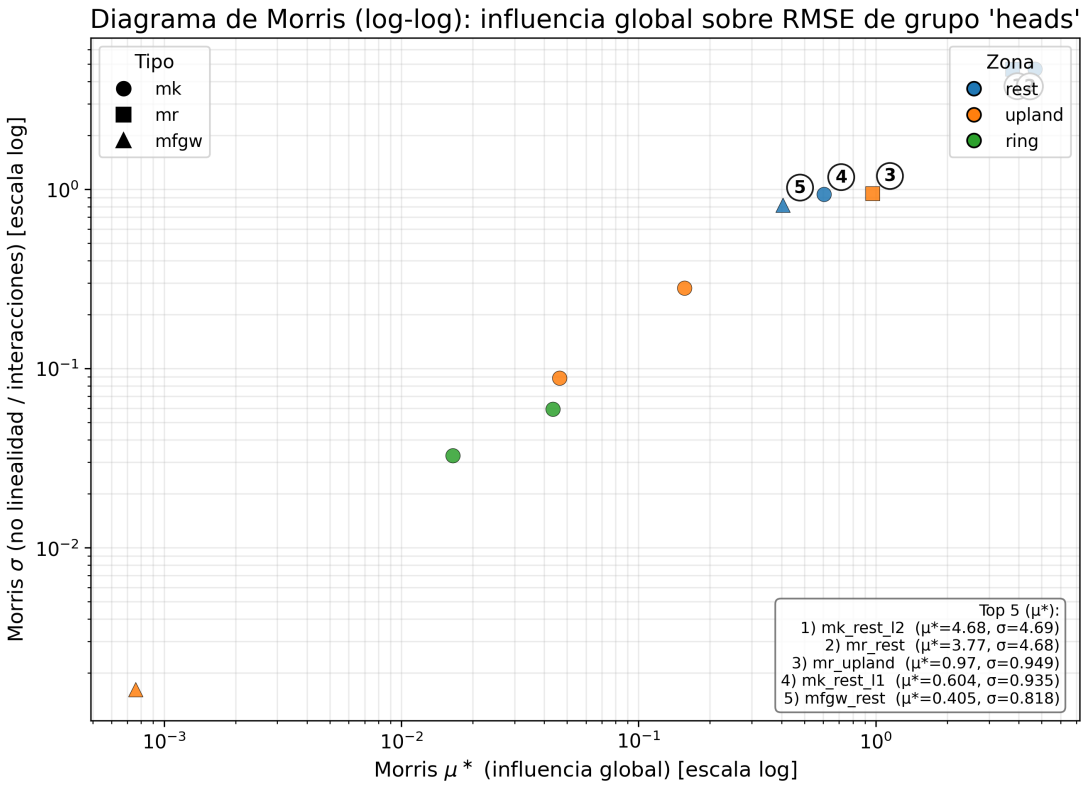


Figura 5.27: Diagrama de sensibilidad global tipo Morris para el RMSE del grupo `head`. El eje $\mu*$ (escala logarítmica) representa la influencia global de cada parámetro sobre el RMSE y σ (escala logarítmica) resume la contribución de no linealidades e interacciones. Los numeros 1-5 destacan los parámetros dominantes y el recuadro indica su nombre y valores de $\mu*$ y σ.

Interpretación de σ en Morris – grupo `head`: En el método de Morris, la comparación entre $\mu*$ y σ permite diagnosticar si la influencia de un parámetro es esencialmente **aditiva y lineal** o si está dominada por **no linealidad e interacciones** con otros parámetros. En el caso de $RMSE_{head}$, los parámetros dominantes (por ejemplo, $K_{rest_{L2}}$ y R_{rest}) muestran valores altos de $\mu*$ y, al mismo tiempo, valores de σ comparables en magnitud. Esta relación $\sigma \sim \mu*$ sugiere que el efecto del parámetro sobre la métrica no es constante a lo largo del espacio paramétrico: el impacto depende del contexto, es decir, de combinaciones con otros parámetros (trade-off recarga-transmisividad y ajustes compensatorios entre K, recarga y/o EVT). En términos hidrológicos, esto es coherente con un modelo reginal donde distintas combinaciones de entradas (recarga) y capacidad de transmisión (K efectiva por capa) pueden producir niveles similares, lo que genera equifinalidad y sensibi-

lidad condicionada. Adicionalmente, cuando un parámetro presenta $\mu*$ bajo y σ también bajo, su influencia es reducida y relativamente estable; esto indica que el parámetro es, en la práctica, poco identificable por las observaciones de carga bajo la parametrización actual. Por tanto, en el grupo `head`, Morris no solo identifica qué parámetros controlan el ajuste, sino que también revela que el comportamiento está parcialmente gobernado por interacciones, justificando el uso de un análisis de sensibilidad global más completo (por ejemplo, Sobol) o un diagnóstico adicional de correlación/identificabilidad.

5.4.2.2. (b) Morris sobre RMSE$_{sgd}$

Cuando la métrica de salida se define como $RMSE_{sgd}$ (SGD segmentado y normalizado), el ranking de sensibilidad cambia de forma notable respecto a $RMSE_{head}$. En este caso, el parámetro dominante por $\mu*$ es R_{rest}, con un valor significativamente mayor que el resto de parámetros. A considerable distancia le siguen las contribuciones secundarias asociadas a la recarga en zona alta y a parámetros que controlan la transmisividad regional y la partición/efectividad de agua subterránea en el dominio (Tabla 5.17). Esta jerarquía sugiere que el indicador de SGD, tal como fue formulado en este experimento, está controlado principalmente por el **balance hídrico regional efectivo** (entrada neta de agua al sistema) y, en segundo orden, por la capacidad del sistema para redistribuir ese balance hacia la costa mediante la transmisividad de las capas más conectadas. Un punto metodológico importante es que $RMSE_{sgd}$ representa una señal distinta a la de cargas hidráulicas: al estar basado en una variable integrada/funcional del flujo costero (SGD), su sensibilidad tiende a concentrarse en parámetros que modulan la **magnitud total** de descarga hacia la costa y no necesariamente en aquellos que controlan el patrón espacial fino de niveles. Por ello, es esperable que los parámetros dominantes en $RMSE_{head}$ (por ejemplo, las conductividades zonales de ciertas regiones o parámetros específicos del anillo) pierdan protagonismo en $RMSE_{sgd}$, mientras que parámetros vinculados a la recarga efectiva (y en menor medida a la transmisividad regional) emergen como controladores principales.

En conjunto, los resultados de Morris para $RMSE_{sgd}$ respaldan la interpretación de SGD como una **restricción complementaria**: aporta información adicional sobre el ba-

lance costero y ayuda a discriminar entre soluciones que ajustan niveles de forma similar, pero implican descargas costeras diferentes. Sin embargo, dada la diferencia de escalas entre $\mu*$ del parámetro dominante y el resto, y considerando los valores de σ, el comportamiento sugiere que existen no linealidades e interacciones, entre recarga y transmisividad, por ejemplo, que justifican el uso de análisis global de varianza (Sobol) para cuantificar contribuciones de primer orden y efectos totales de manera más robusta.

Tabla 5.17: Valores obtenidos de Morris sobre $RMSE_{sgd}$.

Parámetro	$\mu*$	μ	σ	μ_{star}
R_{rest}	2.33e-2	-2.33e-2	7.78e-3	3.41e-3
R_{upland}	2.63e-3	-2.63e-3	1.27e-3	6.30e-4
$K_{rest_{L2}}$	1.61e-3	-1.61e-3	2.05e-3	9.04e-4
FGW_{rest}	1.16e-3	1.16e-3	9.91e-4	4.77e-4
$K_{rest_{L1}}$	2.69e-4	-1.71e-4	5.47e-4	2.53e-4
$K_{ring_{L2}}$	2.22e-4	2.22e-4	2.03e-4	9.83e-5
$K_{ring_{L1}}$	4.57e-5	4.57e-5	4.72e-5	2.40e-5
$K_{upland_{L2}}$	1.11e-5	4.75e-6	1.57e-5	5.44e-6
$K_{upland_{L1}}$	3.71e-6	1.06e-6	6.29e-6	2.24e-6
FGW_{upland}	1.24e-6	1.09e-6	1.47e-6	6.14e-7

La Figura 5.28 muestra el diagrama de sensibilidad global tipo Morris con los 5 parámetros dominantes.

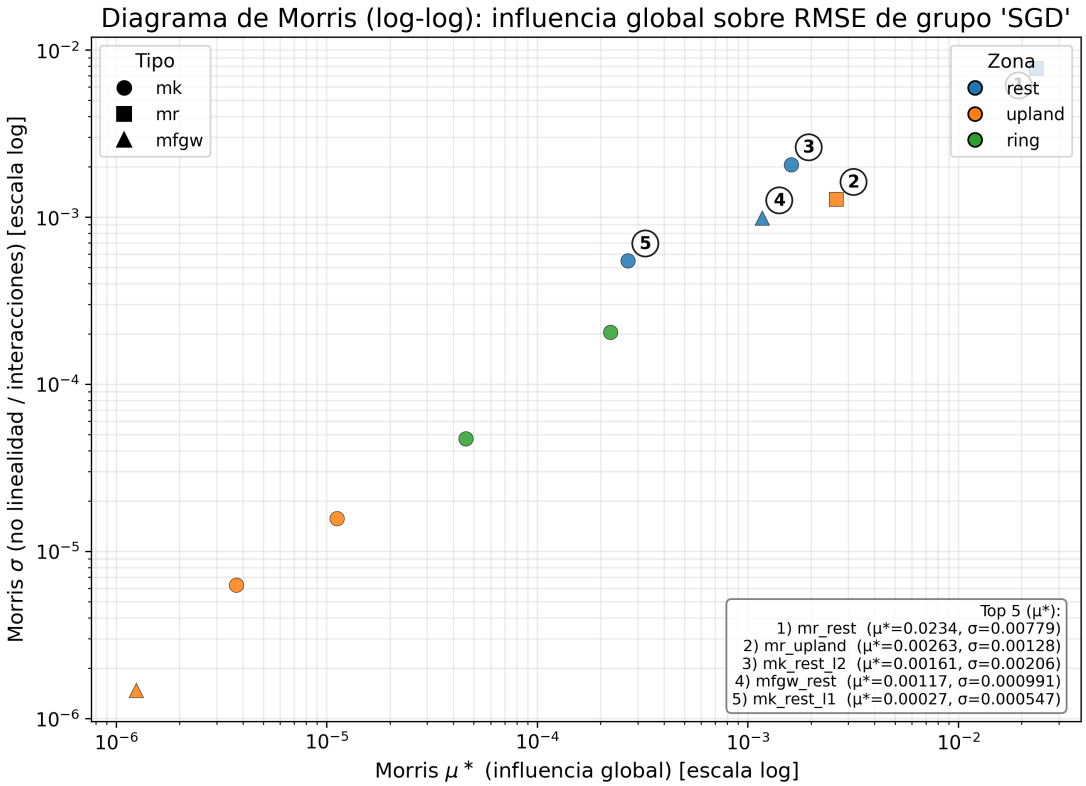


Figura 5.28: Diagrama de sensibilidad global tipo Morris para el RMSE de la descarga subterránea al mar (SGD). El eje $\mu*$ (escala logarítmica) representa la influencia global de cada parámetro sobre el RMSE y σ (escala logarítmica) resume la contribución de no linealidades e interacciones. Los números 1-5 destacana los parámetros dominantes y el recuadro indica su nombre y valores de $\mu*$ y σ. Se observa una fuerte dominancia de pocos parámetros en la respuesta de SGD.

Interpretación de σ en Morris – grupo `sgd`: Para $RMSE_{sgd}$ (SGD segmentado/normalizado), el ranking cambia y el parámetro dominante pasa a ser R_{rest}, seguido por contribuciones de menor magnitud (por ejemplo parámetros ligados a recarga en zona alta, $K_{rest_{L2}}$) y FGW en la zona 'rest', según el orden mostrado). En este caso, la interpretación de σ es especialmente importante: si el parámetro dominante presenta σ del mismo orden que $\mu*$, ello indica que la sensibilidad del indicador SGD no se explica por un efecto lineal único, sino por respuestas que dependen de combinaciones hidrodinámicas, como la recarga efectiva + transmisividad + control costero. Esto es esperable porque SGD es una variable integrada/funcional del flujo hacía costa: suele responder a cambios regionales en el balance hídrico y a cómo ese balance se redistribuye espacialmente, por lo que su

sensibilidad puede ser altamente dependiente del régimen. Cuando σ es relativamente bajo frente a $\mu*$, el efecto del parámetro sobre $RMSE_{sgd}$ es más consistente y casi aditivo, lo cual sugiere un control más directo (por ejemplo, parámetros que ajustan la magnitud global de recarga efectiva). En cambio, cuando σ es comparable a $\mu*$ o incluso lo supera, se infiere que la métrica SGD está modulada por **no linealidad** y/o **interacciones**, lo quw refuerza dos conclusiones:

1. El ajuste de SGD por si solo no identifica de manera única parámetros individuales.

2. El uso de SGD como restricción complementaria debe interpretarse como información adicional que guía el balance costero, más que como un sustituto directo del ajuste de cargas hidráulicas. Por ello, al igual que en grupo `head`, la presencia de σ no despreciable respalda el uso posterior de Sobol (o análisis complementarios) para separar contribuciones de primer orden y efectos de interacción.

En consecuencia, los valores de σ respaldan que la respuesta del modelo está influenciada por interacciones entre parámetros, por lo que los rankings de MOrris deben interpretarse como un screening y no como una descomposición exhaustiva de varianza.

5.4.3. Sensibilidad global tipo Sobol (descomposición de varianza)

A partir del cribado previo con Morris, se evaluó la sensibilidad global mediante Sobol, usando como conjunto de parámetros el subconjunto relevante (o unión de parámetros relevantes para 'head' y 'sgd', según el diseño del experimento). Se reportan índices de:

- primer orden (S_1): contribución individual del parámetro
- efecto total (ST): contribución individual + interacciones.

(a) Sobol para $\mathbf{RMSE}_{head}$: Los resultados muestran que la variabilidad del RMSE de las cargas hidráulicas está explicada principalmente por los dos siguientes parámetros:

- $K_{rest_{L2}}$
    - $S_1 \approx 0.403$

- $ST \approx 0.614$

- R_{rest}

  - $S_1 \approx 0.254$
  - $ST \approx 0.554$

El hecho de que $ST > S_1$ para los dos principales parámetros confirma que, además del efecto individual, existe una contribución importante por las interacciones y/o el comportamiento no lineal. El resto de los parámetros presentan contribuciones mucho menores (por ejemplo, mR_{upland}) con $ST \approx 0.044$, y $mFGW_{rest}$ con $ST \approx 0.016$, por lo que su efecto sobre el RMSE de cargas hidráulicas es secundario dentro del rango de parámetros explorado. Los resultados de la prueba de Sobol para $RMSE_{head}$ se muestran en la Tabla 5.18.

Tabla 5.18: Valores obtenidos de Sobol para $RMSE_{head}$.

Parámetro	S_1	$S_{1_{CONF}}$	ST	ST_{CONF}
$K_{rest_{L2}}$	0.403	0.1892	0.613	0.349
R_{rest}	0.253	0.205	0.554	0.406
R_{upland}	0.029	0.058	4.36e-2	3.07e-2
FGW_{rest}	-8.52e-3	0.015	1.637e-2	2.762e-2
$K_{rest_{L1}}$	0.019	0.028	6.983e-3	5.539e-3
$K_{upland_{L2}}$	-1.794e-3	6.151e-3	1.670e-3	1.190e-3
$K_{ring_{L2}}$	1.713e-3	3.233e-3	11.268e-4	8.332e-5
$K_{upland_{L1}}$	2.05e-4	1.235e-3	7.373e-5	6.133e-5
$K_{ring_{L1}}$	7.21e-4	1.337e-3	8.416e-6	4.354e-6
FGW_{upland}	2e-6	2.3e-5	3.813e-8	3.191e-8

La Figura 5.29 muestra los indices resultantes de sensibilidad global de Sobol del grupo 'heads'.

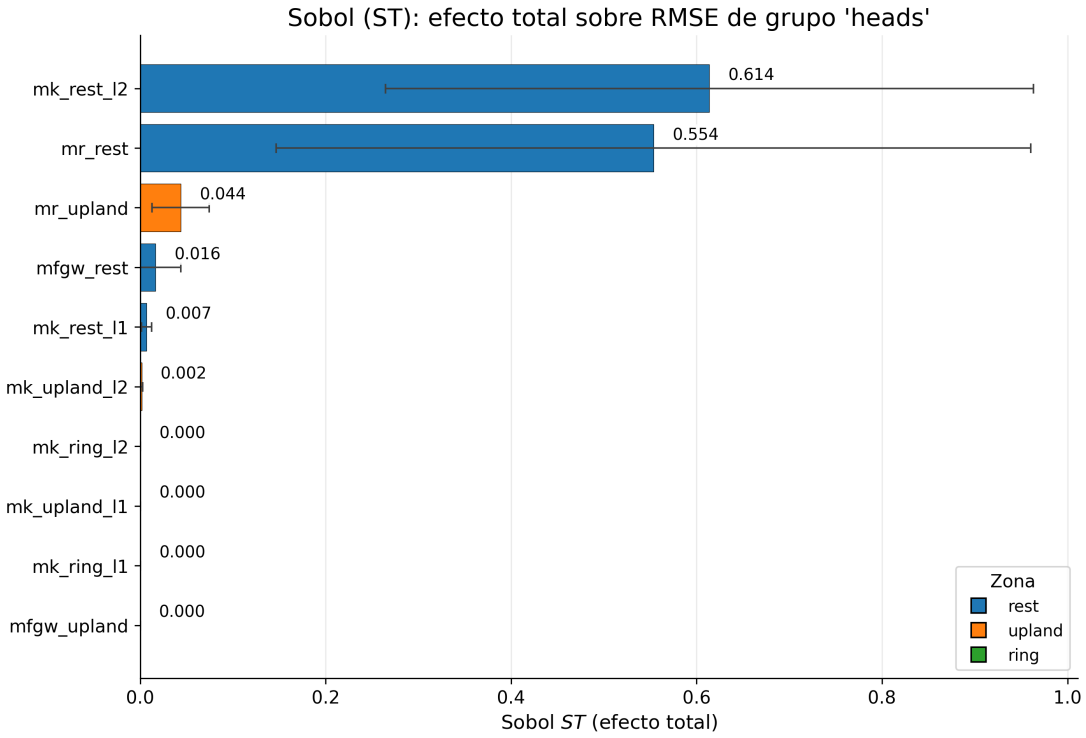


Figura 5.29: Índices de sensibilidad global de Sobol (efecto total, ST) para el RMSE del grupo 'heads'. Las barras horizontales muestran la contribución total de cada parámetro a la varianza del RMSE, incluyendo efectos principales e interacciones. Las líneas representan el intervalo de confianza (ST_{conf}). Los colores corresponden a la zona hidrogeológica asociada a cada parámetro.

(b) Sobol para $RMSE_{sgd}$: Para la métrica de SGD, el patrón es aún más concentrado. El parámetro claramente dominante es:

- mR_{rest}
  - $S_1 \approx 0.991$
  - $ST \approx 0.940$

Esto indica que, en el espacio de búsqueda considerado, el error de SGD está controlado casi por completo por la recarga en la zona 'rest'. Los demás parámetros muestran contribuciones pequeñas (por ejemplo, mR_{upland}, $mK_{rest_{L2}}$, $mFGW_{rest}$). Los resultados de Sobol para $RMSE_{sgd}$ se muestran en la Tabla 5.19.

Tabla 5.19: Valores obtenidos de Sobol para $RMSE_{sgd}$.

Parámetro	S_1	$S_{1_{CONF}}$	ST	ST_{CONF}
R_{rest}	9.912e-1	0.180	9.400e-1	1.747e-1
R_{upland}	6.449e-2	0.033	1.886e-2	0.406
$K_{rest_{L2}}$	8.761e-3	0.017	6.595e-3	5.668e-3
FGW_{rest}	4.175e-3	0.015	3.935e-3	4.534e-3
$K_{rest_{L1}}$	1.066e-3	0.002	1.434e-4	1.967e-4
$K_{ring_{L2}}$	1.591e-3	0.003	1.332e-4	4.205e5
$K_{ring_{L1}}$	-2.256e-5	6.64e-4	5.040-6	1.688e-6
$K_{upland_{L2}}$	-4.771e-5	2.25e-4	1.014e-6	1.025e-6
$K_{upland_{L1}}$	-5.053e-6	3.1e-5	4.273e-8	3.512e-8
FGW_{upland}	6.073e-7	1.3e-5	4.600e-9	3.757e-9

La Figura 5.30 muestra los indices resultantes de sensibilidad global de Sobol del grupo 'SGD'.

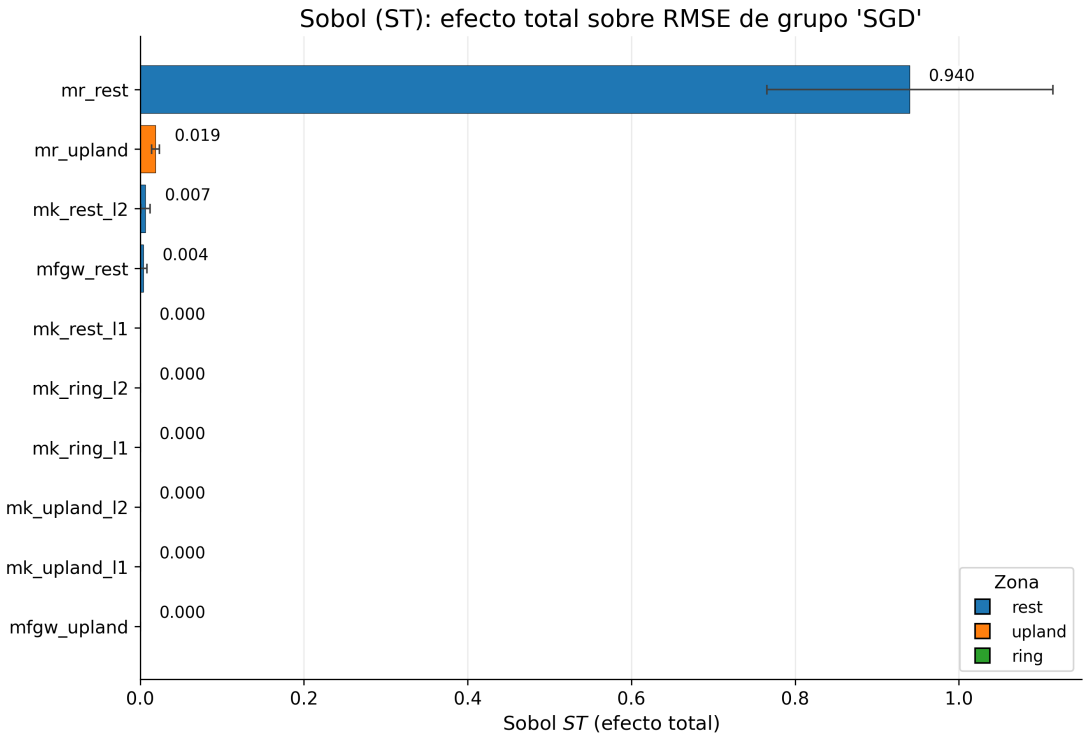


Figura 5.30: índices de sensibilidad global de Sobol (efecto total, ST) para el RMSE dl grupo 'SGD'. El índice ST cuantifica la contribución total de cada parámetro (efecto principal + interacciones) a la varianza del RMSE. Las barras muestras ST y las líneas el intervalo de confianza (ST_{conf}). Los colores indican la zona hidrogeológica asociada al parámetro.

Sobre índices Sobol negativo : En algunos parámetros aparecen valores pequeños negativos de S_1. Esto **es normal** en estimaciones Monte Carlo de Sobol con tamaño de muestra finito y se interpreta como valores cercanos a cero (sin contribución significativa), no como una 'sensibilidad negativa' física.

5.4.4. Comparación de sensibilidad global: `head` vs. `head+sgd`

: La comparación entre las métricas $RMSE_{head}$ y $RMSE_{sgd}$ muestra que ambas responden a subconjuntos de parámetros superpuestos, pero con distinta jerarquía:

- $RMSE_{head}$ enfatiza la combinación de:
  - $mK_{rest_{L2}}$
  - mR_{rest}
- $RMSE_{sgd}$ enfatiza de forma dominante:
  - mR_{rest}

y en segundo plano:

- mR_{upland}
- $mK_{rest_{L2}}$
- $mFGW_{rest}$

Este resultado es importante porque confirma que la incorporación de SGD **sí aporta una perspectiva complementaria** al análisis de sensibilidad, aunque en el régimen de pesos balanceados se comporta como una restricción suave. En particular, SGD no reemplaza la información piezométrica, pero ayuda a evaluar la plausibilidad del balance costero y a explorar la identificabilidad de parámetros asociados a la descarga hacia la costa.

En conjunto, los análisis local (CSS) y global (Morris/Sobol) son consistentes entre sí y apuntan a una estructura de control dominada por la recarga regional (mR_{rest}) y la conductividad hidráulica efectiva de la capa 2 en la zona restante ($mK_{rest_{L2}}$). La inclusión

de SGD como restricción costera no modifica este patrón de dominancia para el ajuste piezométrico, pero sí aporta información complementaria sobre el control hidrológico de la descarga hacia la costa, particularmente sensible a la recarga regional bajo el esquema de normalización y pesos adoptado.

En los cuatro casos conceptuales (A-D), se observa un patrón consistente: los parámetros con mayor influencia sobre el ajuste de cargas hidráulicas son el **multiplicador de recarga de la zona plana** mR_{rest} y la **conductividad hidráulica efectiva de la capa 2 en la zona plana de Yucatán** mK_rest_l2. Esto indica que, usando exclusivamente observaciones de **carga somera**, la calibración tiende a 'ver' principalmente:

- el **balance hídrico regional** (controlado por la recarga)
- y la **transmisividad efectiva que gobierna el drenaje regional hacia la costa** (controlada por la conductividad hidráulica en la capa conductiva).

5.5. Discusión e implicaciones hidrogeológicas

5.5.1. Parámetros dominantes e identificabilidad

La consistencia entre sensibilidad local y global (cuando se utiliza $RMSE_{head}$) muestra que el sistema, tal como está observado, es **principalmente identificable a escala regional**: la recarga efectiva fuera de las zonas especiales y la transmisividad efectiva de la unidad más conductiva controlan el patrón de cargas que drena hacía la costa. Esto es coherente con un acuífero kárstico de gran extensión donde el campo de niveles someros integra procesos regionales y donde múltiples combinaciones de **K, RCH y EVT** pueden producir niveles similares si no existen observaciones profundas o restricciones independientes de flujo. En ese contexto, los parámetros del anillo de cenotes y de la zona elevada presentan menor sensibilidad debido a que:

- Su señal puede quedar 'promediada' al observarse solo la carga somera.
- El modelo puede compensar su efecto mediante ajustes equivalentes en RCH/EVT o en transmisividad regional. Esta condición no inválida el modelo; más bien de-

limita **qué inferencias son robustas** (escala regional) y cuáles requieren **datos adicionales (ya sea a escala local/vertical)**.

5.5.2. Rol de SGD y experimentos metodológicos

La incorporación de SGD representa un intento explícito por introducir información independiente relacionada con el **intercambio costero**. En el régimen balanceado aplicado, SGD funciona como una restricción suave que mejora la plausibilidad del balance costero sin deteriorar el ajuste de cargas. El beneficio principal no necesariamente es reducir $RMSE_{head}$, sino **reducir el espacio de soluciones admisibles** (regularización física) y potencialmente modificar el ranking de identificabilidad hacia parámetros más relacionados con la costa, siempre que la geometría efectiva (segmentación/área) esté bien definida.

5.6. Limitaciones e incertidumbres

Las limitaciones principales del análisis son:

- **Observaciones restringidas a carga somera:** limita la identificación de anisotropía, gradientes verticales y contraste **K** entre capas, favoreciendo equifinalidad.
- **Hipótesis de estado estacionario:** el uso de una sola condición hidráulica promedio puede ocultar procesos transitorios relevantes (estacionalidad de recarga, EVT y nivel del mar)
- **Incertidumbre en forzamientos (RCH/EVT)**: errores sistemáticos en recarga efectiva o en ET_0 se traducen en sesgos compensados por **K** o parámetros de frontera.
- **Conversión de flujos costeros a SGD:** la estimación de SGD a partir de flujo hacia CHD depende de una **definición geométrica** (segmentación y área efectiva) que introduce incertidumbre estructural.
- **Correlación entre parámetros:** parámetros con alta correlación pueden ser numéricamente ajustables pero físicamente no distinguibles con los datos actuales.

Como extensiones futuras se propone integrar:

1. Observaciones multinivel o perfiles.
2. Series transitorias (lluvia-respuesta piezométrica).
3. Restricciones independientes (manantiales, caudales, balances regionales).
4. Pruebas adicionales de robustez de SGD (segmentación alternativa y sensibilidad a área efectiva).

Capítulo 6

CALIBRACIÓN ASISTIDA POR APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

6.1. Motivación y alcance del componente de Inteligencia Artificial en Modelación Hidrogeológica

La calibración de modelos de flujos subterráneo en ambientes regionales complejos suele ser un proceso iterativo, costoso en tiempo de cómputo y altamente dependiente de la calidad y distribución espacial de las observaciones. En este trabajo, el modelo numérico principal se implementa en MODFLOW 6, y se calibra respecto a un conjunto de datos observados distribuidas en el dominio. Aunque las herramientas clásicas de calibración (p. ej., PEST++/pyEMU) son robustas y ampliamente validadas, su desempeño puede verse limitado por el costo de ejecutar repetidamente el simulador numérico (MODFLOW 6) y por la necesidad de explorar un amplio espacio paramétrico. En este contexto, la inteligencia artificial (IA), en particular, el aprendizaje automático aplicado como modelo sustituto (emulador), se incorpora como un componente complementario, orientado a reducir el costo computacional de la exploración paramétrica, facilitar el análisis de sensibilidad y la búsqueda de parámetros mediante optimización sobre un proxy rápido, y establecer una comparación metodológica clara contra la calibración tradicional ([Murphy, 2012]). El enfoque propuesto no busca 'reemplazar' MODFLOW 6, ni sustituir la interpretación

hidrológica; al contrario: se apoya en la tradición de la modelación numérica, donde el simulador físico de MODFLOW 6, sigue siendo la referencia ("ground-truth") y el emulador se utiliza como acelerador, siempre con verificación posterior en el modelo numérico.

6.1.1. Justificación del uso de emuladores (modelos sustitutos) en hidrogeología computacional

En modelación hidrogeológica regional, un simulador como MODFLOW 6 resuelve las ecuaciones de flujo subterráneo (conversiones de masa y ley de Darcy) sobre un dominio discretizado. Si bien una sola ejecución del modelo directo es manejable, el problema se vuelve computacionalmente costoso cuando se requieren *múltiples evaluaciones* del simulador para tareas de calibración, exploración parámetrica o análisis de sensibilidad. En particular, la calibración implica evaluar un modelo repetidamente para diferentes combinaciones del vector de parámetros $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p$, con el objetivo de reproducir un conjunto de datos observados $\mathbf{h}^{\text{obs}} \in \mathbb{R}^n$. Formalmente, el modelo numérico puede entenderse como un operador (generalmente no lineal) que mapea parámetros hacia salidas observables.

$$\mathbf{h}^{\text{sim}} = \mathcal{M}(\boldsymbol{\theta}), \tag{6.1}$$

mientras que un emulador (o modelo sustituto) busca aproximar este mapeo mediante una función computacionalmente mucho menos costosa:

$$\mathbf{h}^{\text{sim}} \approx \widehat{\mathcal{M}}(\boldsymbol{\theta}). \tag{6.2}$$

La motivación del emulador no es reemplazar la física del simulador, sino **acelerar** etapas del flujo de trabajo que dependen evaluar $\mathcal{M}(\boldsymbol{\theta})$ cientos o miles de veces. En el presente trabajo, el emulador se utiliza como herramienta complementaria en cuatro frentes:

1. **Exploración paramétrica y diseño de experimentos:** Permite evaluar rápidamente miles de combinaciones de $\boldsymbol{\theta}$ y caracterizar regiones plausibles del espacio paramétrico, reduciendo el número de ejecuciones costosas del modelo físico.

2. **Optimización/inversa con menor costo:** La estimación de parámetros se plantea

como la minimización de una función objetivo basada en residuales. Usar $\widehat{\mathcal{M}}$ dentro del optimizador permite búsquedas globales más extensas, y posteriormente verificar la solución candidata con $\mathcal{M}$.

3. **Sensibilidad e identificabilidad:** Técnicas globales (por ejemplo, Morris y Sobol) requieren múltiples evaluaciones del modelo; el emulador vuelve estos análisis sean factibles en tiempos razonables y facilita reportes reproducibles.

4. **Emulación multi-salida:** En lugar de emular un escalar (por ejemplo, RMSE), el emulador puede predecir directamente los parámetros simulados en los puntos de observación, preservando la estructura multivariada del problema y permitiendo diagnósticos espaciales del ajuste.

Consideraciones técnicas y límites del enfoque. El uso de emuladores introduce explícitamente una segunda fuente de error, además del error físico/estructural del modelo. Si $\mathbf{h}^{\text{obs}}$ son los datos observados y $\mathbf{h}^{\text{sim}} = \mathcal{M}(\boldsymbol{\theta})$, el residual físico es $\mathbf{r} = \mathbf{h}^{\text{obs}} - \mathbf{h}^{\text{sim}}$. Al sustituir $\mathcal{M}$ por $\widehat{\mathcal{M}}$, el residual puede descomponerse como:

$$\mathbf{h}^{\text{obs}} - \widehat{\mathcal{M}}(\boldsymbol{\theta}) = \underbrace{\mathbf{h}^{\text{obs}} - \mathcal{M}(\boldsymbol{\theta})}_{\text{error físico/medición}} + \underbrace{\mathcal{M}(\boldsymbol{\theta}) - \widehat{\mathcal{M}}(\boldsymbol{\theta})}_{\text{error del emulador}}. \tag{6.3}$$

Por lo tanto, el emulador debe emplearse con una clara regla metodológica: **toda solución candidata obtenida con el emulador, debe verificarse/corroborarse con el simulador físico**. Esta verificación es crítica cuando la solución se encuentra cerca de los límites (bounds) establecidos del espacio paramétrico o en regiones poco cubiertas por los datos de entrenamiento, donde la extrapolación puede introducir sesgos.

6.1.2. Relación con la calibración clásica (PEST++/pyEMU)

La calibración con `PEST++/pyEMU` se plantea como un problema de estimación de parámetros, donde se ajustan parámetros hidrogeológicos para minimizar una función objetivo basada en residuales entre datos observados y datos simulados del modelo físico. Su principal ventaja es que el proceso de ajuste está anclado directamente al simulador MODFLOW

6 y puede explotar información de sensibilidad (Jacobiano) para guiar actualizaciones eficientes y evaluar identifiabilidad, correlación entre parámetros e incertidumbre. En este trabajo, el componente de aprendizaje automático no sustituye a `PEST++`; se emplea como un **complemento metodológico** con dos roles:

1. **Aceleración operativa:** El emulador se utiliza para explorar regiones del espacio parámetrico a muy bajo costo computacional, preseleccionar combinaciones prometedoras y realizar pruebas rápidas (por ejemplo, cómo cambia el ajuste al perturbar parámetros clave) antes de invertir tiempo en ejecuciones completas del simulador.

2. **Contraste metodológico:** La calibración asisitida por emulador se compara contra la calibración clásica realizada con `PEST++` en términos de desempeño (RMSE,MAE,bias y patrones espaciales de residuales), consistencia y plausibilidad hidrogeológica de parámetros, no-unicidad (soluciones alternativas con ajuste comparable) y costo computacional (número de ejecuciones de MODFLOW 6 y tiempo total).

Es importante remarcar la diferencia conceptual: `PEST++` ajusta parámetros evaluando MODFLOW 6 en cada iteración, mientras que la calibración asistida por IA, optimiza sobre el emulador y **solo es aceptable** si las soluciones candidatas se **verifican posteriormente** mediante ejecuciones directas del modelo físico, confirmando que el error sustituto no introduce sesgos relevantes en la región óptima.

6.1.3. Objetivos del capitulo de Inteligencia Artificial

El objetivo del presente capítulo es documentar un flujo de trabajo reproducible de calibración asistida por aprendizaje automático para el modelo regional del estado de Yucatán en MODFLOW 6, manteniendo coherencia hidrogeológica, consistencia numérica y la verificación explícita con respecto al simulador físico.

De manera específica, se plantean los siguientes objetivos:

6.1.3.1. Emulador directo (*forward-emulator*)

Construir un emulador capaz de aproximar la respuesta del modelo ante variaciones de un conjunto de parámetros seleccionados, la salida del emulador se define como el vector de

estos parámetros simulados, lo que corresponde a un problema multisalida. Para el entrenamiento se genera un conjunto sintético medinate un diseño de experimentos: se muestrean combinaciones de parámetros dentro de rangos plausibles, se ejecuta MODFLOW 6 para cada muestra y se almacenan las salidas en los puntos de observación. El desempeño del emulador se cuantifica con particiones de entrenamiento y prueba, evaluando su capacidad de generalización en muestras no vistas.

6.1.3.2. Calibración/inversa basada en emulador

Usar el emulador como sustituto rápido dentro de un esquema de búsqueda y optimización para proponer parámetros que reduzcan el desajuste entre los datos observados y simulados. En términos operativos:

- Se define una función objetivo.
- Se busca el vector de parámetros $\boldsymbol{\theta}^*$ que minimiza dicha función objetivo, evaluada en el emulador.
- Se obtiene una solución candidata a la calibración con muy bajo costo computacional.

Este enfoque permite explorar de manera extensa el espacio paramétrico. No obstante, su validez depende de que el emulador sea suficientemente preciso en la región donde se localiza $\boldsymbol{\theta}^*$; por ello, el resultado se considera *candidato* hasta ser verificado con el simulador físico, MODFLOW 6.

6.1.3.3. Comparación con `PEST++` y verificación con MODFLOW 6

El ciclo es cerrado de forma rigurosa: toda solución candidata obtenida con el emulador se verifica mediante una ejecución directa de MODFLOW 6, utilizando exactamente los parámetros propuestos por IA. Con ello se evalúa:

- Desempeño real en el simulador físico (RMSE, MAE, sesgo y residuales);
- Discrepancia (error de sustitución) entre el emulador y MODFLOW 6.
- Consistencia con respecto a la calibración clásica obtenida con `PEST++`.

La comparación con `PEST++` no se limita únicamente al RMSE final: también se analiza la plausibilidad hidrogeológica de los parámetros y la estabilidad numérica del modelo, como evitar configuraciones no físicas o inestables. En conjunto, este capítulo presenta un esquema híbrido donde el emulador se utiliza para acelerar la exploración y proponer soluciones, mientras que MODFLOW 6 permanece como referencia final para validar el ajuste. La sección siguiente introduce la formulación utilizada para entrenar el emulador y los criterios empleados para evaluar generalización y confiabilidad del sustituto.

6.2. Fundamentos y marco conceptual

En esta sección se introducen los conceptos necesarios para integrar el aprendizaje automático en flujos de trabajo de calibración hidrogeológica. Esencialmente se revisan cuatro aspectos principales, la emulación y los modelos sustitutos, la distinción entre el problema directo e inverso, la formulación de la calibración como optimización (con pesos), y finalmente, los criterios de generalización, incertidumbre e identificabilidad, particularmente relevantes en sistemas subterráneos donde el fenómenos de la no-unicidad es común.

En este trabajo, la calibración asistida por aprendizaje automático se apoya en dos pilares fundamentales:

- La formulación clásica del problema inverso (observaciones, residuales, función objetivo y optimización).
- La teoría de modelos predictivos (emulación), donde se requiere evaluar generalización, sobreajuste y límites de extrapolación.

6.2.1. Emulación y modelado sustituto

La emulación (o modelado sustituto), busca aproximar modelos numéricos computacionalmente costosos mediante funciones entrenables de evaluación rápida [Forrester et al., 2008]. En este estudio de modelación hidrogeológica, el simulador numérico MODFLOW 6, puede representarse como un operador no lineal de la siguiente manera:

$$\mathcal{M}: \ \theta \in \mathbb{R}^p \ \mapsto \ \mathbf{y}(\theta) \in \mathbb{R}^n, \tag{6.4}$$

donde θ es el vector de parámetros y $\mathbf{y}(\theta)$ representa el vector de salida; y, en experimentos específicos, métricas asociadas a descarga costera del agua subterránea, esto se comentará en secciones posteriores.

Un emulador aproxima $\mathcal{M}$ por una función $\widehat{\mathcal{M}}$ mucho más económica computacionalmente:

$$\widehat{\mathcal{M}}(\theta) \ \approx \ \mathcal{M}(\theta), \qquad \widehat{\mathcal{M}} : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^n. \tag{6.5}$$

Datos para entrenar el emulador. Para el entrenamiento del emulador $\widehat{\mathcal{M}}$ se genera un conjunto de datos mediante ejecuciones del simulador físico:

$$\mathcal{D} = \{(\theta^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)})\}_{i=1}^{N_s}, \qquad \mathbf{y}^{(i)} = \mathcal{M}(\theta^{(i)}). \tag{6.6}$$

El desempeño del emulador depende principalmente de **la cobertura del espacio paramétrico**, **la consistencia en los resultados simulados de salida** (mismo orden y definición de observaciones), y sobretodo, que **la respuesta del modelo sea suficientemente regular dentro del dominio muestreado**.

6.2.1.1. Emulador adoptado y consideraciones prácticas

En la literatura existen diversas familias de modelos sustitutos (p. ej., modelos lineales regularizados, procesos gaussianos/kriging, ensambles tipo RF/GBM y redes neuronales). Dado que el objetivo de esta tesis no es comparar exhaustivamente emuladores, sino *construir y verificar* un emulador útil para acelerar la calibración, en lo que sigue se describe a detalle únicamente el enfoque empleado: una **red neuronal tipo perceptrón multicapa (Multilayer-Perceptron MLP)** para la regresión multisalida.

La elección de una MLP se justifica porque el problema considerado es multisalida, es decir, se genera un vector de cargas hidráulicas en múltiples puntos de observación y es potencialmente no lineal, además de que el costo de evaluación del emulador es bajo una vez

entrenado. Para asegurar estabilidad y generalización, se adoptaron prácticas estándares, como, el escalamiento/estandarización de entradas y salidas, la partición en conjuntos de datos de entrenamiento-validación-prueba, y la regularización, parada/detenimiento temprana (*early stopping*) y la evaluación con métricas globales y por observación (RMSE, MAE, percentiles). En las subsecciones siguientes se presenta la arquitectura de la MLP, el procedimiento de entrenamiento y el ajuste de hiperparámetros utilizado para seleccionar el modelo final.

Emulación multisalida. Cuando el vector de salida de datos simulados $\mathbf{y}$ es de gran dimensión, usualmente se emplean tres estrategias principales:

1. **Multi-output directo:** un modelo predice todo el vector de salida $\mathbf{y}$, y captura dependencias entre salidas.
2. **Modelo por salida:** entrenar $\widehat{\mathcal{M}}_j(\theta)$ por observación, esta opción es simple, pero costosa y sin correlación entre salidas.
3. **Reducción de dimensión:** Se proyecta $\mathbf{y}$ a un subespacio (PCA/POD) y se emulan los coeficientes latentes.

Diseño de experimentos: cobertura y extrapolación. El emulador es confiable principalmente dentro de la región paramétrica cubierta por el conjunto de datos $\mathcal{D}$ generado. Por ello, se recomiendan muestreos *space-filling* (por ejemplo, LHS) y/o diseños mixtos (global + refinamiento local). En particular, es importante tratar las escalas heterogéneas: por ejemplo, las transformaciones logarítmicas son apropiadas para la conductividad hidráulica K, mientras que multiplicadores o fracciones suelen trabajarse en escala lineal.

6.2.2. Generalización y sobreajuste

La validez del emulador $\widehat{\mathcal{M}}$ depende de su capacidad de generalización. Para cuantificar dicha generalización, el conjunto de datos $\mathcal{D}$ se divide en entrenamiento, validación y prueba. El sobreajuste llega a ocurrir cuando el error en entrenamiento disminuye mientras

el desempeño fuera de muestra no mejora, o empeora. Para mitigarlo, se emplean prácticas como regularización, control de la complejidad y detención temprana *early-stopping*, además de escalamiento consistente de variables.

6.2.3. Incertidumbre e identificabilidad

Aun con un emulador preciso, el sistema puede admitir múltiples parametrizaciones con desempeño comparable. Por ello es necesario discutir tres aspectos principales:

- **No unicidad (equifinalidad):** múltiples parámetros θ con una función objetivo Φ similar.
- **Correlación entre parámetros:** compensación entre procesos, por ejemplo, recarga-K-EVT).
- **Identificabilidad práctica:** un parámetro es identificable si perturbaciones provocadas en él producen cambios distinguibles en el vector de salida, dado el nivel de ruido y el error estructural del modelo.

En la práctica, la identificabilidad se diagnostica con sensibilidad, covarianza/correlación y con el comportamiento respecto a los límites (bounds) establecidos.

6.3. Metodología del problema para el modelo hidrogeológico de Yucatán

En esta sección se formaliza el problema de calibración asistida por aprendizaje automático para el modelo hidrogeológico regional del estado de Yucatán. En particular, se definen de manera explícita:

- El modelo numérico base.
- El vector de parámetros ajustables (grados de libertad del problema inverso).
- El conjunto de observaciones, la definición de residuales y la función objetivo.

Esta formulación asegura trazabilidad entre la calibración clásica basada en ejecuciones directas de MODFLOW 6, la emulación mediante modelos sustitutos, y la verificación final de soluciones candidatas por medio del simulador físico.

6.3.1. Contexto del modelo numérico

El modelo regional de flujo de agua subterránea en estado estacionario se implementó en MODFLOW 6 utilizando FloPy como interfaz para la construcción, ejecución y post-procesamiento. La discretización espacial se realizó con una malla no-estructurada (DISU), la malla *quadtree*, seleccionada por su capacidad de **refinamiento local** en zonas de interés (anillo de cenotes, zona elevada y costera), manteniendo un costo computacional controlado a escala regional. El dominio se representó con **dos capas** (somera y profunda), con un número total de celdas del orden de 10^5, suficiente para reproducir los gradientes regionales dominantes, así como los contrastes espaciales asociados a la heterogeneidad efectiva de este complejo sistema kárstico. Este modelo se adoptó como plataforma común para:

- La calibración automática y el diagnóstico de sensibilidad.
- La generación sistemática de ejecuciones del modelo para construir el conjunto de datos de entrenamiento para el emulador.

Las simulaciones se plantean coherentes con respecto al objetivo metodológico de esta etapa: capturar la estructura espacial regional de la superficie de carga hidráulica y su respuesta a variación en los parámetros, evitando complejidades transitorias que requerirían series temporales densas y condiciones históricas con más detalle.

6.3.2. Zonas de refinamiento

Con base en el marco conceptual hidrogeológico, el dominio se dividió en **zonas hidrogeológicas** de comportamiento contrastante, representadas mediante parámetros efectivos por región. Se consideraron cuatro zonas de refinamiento:

1. **Zona elevada (upland):** asociada a la región elevada del suroeste (Sierra de Ticul), donde se espera una respuesta diferenciada en gradiente regional y, potencialmente, en recarga efectiva.

2. **Anillo de cenotes (ring):** zona de transición hidrogeológica/estructural con mayor conectividad kárstica, que influye en la redistribución del flujo y en la descarga hacia la zona de la costa.

3. **Resto de la región (rest):** representa el dominio fuera de las zonas anteriores, la zona plana, interpretado como un comportamiento promedio a escala estatal.

4. **Zona costera:** representa la franja de la costa, la cual es considerada como una región de carga hidráulica constante y somera, debido a que es esta región es considerada como confinada, a diferencia del resto del dominio, en la capa 1 (Perry et al. [1989]).

Esta zonificación constituye una estrategia estándar y defendible a escala regional: en lugar de representar explícitamente conductos kársticos, se permite que el modelo ajuste **propiedades efectivas por zona**, manteniendo interpretabilidad hidrogeológica y control de complejidad paramétrica.

6.3.3. Parámetros de calibración considerados

La calibración asistida por IA se formula como un problema de ajuste paramétrico equivalente al empleado en la calibración clásica. Se define un vector de parámetros θ que controla procesos dominantes del balance hidrogeológico regional: transmisión (conductividad hidráulica), entradas (recarga) y pérdidas (evapotranspiración), además de restricciones externas (SGD) incorporadas como grupo de observación.

En este trabajo, los parámetros ajustables se implementan de igual manera que como se definió en el Capitulo 3, como **multiplicadores adimensionales** sobre campos base. Por convención, el prefijo **m** en un parámetro (p. ej., mK, mR, $mFGW$) indica un **factor multiplicativo** aplicado a una variable base espacialmente distribuida, de modo que el ajuste ocurre preservando la estructura espacial base y modificando su magnitud efectiva.

6.3.3.1. Conductividad hidráulica zonal por capa (K)

La conductividad hidráulica se representa mediante valores efectivos por zona y por capa, aplicados como multiplicadores sobre su campo base $K_0(x)$:

$$K(x) = m_K(\text{zona,capa})\, K_0(x), \tag{6.7}$$

donde m_K es adimensional. Esta formulación permite ajustar contrastes regionales entre zona elevada (*upland*), anillo de cenotes (*ring*) y resto del dominio (*rest*), distinguiendo además entre capa somera y la capa profunda (capa 1 y 2, respectivamente).

6.3.3.2. Recarga meteórica efectiva (RCH) por zona

La recarga se modela como recarga meteórica efectiva a partir de su campo base $R_0(x)$ y se ajusta con multiplicadores por zona:

$$R(x) = m_R(\text{zona})\, R_0(x). \tag{6.8}$$

Al igual que se hizo en en Capitulo 3, la recarga se zonifico en:

- mR_{upland}: multiplicador para la zona elevada,
- mR_{rest}: multiplicador para el resto del dominio.

Esto permite corregir sesgos regionales asociados a la incertidumbre en las entradas (recarga), reduciendo compensaciones no físicas únicamente vía cambios en la conductividad hidráulica K.

6.3.3.3. Evapotranspiración (EVT) mediante fracción de agua subterránea (FGW)

De igual forma que en el Capitulo 3, la extracción por evapotranspiración se representa con el paquete EVT de MODFLOW 6, en el cual se prescribe una tasa máxima en superficie que se atenúa conforme la carga hidráulica desciende hasta una profundidad de extinción. En este trabajo, el campo base $EVT_0(x)$ se obtiene a partir de ET_0 (demanda atmosférica)

y se interpreta como una tasa máxima potencial (4.2.1). Para representar que solo una fracción de dicha demanda es satisfecha por el acuífero, se introduce el parámetro **FGW** (*fraction of groundwater*), implementado como un multiplicador adimensional:

$$EVT_{\text{rate}}(x) = mFGW(\text{zona})\, EVT_0(x). \tag{6.9}$$

Aquí $mFGW$ es un **multiplicador** (prefijo m) que escala la fracción efectiva de extracción desde el acuífero, sin alterar la forma espacial base de $EVT_0(x)$.

De manera consistente con la zonificación regional, se considera:

- $mFGW_{\text{upland}}$,
- $mFGW_{\text{rest}}$.

Esta parametrización permite modular pérdidas regionales por evapotranspiración, evitando que el modelo compense sesgos sistemáticos mediante ajustes artificiales en la conductividad o en la recarga.

6.3.3.4. Restricción costera basada en SGD (grupo de observación)

De forma complementaria, se incorpora información indirecta sobre descarga de agua subterránea al mar (*submarine groundwater discharge*, SGD) como **grupo adicional de observaciones**. En este esquema, SGD no introduce parámetros nuevos: se utiliza como una restricción externa que penaliza soluciones con descarga costera no plausible, sin modificar la formulación física del modelo. Operativamente, la descarga simulada se calcula a partir del flujo neto hacia celdas costeras asociadas a la frontera tipo CHD y se resume por segmentos a lo largo de la costa (ver Sección 4.3.3). Las observaciones de SGD se normalizan y ponderan para mantener consistencia de escala con el grupo `head`. En el régimen balanceado, SGD funciona como una *restricción suave*: contribuye a la función objetivo y mejora plausibilidad costera sin dominar el ajuste de cargas hidráulicas.

6.3.4. Generación de datos para aprendizaje automático

El emulador se entrenó con un conjunto de datos supervisado generado a partir de las ejecuciones del simulador físico numérico MODFLOW 6 del caso de referencia (Caso D, malla *quadtree* 4). Para ello se muestreó el espacio paramétrico mediante esquemas de tipo *Latin Hypercube Sampling* (LHS), que permiten una cobertura más uniforme del dominio que el muestreo aleatorio simple [McKay et al., 1979].

El objetivo de esta etapa fue construir un conjunto de datos:

$$\mathcal{D} = \{(\theta^{(i)}, \mathbf{h}^{(i)})\}_{i=1}^{N_s}, \qquad \mathbf{h}^{(i)} = \mathcal{M}(\theta^{(i)}), \tag{6.10}$$

donde $\theta^{(i)} \in \mathbb{R}^p$ representa los parámetros (multiplicadores) y $\mathbf{h}^{(i)} \in \mathbb{R}^{135}$ es el vector de cargas hidráulicas simuladas en las ubicaciones observadas.

6.3.4.1. Definición del espacio de parámetros

El vector θ coincide con la parametrización descrita en la Sección 6.3.3: multiplicadores adimensionales para K por zona/capa, recarga por zona y fracción de agua subterránea (FGW) por zona. Esta formulación mantiene la interpretabilidad de parámetros efectivos por región, facilita el muestreo y la estabilidad numérica durante las ejecuciones masivas de MODFLOW 6.

Los parámetros se muestrearon dentro de cotas físicamente plausibles, consistentes con órdenes de magnitud esperados en el modelo regional kárstico de Yucatán González-Herrera et al. [2002], Gondwe et al. [2010], Marín et al. [2000]. En particular:

- **Multiplicadores de la conductividad hidráulica K:** se parametrizaron en escala logarítmica debido a que K puede variar por órdenes de magnitud.
- **Multiplicadores de recarga y de FGW:** se acotaron para mantener coherencia con rangos razonables de infiltración efectiva y fracción de extracción por evapotranspiración.

Además de evitar soluciones no físicas, estas cotas mejoran la eficiencia del muestreo

al excluir regiones donde el modelo tiende a volverse numéricamente inestable o hidrogeológicamente inverosímil.

6.3.4.2. Diseño de muestreo y construcción del conjunto $\mathcal{D}$

Para el diseño del muestreo, se generó una matriz de diseño de la siguiente forma:

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N_s \times p}, \tag{6.11}$$

donde cada fila corresponde a un vector de parámetros $\theta^{(i)}$. Para cada muestra, se ejecutó MODFLOW 6 y se extrajo el vector de cargas hidráulicas simuladas resultante en los 135 puntos de observación, formando:

$$\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N_s \times 135}. \tag{6.12}$$

6.3.4.3. Muestreo tipo LHS y punto ancla (*baseline*)

El muestreo LHS se complementó con un punto ancla (baseline) asociado al modelo de referencia (multiplicadores iguales a 1, o equivalentes), con el fin de:

- garantizar que el conjunto incluya explícitamente el caso base,
- facilitar controles de reproducibilidad (verificación de métricas del baseline),
- estabilizar la emulación en la vecindad del régimen de interés.

Controles de reproducibilidad (sanidad) del baseline. El punto ancla se ejecutó también como verificación mínima del flujo de trabajo. En particular, se comprobó que: (i) el solucionador converge sin divergencias; (ii) el cierre del balance hídrico se mantiene dentro de una tolerancia aceptable; (iii) las cargas simuladas en los puntos de observación son valores finitos (sin HNOFLO/valores centinela); (iv) el conjunto de salidas generado por el *runner* (archivos de cabezas y tabla de observaciones) conserva el mismo orden e identificadores; y (v) las métricas globales del baseline (RMSE, MAE y sesgo, y/o $\sqrt{\Phi/n}$) reproducen las reportadas para el modelo base. Estas verificaciones permiten detectar errores de implementación antes de generar el conjunto de entrenamiento del emulador.

6.3.4.4. Ejecución masiva de MODFLOW 6 y extracción de vector de salida

Cada muestra $\theta^{(i)}$ se evaluó mediante una ejecución completa de MODFLOW 6 del caso de referencia. De cada ejecución se extrajo el vector de cargas hidráulicas simuladas en las ubicaciones de los puntos de observación, asegurando:

- orden consistente de identificadores de observación,
- registro/filtrado de valores inválidos.
- trazabilidad entre carpeta de ejecución, $\theta^{(i)}$ y $\mathbf{h}^{(i)}$.

Antes del entrenamiento se aplicaron verificaciones mínimas:

- confirmación de que las N_s ejecuciones concluyeron correctamente,
- detección de valores de salidas inválidas y descarte de realizaciones contaminadas,
- inspección de la distribución del desempeño (RMSE por ejecución: mínimo, percentiles, máximo),
- verificación de que el *baseline* reproduce el ajuste esperado.

Este paso es crítico; un emulador entrenado con datos de salidas erróneas, tiende a fallar o a producir óptimos artificiales durante la inversión.

6.3.5. Entrenamiento del emulador directo (*forward emulator*)

6.3.5.1. Arquitectura del emulador directo e implementación

El emulador directo se implementó como una red neuronal tipo perceptrón multicapa (MLP) multisalida, entrenada para aproximar el mapeo $\widehat{\mathcal{M}} : \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^9 \mapsto \widehat{\mathbf{h}} \in \mathbb{R}^{135}$, donde $\boldsymbol{\theta}$ es el vector de parámetros (multiplicadores) y $\widehat{\mathbf{h}}$ son las cargas simuladas en las $n = 135$ observaciones. Las entradas consideradas fueron los multiplicadores de los parámetros anteriormente mencionados. La red MLP utilizada consta de dos capas ocultas con 256 neuronas cada una (`hidden_layer_sizes=(256,256)`), activación ReLU y salida lineal de 135 neuronas (una por observación). El entrenamiento se realizó con el optimizador Adam,

regularización L2 ($\alpha = 10^{-4}$) y tasa de aprendizaje inicial 10^{-3}, con un máximo de 8000 iteraciones.

Para estabilizar el entrenamiento se aplicó estandarización (*z-score*) tanto a entradas como a salidas usando únicamente el conjunto de entrenamiento. El conjunto de datos se dividió aleatoriamente en entrenamiento y prueba (80/20, semilla fija), y se utilizó *early stopping* (paciencia de 40 iteraciones sin mejora) para evitar sobreajuste. El desempeño del emulador se reportó en unidades físicas (m s.n.m.) revirtiendo la estandarización de la salida y calculando RMSE global y RMSE por observación. La Tabla 6.1 resume los hiperparámetros definidos para el emulador.

Tabla 6.1: Hiperparámetros del emulador directo (MLP multisalida) utilizado en este estudio.

Componente	**Configuración**
Entradas	$p = 9$ parámetros (multiplicadores zonales)
Salidas	$n = 135$ cargas hidráulicas en puntos de observación
Tipo de modelo	MLP multisalida (`MLPRegressor`)
Capas ocultas	2
Neuronas por capa	256, 256
Función de activación	ReLU
Salida	Lineal (135 neuronas)
Función de pérdida	MSE multisalida (cuadrática)
Optimizador	Adam
α (regularización L2)	1×10^{-4}
Tasa de aprendizaje inicial	1×10^{-3}
Iteraciones máximas	8000
Early stopping	Sí (`early_stopping=True`)
Paciencia (`n_iter_no_change`)	40
Partición train/test	80/20 (`test_size=0.2`)
Semilla	7 (`random_state=7`)
Preprocesamiento	`StandardScaler` en X y Y (train)

6.3.5.2. Formulación del problema multisalida

A continuación se describe la formulación del problema multisalida, el emulador aproxima el mapeo directo:

$$\widehat{\mathcal{M}} : \ \theta \mapsto \widehat{\mathbf{h}} \in \mathbb{R}^{135}. \tag{6.13}$$

El entrenamiento se planteó como regresión supervisada multisalida, minimizando el error cuadrático medio:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N_{\text{train}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{train}}} \left\| \widehat{\mathbf{h}}^{(i)} - \mathbf{h}^{(i)} \right\|_2^2, \tag{6.14}$$

donde $\widehat{\mathbf{h}}^{(i)} = \widehat{\mathcal{M}}(\theta^{(i)})$.

El conjunto $\mathcal{D}$ se dividió en subconjuntos de entrenamiento, validación y prueba. Se empleó un criterio de detención temprana (*early stopping*) para evitar el sobreajuste, deteniendo el entrenamiento cuando la métrica en validación dejó de mejorar de forma sostenida.

Como métricas de habilidad del emulador se reportan:

- RMSE global en el conjunto de datos de prueba.
- Distribución del RMSE por observación (mediana y percentil 95), para identificar si el emulador es uniforme o falla sistemáticamente en pozos específicos.

6.3.6. Calibración acelerada basada en el emulador (problema inverso)

Dado que evaluar el simulador físico $\mathcal{M}(\theta)$ repetidamente es costoso, la búsqueda de parámetros se realiza sobre el emulador. Se define una función objetivo aproximada:

$$\widehat{\Phi}(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \left(w_i \left[h_i^{\text{obs}} - \widehat{h}_i(\theta) \right] \right)^2, \tag{6.15}$$

y se busca:

$$\theta^* = \arg\min_{\theta \in \Omega} \ \widehat{\Phi}(\theta), \tag{6.16}$$

donde Ω es el dominio acotado por los límites establecidos *bounds*.

Se empleó un optimizador global de tipo evolutivo (Differential Evolution) [Storn and Price, 1997], el cual es adecuado para este caso de estudio:

- Funciones objetivo no convexas y con múltiples mínimos locales,

- Espacios paramétricos acotados,
- Ausencia de gradientes confiables.

6.3.6.1. Experimentos con y sin prior (regularización tipo PEST++)

Se consideraron dos esquemas:

1. **Sin prior:** optimización pura sobre $\widehat{\Phi}(\theta)$.
2. **Con prior (regularización):** se agrega un término que penaliza desviaciones grandes respecto a un valor preferente θ_0 (típicamente multiplicadores cercanos a 1), análogo a regularización tipo Tikhonov/PEST++:

$$J(\theta) = \widehat{\Phi}(\theta) + \lambda\,\Pi(\theta), \tag{6.17}$$

donde $\Pi(\theta)$ representa una penalización (por ejemplo, en el espacio logarítmico para multiplicadores de K, y cuadrática para multiplicadores de recarga/FGW). Se exploraron distintos niveles de λ (débil=0.01, moderado=0.1 y alto=1.0) para comparar el compromiso del ajuste-conservadurismo.

6.3.7. Verificación final con MODFLOW 6

Toda solución candidata obtenida con el emulador debe y fue verificado con el simulador físico ([Oreskes et al., 1994]). El procedimiento fue el siguiente:

1. tomar θ^* (óptimo del emulador),
2. ejecución de MODFLOW 6 aplicando exactamente esos parámetros,
3. calculó del RMSE y Φ sobre las 135 observaciones (y métricas complementarias).

Esta verificación cuantifica el *error de sustitución*, es decir, la diferencia del emulador vs. el simulador y permite confirmar que el óptimo encontrado no es un artefacto del modelo sustituto, sino una solución con desempeño real dentro de MODFLOW 6.

6.4. Resultados, comparación y discusión

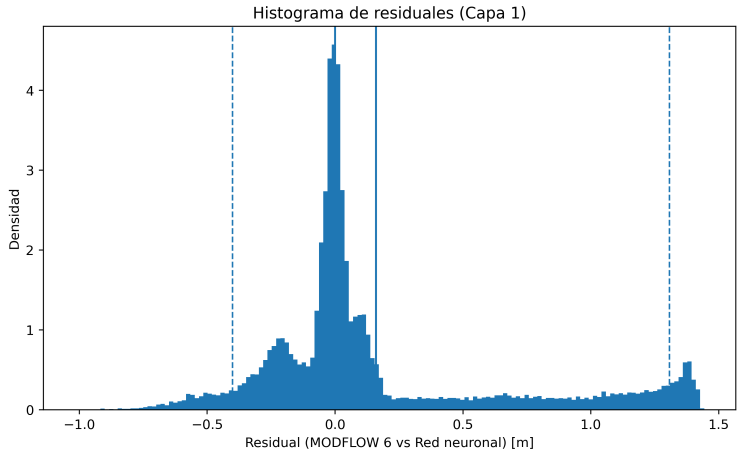
Relación entre muestreo masivo y entrenamiento del emulador. El conjunto de 1000 ejecuciones exitosas de MODFLOW 6 se utilizó para construir el dataset de aprendizaje supervisado del emulador directo. Cada ejecución j define un par $(\boldsymbol{\theta}_j, \mathbf{h}_j)$, donde $\boldsymbol{\theta}_j \in \mathbb{R}^9$ es el vector de parámetros (multiplicadores zonales) y $\mathbf{h}_j \in \mathbb{R}^{135}$ es el vector de cargas simuladas extraídas en las 135 ubicaciones de observación. El emulador aprende el mapeo $\widehat{\mathcal{M}} : \boldsymbol{\theta} \mapsto \widehat{\mathbf{h}}$, por lo que puede emular simulaciones con distintos valores de conductividad, recarga y evapotranspiración dentro de los rangos muestreados. El punto ancla (baseline) se incluye explícitamente como control de reproducibilidad del pipeline y como referencia para comparar el desempeño relativo de las ejecuciones. El resumen estadístico de RMSE en unidades de metros para las 1000 ejecuciones es:

- **mínimo**: 0.8449
- **percentil 10**: 0.8734
- **mediana**: 0.9390
- **percentil 90**: 1.4818
- **máximo**: 4.8697

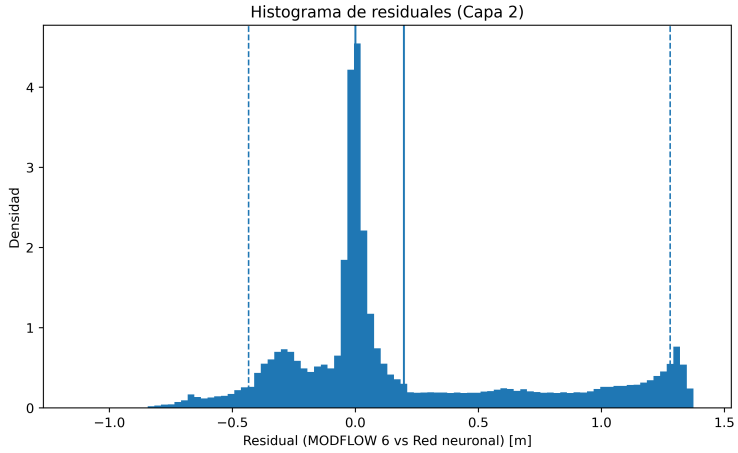
La ejecución base (`run_00000`) presentó un RMSE = 0.8724 [m]. Del total de 1000 ejecuciones, **89** obtuvieron un valor de RMSE menor que la ejecución base, lo cual cuantifica dos cosas:

1. El grado de variabilidad del ajuste bajo cambios razonables en los parámetros.
2. La presencia de regiones del espacio parámetrico con mejoras reales respecto al caso base de referencia (ejecución base).

La Figura 6.1 muestra los histogramas de residuales por capa entre el emulador neuronal y MODFLOW 6.



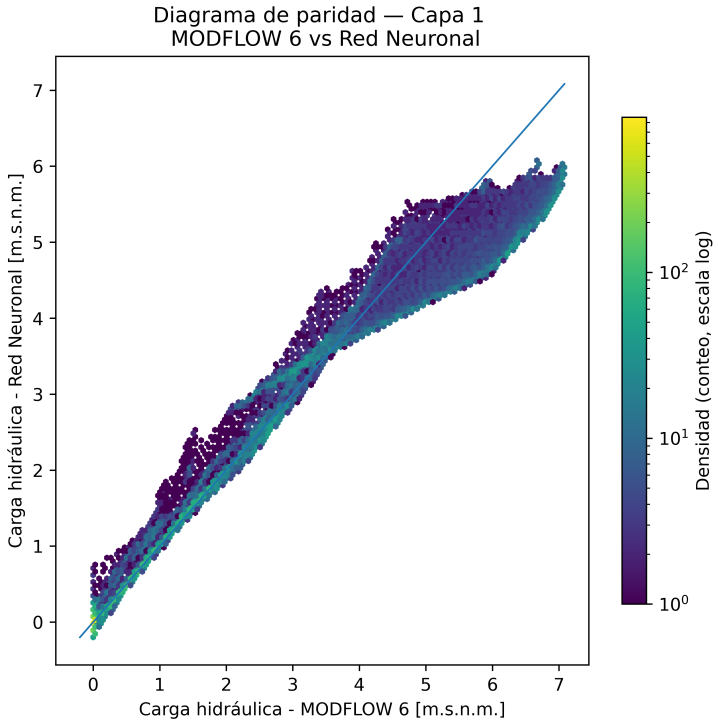
((a)) Histograma de residuales ($e = h_{\mathrm{MF6}} - \hat{h}$) de la capa 1; concentra la mayor parte de la masa cerca de cero con colas que representan errores locales. Se usa para distinguir sesgo, dispersión y presencia de colas pesadas.



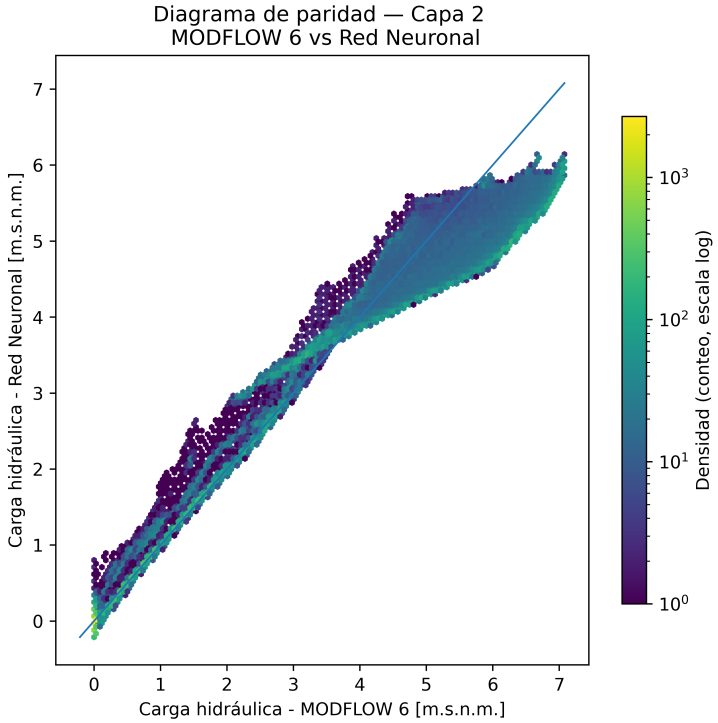
((b)) Histograma de la capa 2, análogo al de la capa 1; permite comparar dispersión y asimetrías entre ambas capas bajo la misma estrategia de entrenamiento y partición espacial.

Figura 6.1: Histogramas de residuales entre el emulador neuronal y MODFLOW 6, por capas 1 y 2.

A manera de complemento. la Figura 6.2 muestra los diagramas de paridad de MODFLOW 6 vs Red Neuronal en las capas 1 y 2, respectivamente. Estos mapas representan la comparación punto a punto entre la carga "verdadera"sintética de MODFLOW 6 y la predicción del emulador neuronal. La línea 1:1 representa una predicción perfecta; desviaciones sistemáticas sugieren sesgos o saturación del emulador en ciertos rangos de campo



((a)) Diagrama de paridad MODFLOW 6 vs Red neuronal, capa 1.



((b)) Diagrama de paridad MODFLOW 6 vs Red neuronal, capa 2.

Figura 6.2: Diagramas de paridad MF6 vs RN, empleados para evaluar la fidelidad global del emulador y detectar regiones/rangos donde la relación se aparta de la proporción 1:1.

6.4.0.1. Mejor ejecución del muestreo y diagnóstico inicial

La mejor ejecución del muestreo (diagnóstico previo al emulador) fue `run_00947` con RMSE = 0.8449 [m]. En términos conceptuales, esta ejecución presenta el mejor resultado alcanzable *sin optimización explícita*, únicamente por exploración del espacio paramétrico dentro los límites físicos establecidos.

6.4.0.2. Emulador directo y su precisión (error de aproximación)

El emulador directo se entrenó para aproximar la transformación:

$$\boldsymbol{\theta} \longmapsto \widehat{\mathbf{h}}(\boldsymbol{\theta}),$$

donde $\boldsymbol{\theta}$ es el vector de multiplicadores (parámetros) y $\widehat{\mathbf{h}}$ son las cargas hidráulicas predichas en los puntos de observación. El entrenamiento incorporó validación y early-stopping para evitar sobreajuste. En el conjunto de prueba del emulador se obtuvo un error global del orden de centímetros:

- **RMSE del emulador (prueba)** ≈ 0.0497 m
- **RMSE mediana por observación** ≈ 0.0385 m
- **percentil 95 del RMSE por observación** ≈ 0.0930 m

Esto es relevante porque el error del emulador queda muy por debajo del RMSE típico del modelo numérico (del orden de 0.85-0.95 [m]), por lo que su uso como sustituto para la optimización global es consistente: el error dominante no es el del emulador, sino el de la estructura/parametrización del modelo físico y/o la información disponible en las observaciones.

6.4.0.3. Calibración basada en el emulador (inversa) y efecto del prior

La calibración acelerada se resolvió sobre el emulador mediante un optimizador global (Differential Evolution), minimizando una función objetivo basada en residuales ponderados. Se evaluarón tres configuraciones de prior, sin prior, débil, moderado y alto

($\lambda = 0.01, 0.1$ y 1, respectivamente). En los tres casos, la verificación posterior con MODFLOW 6 arrojó prácticamente el mismo desempeño, se obtuvieron diferencias despreciables a la tercera cifra decimal. En otras palabras: *para este problema, el prior en ese rango no cambia el óptimo verificable con MODFLOW 6*. Esto no es 'malo'; refleja que:

1. el mínimo encontrado ya está en una región compatible con el prior,
2. la señal de datos domina esa regularización leve,
3. o que la solución está controlada por límites/bounds e identificabilidad.

La Tabla 6.2 resume los resultados de la calibracion con los diferentes valores de prior.

Tabla 6.2: Resumen de desempeño: línea base, mejor corrida del muestreo y calibración basada en emulador (verificada con MODFLOW 6).

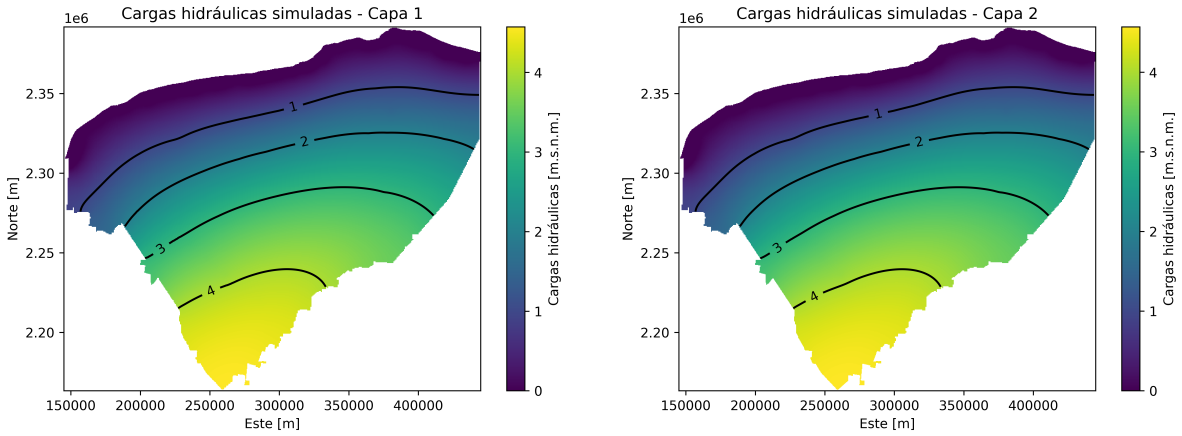
Caso	**RMSE (m)**	$\boldsymbol{\Phi = \sum(\mathbf{w}\boldsymbol{r})^2}$	$\boldsymbol{\sqrt{\Phi/N}}$	$\boldsymbol{\sqrt{\Phi/\sum \mathbf{w}^2}}$ (m)
Ejecución base (`run_00000`)	0.8724	56.7440	0.6483	1.1020
Mejor muestreo (`run_00947`)	0.8449	53.5580	0.6299	1.0708
Emulador → MF6 (sin prior)	0.8438	53.8977	0.6319	1.0742
Emulador → MF6 (prior 0.01)	0.8438	53.8976	0.6319	1.0742
Emulador → MF6 (prior 0.1)	0.8441	53.9149	0.6320	1.0743

La Tabla 6.3 reporta los valores del vector de parámetros calibrados $\boldsymbol{\theta}^*$ obtenidos con la inversión basada en el emulador (y verificados con MODFLOW 6). Se muestra solo la variante sin prior (sin regularización) debido a que presenta un RMSE muy similar a las variantes con prior.

Tabla 6.3: Parámetros calibrados $\boldsymbol{\theta}^*$ (emulador → verificación con MODFLOW 6).

Parámetro	**Sin prior**
$k_{\text{upland}_{l1}}$	0.00052
$k_{\text{upland}_{l2}}$	0.00029
$k_{\text{ring}_{l1}}$	0.06003
$k_{\text{ring}_{l2}}$	0.49800
$k_{\text{rest}_{l1}}$	0.00188
$k_{\text{rest}_{l2}}$	0.18764
r_{upland}	0.05341
r_{rest}	0.48951
fgw_{upland}	0.29999
fgw_{rest}	0.49867

La Figura 6.3 muestra la superficie de carga hidráulica simulada por MODFLOW 6 utilizando el vector $\boldsymbol{\theta}^*$ obtenido con la inversión basada en el emulador. Esta figura se presenta con el mismo estilo y rango de visualización que en capítulos anteriores, para permitir comparación directa con la ejecución base y con los modelos calibrados mediante PEST++.



((a)) Capa 1.

((b)) Capa 2.

Figura 6.3: Cargas hidráulicas simuladas (MODFLOW 6) usando los parámetros calibrados por el emulador ($\boldsymbol{\theta}$).

6.4.0.4. Verificación final con MF6 (criterio definitivo)

La verificación con el modelo numérico (ejecución real"MF6) confirmó que la solución calibrada por el emulador es consistente al regresar al simulador físico. Para los tres casos de prior, se obtuvo:

- RMSE ≈ 0.8438 [m]
- $Phi = \sum(w_i r_i)^2 \approx 53.90$
- WRMSE (definición basada en Φ) $\sqrt{\Phi/N} \approx 0.632$
- WRMSE con unidades (ponderación tipo varianza inversa) $\sqrt{\Phi/\sum w_i^2} \approx 1.074$ [m]

Respecto a la ejecución base (RMSE $= 0.8724$ [m]; $\Phi = 56.744$), la mejora es modesta pero consistente, y lo más importante: se obtiene mediante un flujo reproducible, automático y escalable.

6.4.0.5. Análisis de residuales: observaciones dominantes en la función objetivo

El desglose de contribuciones a Φ mostró un comportamiento típico en calibración ponderada: un subconjunto pequeño de observaciones domina la función objetivo. En el caso base, dos pozos concentran aproximadamente **48.8 %** de Φ, Tabla 6.4. En el caso del mejor muestreo, el porcentaje de contribución a Φ de estos dos pozos se muestra en la Tabla 6.5.

Variable	Φ	Φ_i	**Porcentaje de Φ**
4C_VISTA_HERMOSA	53.55	14.52	$\sim$25.59 %
4B_MOCTEZUMA	53.55	13.17	$\sim$23.21 %

Tabla 6.4: Valor de Φ obtenido, y valor de Φ de cada estación asi como su porcentaje de contribución al valor de Φ, del muestreo base (run_00000)

.

Variable	Φ	Φ_i	**Porcentaje de Φ**
4C_VISTA_HERMOSA	56.74	14.52	$\sim$25.77 %
4B_MOCTEZUMA	56.74	13.17	$\sim$23.97 %

Tabla 6.5: Valor de Φ obtenido, y valor de Φ de cada estación asi como su porcentaje de contribución al valor de Φ, del mejor muestreo (run_00947)

.

Incluso tras mejorar el ajuste global, estas observaciones continúan dominando la métrica. Este resultado sugiere que el modelo podría requerir grados de libertad adicionales, como una zonificación más rica en recarga o evapotranspiración, presencia de heterogeneidad local o estructural, o simplemente que estas observaciones representan condiciones locales difíciles de capturar con la parametrización actual.

6.4.1. Síntesis

En conjunto, el flujo de trabajo propuesto —muestreo masivo del modelo base, entrenamiento del emulador directo multisalida, calibración inversa acelerada y verificación final con MODFLOW 6— muestra que la calibración asistida por aprendizaje automático puede integrarse de forma consistente al marco hidrogeológico del presente estudio. El resultado central no es únicamente la reducción del costo computacional, sino la posibilidad

de explorar el espacio paramétrico con mayor amplitud, identificar soluciones candidatas y conservar como criterio definitivo la corroboración con el simulador físico.

6.5. Conclusiones del capitulo y trabajo futuro

Mediante el uso de aprendizaje automático se obtuvieron resultados que muestran que esta herramienta puede apoyar de manera viable la calibración en hidrogeología computacional cuando:

- existe capacidad de generar un conjunto de datos sintético con el modelo numérico base,
- se entrena y evalúa el emulador dentro del dominio paramétrico efectivamente muestreado, y
- toda solución candidata obtenida con el emulador se verifica nuevamente con el simulador físico.

En este trabajo, el emulador directo reprodujo con buena precisión la respuesta del modelo en los puntos de observación y permitió ejecutar una calibración inversa acelerada, cuya solución final fue corroborada con MODFLOW 6. Por ello, el aporte principal del capítulo consiste en demostrar que el enfoque de calibración asistida por emulador es metodológicamente consistente, computacionalmente eficiente y compatible con la lógica de validación física del modelo hidrogeológico regional.

Como trabajo futuro, resulta conveniente: (a) enriquecer la parametrización hidrogeológica, especialmente en recarga y evapotranspiración, para representar mejor la heterogeneidad efectiva del sistema; (b) explorar esquemas de regularización más informativos y sensibles a la estructura del problema inverso; y (c) ampliar el conjunto de entrenamiento con diseños adaptativos o iterativos que refuercen las regiones del espacio paramétrico donde el emulador muestre mayor incertidumbre o donde persistan observaciones dominantes en la función objetivo.

Capítulo 7

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

7.1. Conclusiones generales

1. Se desarrolló un **modelo numérico estacionario de flujo de agua subterránea** para el acuífero kárstico de Yucatán empleando MODFLOW 6 con FloPy, capaz de reproducir el patrón regional de cargas hidráulicas y las direcciones dominantes de flujo bajo un marco conceptual consistente con las principales unidades y zonas hidrogeológicas del estado (zona elevada, anillo de cenotes y el resto del dominio). Con ello se cumple el objetivo general de la tesis: **simular el comportamiento regional del sistema bajo distintos escenarios de parametrización y conceptualización**.

2. La solución numérica mostró estabilidad y consistencia para todas las combinaciones de malla×caso evaluadas, con convergencia del solucionador (IMS) y cierre de balance de masa dentro de tolerancias estrictas (errores menores al orden de 0.01 %), lo que respalda el hecho de que las comparaciones hidrogeológicas se sustentan en soluciones numéricas confiables y no en artefactos de convergencia.

3. La comparación entre discretizaciones (estructurada, triangular, Voronoi y quadtree) mostró una independencia práctica de discretización para el comportamiento regional

dominante: las diferencias entre mallas no alteran el patrón general de cargas y flujo, y se concentran en regiones donde es esperable mayor sensibilidad geométrica (frontera costera, zonas de refinamiento y regiones con gradientes fuertes).

4. La zonificación conceptual (casos A–D) confirmó que los contrastes de conductividad y la forma de forzar el sistema (RCH/EVT) controlan el campo regional de cargas de manera coherente con el marco conceptual. Los cambios conceptuales se reflejan en gradientes y direcciones de flujo como se esperaría, lo cual aporta consistencia hidrogeológica y fortalece la interpretación física del modelo.

5. La calibración automática con PEST++ (pestpp-glm) sobre la malla quadtree como referencia logró un ajuste consistente con el conjunto piezométrico disponible (N=135), con métricas del orden submétrico (RMSE $\sim$ 0.8–0.9 [m], dependiendo del caso y de la formulación). Este nivel de ajuste es compatible con la escala regional del modelo y la complejidad del medio kárstico, donde la heterogeneidad local no se representa explícitamente.

6. Los resultados de sensibilidad (local y global) mostraron un patrón robusto: cuando el conjunto observacional está dominado por cargas someras, el problema inverso queda controlado principalmente por parámetros que gobiernan el balance hídrico regional y la transmisividad efectiva a gran escala. En este trabajo, los parámetros dominantes se concentraron en el multiplicador de recarga del "rest" y la conductividad efectiva en capa profunda del "rest", mientras que parámetros del anillo de cenotes o de zonas específicas tienden a presentar influencia secundaria bajo la parametrización actual.

7. La incorporación de SGD como restricción adicional opera como un mecanismo de plausibilidad costera, pero su contribución al objetivo depende críticamente de su definición, normalización e incertidumbre asignada. En régimen balanceado, la señal de SGD funciona como filtro físico complementario y no como objetivo dominante; forzar a SGD a dominar implica un *trade-off*: mejorar el ajuste costero puede degradar el ajuste de cabezas si el esquema de frontera o el marco conceptual no son plenamente compatibles.

8. El componente de IA se incorporó como **herramienta complementaria** y no como sustituto del simulador físico. Su principal contribución fue **operativa y metodológica**: (i) automatizar el muestreo y la ejecución masiva del modelo de referencia, (ii) entrenar un emulador directo para aproximar rápidamente la respuesta del modelo en los puntos de observación, y (iii) formular una calibración inversa asistida por emulador, cuya solución candidata fue **verificada posteriormente con MODFLOW 6**. En consecuencia, la IA se interpreta como apoyo para acelerar la exploración paramétrica y contrastar estrategias de ajuste, manteniendo siempre al simulador físico como referencia final de validez.

7.2. Conclusiones específicas por componente

Discretización y robustez numérica: La elección de la malla quadtree (DISU) como malla de referencia permitió representar refinamientos espaciales relevantes con eficiencia computacional y mantener consistencia numérica. La similitud de métricas y patrones de flujo entre discretizaciones sugiere que las conclusiones hidrogeológicas principales no dependen de la malla, y que el modelo puede utilizarse con confianza razonable como herramienta regional para describir el campo de cargas y la dirección del flujo, en concordancia con el marco conceptual.

Escenarios conceptuales A-D Los casos A–D mostraron que la zonificación de conductividad (upland, anillo de cenotes, resto del dominio) y el forzamiento (RCH/EVT) controlan el patrón regional de gradientes de forma coherente. En particular, los contrastes en la zona elevada y el anillo afectan gradientes localizados y el detalle regional, mientras que el ajuste global suele estar dominado por el resto del dominio cuando el conjunto de observaciones es mayormente somero. Esto es una conclusión importante: el modelo es sensible a la conceptualización, pero la identificabilidad depende de dónde y cómo se observa el sistema.

Calibración con PEST++ y rol de SGD La calibración basada en cabezas (E1) ofrece una base robusta para reproducir niveles piezométricos regionales bajo una para-

metrización parsimoniosa. La calibración *head+sgd* (E2) en la malla quadtree permitió incorporar plausibilidad costera adicional: en régimen balanceado, la contribución de SGD al objetivo se mantiene controlada y funciona como restricción física secundaria. No obstante, el análisis muestra un *trade-off* inevitable: hacer que SGD domine el ajuste requiere aumentar pesos o reformular la métrica (y su incertidumbre), lo que puede deteriorar cabezas si el mecanismo de frontera costera o la representación conceptual no son plenamente consistentes.

Los análisis de sensibilidad mostraron que los parámetros dominantes están asociados a la recarga efectiva y a la transmisividad efectiva regional (especialmente en capa profunda y zona "rest"). La presencia de no linealidad e interacciones (indicada por los diagnósticos tipo Morris y confirmada por análisis global) sugiere que el ajuste no responde a parámetros aislados, sino a combinaciones coherentes entre entradas (RCH), salidas (EVT) y capacidad de transmisión (K). Esta conclusión refuerza que los rankings de sensibilidad deben interpretarse como guía operativa para calibración y adquisición de datos.

El aprendizaje automático se consolidó como herramienta de apoyo para la calibración: el muestreo masivo del modelo de referencia permitió construir una base sintética de entrenamiento; el emulador directo reprodujo con bajo error la respuesta del modelo en las observaciones; y la calibración asistida por emulador permitió localizar soluciones candidatas de buen ajuste a un costo computacional mucho menor que el requerido por búsquedas exhaustivas con el simulador físico. El valor real de la IA en esta tesis es aportar velocidad de exploración, comparación metodológica y capacidad de prueba, manteniendo a MODFLOW 6 como referencia física obligatoria para la verificación final.

7.3. Recomendaciones

7.3.1. Recomendaciones técnicas y metodológicas

1. Separar y reportar formalmente los experimentos clave: calibración física (PEST++ / MF6), la restricción costera (SGD), y el componente IA (muestreo, emulador y calibración inversa asistida). Esto evita mezclar objetivos y facilita defender el alcance

de cada bloque.

2. Mantener un flujo reproducible (carpetas, scripts, semillas, control de versiones): el modelo gana valor cuando cualquier ejecución puede repetirse y auditarse (parámetros usados, archivos de entrada, *outputs* y métricas).

3. Reportar consistencia numérica siempre (balance, convergencia IMS, *warnings*) como requisito previo antes de comparar escenarios: es la forma tradicional de asegurar que los resultados hidrogeológicos no son artefactos.

4. Definir y documentar pesos/errores de observación (w_i ó σ) y justificar su asignación. En modelos regionales kársticos la ponderación es crítica porque el residual no refleja únicamente error de medición, sino que suele estar dominado por error de representación del modelo: heterogeneidad extrema (conductos/fracturas), conectividad preferencial, variabilidad local de recarga/ET y simplificaciones de fronteras costeras. En consecuencia, tratar todas las observaciones con el mismo peso puede sesgar la calibración hacia pozos que estén controlados por procesos no resueltos a la escala regional del modelo, forzando parámetros efectivos a valores compensatorios y reduciendo la interpretabilidad hidrogeológica.

5. Incluir diagnósticos espaciales de residuales (no solo RMSE): mapas por capa, histogramas y contribución a Φ por estación. Esto guía mejoras de parametrización y evita sobre interpretar métricas agregadas.

6. Para SGD, documentar explícitamente: segmentación costera, ancho efectivo, normalización, incertidumbre asignada y sensibilidad a estas decisiones. SGD puede aportar mucho, pero si no se documenta, se vuelve vulnerable a crítica.

7.3.2. Recomendaciones hidrogeológicas y de datos

Estas recomendaciones ayudarían a fortalecer el modelo.

1. Densificar observaciones donde el modelo está peor constreñido: zona elevada (Sierra de Ticul), franjas del anillo de cenotes con alta variabilidad y franja costera. La se-

lección debe basarse en la combinación de sensibilidad del modelo, cobertura espacial actual y aporte potencial a la identificabilidad de los parámetros dominantes.

2. Incorporar observaciones multinivel (por profundidad/capa) cuando sea posible: esto mejora identificabilidad vertical (contraste entre capas, anisotropía, intercambio vertical), que con observaciones someras suele quedar mal condicionado.

3. Mejorar forzamientos de recarga y EVT: evaluar incertidumbre de precipitación/interpolación y coherencia de ET0; en modelos regionales, errores sistemáticos en recarga/EVT obligan al ajuste artificial de K.

4. SGD y costa: si es posible, incorporar rangos por segmento desde múltiples fuentes (campañas, literatura, inferencias hidrogeoquímicas, etc.). La conversión a flujo costero y su asignación espacial es una de las mayores fuentes de incertidumbre estructural.

5. Evaluar, según el alcance aplicado futuro, procesos costeros que el flujo estacionario dulce no representa: densidad variable, intrusión salina, o acoplamientos marinos. No es obligatorio para la tesis, pero sí para aplicaciones más operativas en costa.

7.3.3. Recomendaciones para el componente de IA

1. Pasar de exploración general a emulación dirigida, sin perder verificación física:

   - implementar muestreo adaptativo (*active learning*) enfocado en regiones paramétricas de buen desempeño,
   - entrenar emuladores con restricciones o regularización física (por ejemplo, penalizar soluciones no plausibles o imponer suavidad razonable),
   - refinar progresivamente el espacio de búsqueda alrededor de soluciones verificadas con MODFLOW 6.

2. Integrar el emulador como acelerador de:

   - sensibilidad global,

- búsqueda paramétrica,
- comparación rápida de escenarios conceptuales y de rangos de parámetros, manteniendo siempre a MODFLOW 6 como verificación final.

3. En futuras extensiones, incorporar cuantificación explícita de incertidumbre del emulador y criterios de aceptación para decidir cuándo una solución candidata obtenida con IA debe pasar a verificación física o descartarse por extrapolación fuera del dominio de entrenamiento.

Este trabajo establece una base reproducible para la modelación regional del acuífero kárstico de Yucatán, combinando consistencia numérica, calibración automática, análisis de sensibilidad y un componente de calibración asistida por aprendizaje automático. La principal contribución no es solo un conjunto de parámetros "calibrados", sino un flujo de trabajo verificable y escalable que permite mejorar el modelo con nueva información, contrastar estrategias de ajuste y extender el marco hacia análisis transitorios y costeros cuando el objetivo aplicado lo requiera.

Apéndice A

MODFLOW 6 y FloPy

MODFLOW 6 es la sexta versión principal de la familia MODFLOW desarrollada por el U.S. Geological Survey (USGS), y representa una evolución importante respecto a versiones previas como MODFLOW-2005 y MODFLOW-NWT. Mientras que MODFLOW-NWT fue diseñado para mejorar la solución de problemas no lineales, particularmente en acuíferos libres mediante un esquema basado en Newton-Raphson, MODFLOW 6 amplía de manera significativa las capacidades del código al adoptar una arquitectura modular y orientada a objetos. Este nuevo marco permite integrar distintos modelos hidrológicos dentro de una misma simulación, superando el enfoque más limitado de versiones anteriores centradas principalmente en el flujo de agua subterránea. Una de las principales ventajas de MODFLOW 6 es que permite incluir cualquier número de modelos dentro de una misma simulación. Estos modelos pueden ejecutarse de forma independiente, intercambiar información entre sí o acoplarse de manera estrecha mediante una solución numérica compartida. La comunicación entre modelos se realiza a través de objetos de intercambio (*exchange objects*), lo que proporciona una estructura flexible y robusta para representar sistemas hidrológicos complejos. Bajo este esquema, por ejemplo, un modelo regional de flujo de agua subterránea puede acoplarse con varios modelos locales, permitiendo el intercambio de flujos y otras variables en diferentes escalas espaciales durante una misma ejecución de la simulación. La arquitectura de MODFLOW 6 soporta actualmente varios tipos de modelos hidrológicos. Entre los principales se encuentran: (1) GWF (*Groundwater Flow*), orientado a la simulación del flujo de agua subterránea; (2) GWT

(*Groundwater Transport*), utilizado para el transporte de solutos; (3) GWE (*Groundwater Energy*), enfocado en el transporte de calor o energía térmica en el medio subterráneo; y (4) PRT (*Particle Tracking*), destinado al seguimiento advectivo de partículas dentro del campo de flujo [Langevin et al., 2017]. En conjunto, estos componentes convierten a MODFLOW 6 en una plataforma de modelación más versátil e integrada, adecuada para abordar problemas hidrogeológicos de distinta complejidad. A continuación, se describen brevemente estos componentes.

A.0.1. MODFLOW-NWT

MODFLOW-NWT (*Newton Formulation for MODFLOW-2005*) fue una extensión de MODFLOW-2005 desarrollada para mejorar la solución de problemas no lineales, particularmente en acuíferos no confinados con celdas secas e inundadas. Su principal aporte fue la incorporación de una formulación de Newton-Raphson, junto con estrategias de rehumedecimiento y mejoras en la estabilidad numérica. Estas ideas fueron retomadas posteriormente en MODFLOW 6 como una opción para tratar problemas de flujo con nivel freático variable [Niswonger et al., 2011].

A.0.2. MODFLOW-USG

MODFLOW-USG (*Unstructured Grids*) introdujo el uso de mallas no estructuradas dentro de la familia MODFLOW, permitiendo discretizaciones más flexibles que la cuadrícula rectangular tradicional. Esta versión hizo posible representar dominios complejos mediante celdas con geometrías y conectividades irregulares, como mallas triangulares o de Voronoi [Panday et al., 2013]. Muchas de estas capacidades fueron integradas posteriormente en MODFLOW 6, que admite discretizaciones estructuradas regulares (DIS), por vértices (DISV) y completamente no estructuradas (DISU) [Langevin et al., 2017].

A.0.3. Modelo GWF

El modelo GWF (*Groundwater Flow*) es el componente principal para simular el flujo de agua subterránea en MODFLOW 6. Su formulación se basa en un esquema de diferencias

finitas con volumen de control generalizado (CVFD), lo que permite que una celda pueda conectarse hidráulicamente con cualquier número de celdas vecinas. Esta característica amplía la flexibilidad espacial del modelo y permite trabajar tanto con mallas estructuradas como no estructuradas.

Para problemas no lineales, como los asociados a acuíferos libres o celdas convertibles, MODFLOW 6 puede emplear de forma opcional una formulación de Newton-Raphson, retomando conceptos desarrollados previamente en MODFLOW-NWT y MODFLOW-USG.

Al igual que en versiones anteriores, el modelo GWF se organiza mediante paquetes, donde cada uno representa una parte específica de la simulación. Algunos paquetes definen propiedades del medio poroso, como el paquete NPF; otros representan condiciones de frontera y esfuerzos hidráulicos, como recarga (RCH), evapotranspiración (EVT), pozos (WEL), drenajes (DRN) o cargas constantes (CHD ó GBC); y otros permiten simular procesos más avanzados, como ríos (SFR), lagos (LAK), pozos multicapas (MAW) o zona no saturada (UZF). Además, el paquete MVR (*Mover*) permite transferir automáticamente agua entre paquetes compatibles dentro de una misma simulación [Langevin et al., 2017].

A.0.4. Modelo GWT

El modelo GWT (*Groundwater Transport*) simula el transporte tridimensional de solutos en el agua subterránea. Su formulación resuelve la ecuación de advección-dispersión utilizando el mismo enfoque generalizado de discretización espacial que el modelo GWF, por lo que puede aplicarse en mallas DIS, DISV y DISU.

El modelo GWT puede ejecutarse de manera acoplada con GWF, utilizando los flujos calculados por el modelo de flujo para resolver el transporte de masa, o de forma independiente a partir de resultados previamente almacenados. Asimismo, puede representar el transporte asociado a paquetes avanzados y, cuando el modelo de flujo emplea el paquete MVR, el movimiento de masa entre paquetes puede simularse mediante el paquete MVT, análogo al transporte de agua [Langevin et al., 2017].

A.0.5. Modelo GWE

El modelo GWE (*Groundwater Energy*) simula el transporte de energía térmica en agua subterránea en movimiento. Este modelo se acopla a GWF y representa procesos como advección de calor, dispersión hidrodinámica, conducción térmica y almacenamiento de energía en el agua y en la matriz sólida del acuífero.

Además del transporte térmico en el medio poroso, GWE permite considerar el intercambio de energía asociado a fuentes y sumideros de agua subterránea, así como el transporte a través de paquetes avanzados. Cuando el modelo de flujo utiliza MVR, el intercambio de energía entre paquetes puede representarse mediante el paquete MVE, equivalente térmico del sistema de transferencia [Langevin et al., 2017].

A.0.6. Modelo PRT

El modelo PRT (*Particle Tracking*) calcula trayectorias advectivas tridimensionales de partículas dentro del campo de flujo subterráneo. Está diseñado para funcionar con un modelo GWF, del cual obtiene las velocidades necesarias para el seguimiento de partículas [Langevin et al., 2017]. Conceptualmente, PRT retoma gran parte de la funcionalidad de MODPATH 7, pero con integración directa dentro del entorno de MODFLOW 6.

PRT puede ejecutarse de manera acoplada con GWF o de forma independiente a partir de archivos de flujo previamente calculados. En su versión actual presenta algunas limitaciones, entre ellas la falta de soporte para mallas no-estructuradas (DISU) y ciertas restricciones en el seguimiento de la trayectoria de partículas a través de algunos paquetes avanzados. Aun así, constituye una herramienta útil para analizar trayectorias, zonas de captura y tiempos de tránsito en sistemas de flujo subterráneo.

A.1. Estructura general de MODFLOW 6

MODFLOW 6 está organizado bajo una arquitectura modular que permite integrar distintos modelos y procesos dentro de una misma simulación. Esta estructura se basa en paquetes, donde cada uno representa una función específica, ya sea una discretización, un

conjunto de propiedades, una condición de frontera o un proceso hidrológico particular [Langevin et al., 2017]. Esta organización facilita la construcción, modificación y acoplamiento de modelos de distinta complejidad.

A.1.1. Paquete IMS (Iterative Model Solver)

El paquete IMS controla la solución numérica del sistema de ecuaciones del modelo. En él se definen los criterios de convergencia, el número máximo de iteraciones y la estrategia de solución para problemas lineales y no-lineales. Debido a que estos parámetros influyen directamente en la estabilidad y la velocidad de convergencia, su ajuste es especialmente importante en modelos con fuerte heterogeneidad hidráulica, celdas convertibles o condiciones altamente no lineales [Langevin et al., 2017].

A.1.1.1. No linealidad y control de convergencia

En MODFLOW 6, la no-linealidad suele aparecer en modelos de acuíferos libres, transiciones húmedo-seco y algunos paquetes de esfuerzo hidráulico. Para estos casos, el modelo puede resolver la carga hidráulica mediante iteraciones externas hasta satisfacer los criterios de convergencia.

La formulación de *Newton-Raphson* permite tratar este tipo de problemas de manera más robusta, ya que actualiza la solución con base en una aproximación local del sistema no lineal. Sin embargo, cuando las correcciones entre iteraciones son demasiado grandes, pueden presentarse oscilaciones o pérdida de convergencia. En esos casos, puede emplearse *under-relaxation*, que consiste en amortiguar los cambios aplicados a la solución entre iteraciones sucesivas.

El paquete IMS permite distintos esquemas de amortiguamiento, entre ellos NONE, SIMPLE, COOLEY y DBD (*delta-bar-delta*). La selección del esquema depende del comportamiento numérico del modelo: un amortiguamiento insuficiente puede provocar inestabilidad, mientras que uno excesivo puede ralentizar la convergencia. En MODFLOW 6, la formulación de Newton-Raphson se activa a nivel del modelo de flujo, mientras que las opciones de *under-relaxation* se controlan desde IMS. En FloPy, estas configuraciones

pueden definirse explícitamente durante la construcción del modelo. En este trabajo, dichas opciones se emplearon como herramientas numéricas para mejorar la convergencia, sin modificar la base conceptual e hidrogeológica del modelo.

A.1.2. Paquete TDIS (Time Discretization)

El paquete TDIS define la discretización temporal de la simulación. En él se establece el número de periodos, la duración de cada periodo, el número de pasos de tiempo y el factor de multiplicación temporal. Estos parámetros permiten representar tanto condiciones transitorias como simulaciones en estado estacionario. Incluso en modelos permanentes, MODFLOW 6 requiere un paquete TDIS, generalmente con un solo periodo y un solo paso de tiempo.

A.1.3. Paquete NPF (Node Property Flow)

El paquete NPF define las propiedades hidráulicas del medio poroso, entre ellas la conductividad hidráulica horizontal y vertical, la anisotropía y el tipo de celda. También permite especificar si una celda es convertible y activar opciones de humedecimiento. En MODFLOW 6, NPF reemplaza a paquetes previos como LPF y BCF, ofreciendo una formulación más flexible y adecuada para modelos heterogéneos y complejos.

A.1.4. Paquete IC (Initial Conditions)

El paquete IC establece las condiciones iniciales del modelo, es decir, la carga hidráulica de partida en cada celda. Estos valores son importantes para iniciar la simulación y pueden influir en la convergencia, especialmente en modelos transitorios o no lineales. Las condiciones iniciales pueden definirse como un valor uniforme o mediante arreglos espaciales derivados de datos o de simulaciones previas.

A.1.5. Paquete RCH (Recharge)

El paquete RCH representa la recarga al acuífero desde la superficie. Generalmente se aplica sobre la capa superior activa y puede definirse como una tasa constante, zonificada

o variable en el tiempo. Su parametrización suele derivarse de balances hídricos, datos climáticos o estimaciones de infiltración efectiva.

A.1.6. Paquete EVT (Evapotranspiración)

El paquete EVT simula la extracción de agua subterránea por evapotranspiración cuando el nivel freático se encuentra cercano a la superficie. Para ello, requiere definir una tasa potencial, la elevación de la superficie evapotranspirante y una profundidad de extinción. Si la carga hidráulica desciende por debajo de dicha profundidad, la extracción se anula.

A.1.7. Paquete CHD (Constant Head)

El paquete CHD impone condiciones de carga hidráulica constante en celdas seleccionadas. Estas celdas mantienen un valor fijo de carga durante toda la simulación y actúan como fuentes o sumideros según sea necesario para sostener esa condición. Este paquete es útil para representar fronteras controladas por cuerpos de agua, el mar o límites regionales conocidos.

A.1.8. Otros paquetes usados

Además de los paquetes anteriores, MODFLOW 6 incorpora otros componentes que permiten representar procesos y condiciones de frontera específicas. Entre los más relevantes se encuentran:

- **WEL (Well):** representa pozos de extracción o inyección mediante una tasa de flujo especificada.
- **DRN (Drain):** simula drenes o descargas controladas por un nivel umbral, donde el flujo depende de la diferencia entre la carga en la celda y la elevación del dren.
- **GHB (General Head Boundary):** representa fronteras de carga general, donde el flujo intercambiado depende de la diferencia entre la carga de la celda y una carga externa de referencia.

- **OC (Output Control):** controla qué variables se guardan durante la simulación y con qué frecuencia, incluyendo cargas, presupuestos y archivos binarios de salida.
- **DIS / DISV / DISU:** definen la discretización espacial del modelo. DIS corresponde a mallas estructuradas rectangulares; DISV a mallas por vértices con geometría poligonal en planta; y DISU a discretizaciones completamente no estructuradas.

A.1.9. Integración de paquetes en la simulación mediante FloPy

La organización modular de MODFLOW 6 se refleja en su implementación computacional. Los paquetes que definen propiedades hidráulicas, condiciones iniciales y condiciones de frontera, como NPF, IC, RCH, EVT, WEL o CHD, se integran dentro del modelo GWF correspondiente; en cambio, paquetes como IMS y TDIS operan a nivel global de la simulación. Esta estructura jerárquica permite construir modelos de forma ordenada, flexible y reproducible.

En este contexto, FloPy constituye una herramienta especialmente útil, ya que permite crear, ejecutar y analizar modelos MODFLOW 6 desde Python sin necesidad de editar manualmente los archivos de entrada Bakker et al. [2016]. Su lógica de construcción sigue la misma arquitectura de MODFLOW 6, por lo que el flujo de trabajo suele organizarse en tres etapas principales.

Primero, se crea la simulación global mediante un objeto `MFSimulation`, al cual se asocian los paquetes generales, como TDIS para la discretización temporal e IMS para la solución numérica. Después, se incorpora el modelo de flujo GWF, definiendo su discretización espacial mediante el paquete correspondiente, por ejemplo DIS para mallas estructuradas, DISV para mallas por vértices y/o DISU para malla no estructurada. Finalmente, sobre ese modelo se agregan los paquetes que representan las propiedades del medio y las condiciones de frontera, tales como NPF, RCH, EVT, WEL, DRN o CHD, cada uno con sus parámetros y arreglos espaciales asociados.

Una vez integrada esta estructura, FloPy permite escribir automáticamente los archivos de entrada, ejecutar la simulación con MODFLOW 6 y acceder a los resultados generados. De esta manera, la construcción del modelo se vuelve más transparente, reproducible y efi-

ciente, especialmente en estudios donde se requiere modificar parámetros, probar distintos escenarios o automatizar procesos de calibración.

A.2. Condiciones iniciales

Antes de resolver la ecuación general de flujo subterráneo (ecuación A.3) para la carga hidráulica h, se debe definir una condición inicial. En un problema tridimensional, la condición inicial tiene la forma general:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial h}{\partial z}\right)-W(x,y,z,t)=S_s\frac{\partial h}{\partial t}, \tag{A.1}$$

$$H=f(X,Y,Z) \quad \text{en } t=0, \tag{A.2}$$

donde $H(x,y,z,0)$ especifica la distribución inicial de carga en todo el acuífero para $t=0$. La ecuación A.4 describe la variación espacial de la carga hidráulica en el tiempo inicial, que sirve como condición inicial del modelo. Esta distribución inicial de h no siempre es fácil de obtener de forma directa a partir de datos de campo; una práctica común es utilizar la solución de estado estacionario proveniente de una simulación previa (por ejemplo, un modelo calibrado en condiciones estacionarias) como condición inicial para un modelo transitorio. En otros casos, se puede asumir una carga inicial uniforme $H(x,y,z,0)=H_0$ constante en todo el dominio si no se cuenta con mejor información; aunque sencilla, esta suposición puede generar un periodo inicial de ajuste numérico en la simulación. La condición inicial reviste especial importancia en problemas de acuífero libre (no confinado), ya que la carga inicial determina la posición inicial del nivel freático y, por tanto, el espesor saturado efectivo y la transmisividad en cada celda al inicio de la simulación. Errores o incertidumbres en la condición inicial pueden manifestarse como desequilibrios iniciales (p. ej., flujos transitorios fuertes al inicio) que requieren cierto tiempo de simulación para disiparse. Una estrategia para minimizar este problema es iniciar la simulación en términos de abatimiento: es decir, usar una formulación donde inicialmente $s=0$ en todas partes (tomando como referencia el estado inicial), de modo que se simulen cambios relativos (abatimientos) en lugar de cargas absolutas. En modelos de flujo puramente bidimensio-

nales (plano horizontal), la condición inicial se simplifica a una función $H = f(X, Y)$ en $t = 0$.

A.3. Condiciones iniciales

Para resolver la ecuación general de flujo subterráneo (ecuación A.3) es necesario definir las condiciones iniciales para la carga hidráulica h. En tres dimensiones, la ecuación gobernante puede escribirse como:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial h}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial h}{\partial z}\right) - W(x, y, z, t) = S_s\frac{\partial h}{\partial t} \tag{A.3}$$

La condición inicial establece la distribución espacial de la carga hidráulica al inicio de la simulación:

$$h(x, y, z, 0) = f(x, y, z) \tag{A.4}$$

donde $h(x, y, z, 0)$ representa la distribución inicial de carga en todo el dominio para $t = 0$. Esta condición sirve como punto de partida para la simulación y es especialmente importante en modelos transitorios.

En la práctica, la condición inicial no siempre puede definirse directamente a partir de datos de campo. Por ello, es común utilizar como condición inicial la solución en estado estacionario obtenida en una simulación previa. Cuando no se dispone de mejor información, también puede asumirse una carga uniforme en todo el dominio; sin embargo, esta simplificación puede generar un periodo inicial de ajuste numérico.

La condición inicial es particularmente importante en acuíferos libres, ya que define la posición inicial del nivel freático y, por tanto, el espesor saturado y la transmisividad efectiva al inicio de la simulación. Si esta condición está mal definida, pueden generarse desequilibrios transitorios importantes durante los primeros pasos de tiempo. Una alternativa para reducir este efecto consiste en formular el problema en términos de abatimiento, tomando como referencia el estado inicial, de modo que al comienzo de la simulación se

tenga $s = 0$ en todo el dominio. En modelos bidimensionales horizontales, la condición inicial se simplifica a una función de la forma $h(x, y, 0) = f(x, y)$.

A.3.1. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera constituyen uno de los aspectos más importantes en la construcción de un modelo numérico, ya que controlan la forma en que el dominio modelado intercambia agua con su entorno. En general, deben definirse en todas las celdas o nodos ubicados en el perímetro del modelo.

Siempre que sea posible, conviene extender el dominio hasta hacerlo coincidir con límites hidrológicos naturales o regionales, como ríos, divisorias de flujo subterráneo o barreras impermeables. Cuando estos límites no pueden identificarse con claridad, es necesario imponer fronteras artificiales, ya sea de carga hidráulica fija o de flujo especifico, con base en criterios hidráulicos y en la información disponible.

Las fronteras artificiales deben ubicarse lo suficientemente lejos de la zona de interés para evitar que controlen de manera indebida la solución interna del modelo. De lo contrario, la respuesta simulada puede depender más de la condición impuesta en el borde que del comportamiento real del sistema.

Una forma práctica de evaluar si las condiciones de frontera son adecuadas consiste en modificar el tipo de frontera y analizar la sensibilidad de los resultados. Por ejemplo, puede sustituirse una frontera de carga constante por una de flujo nulo, o viceversa, y verificar si la distribución de cargas y el balance hídrico cambian de forma importante en la zona de interés. Si los resultados no se modifican significativamente, la frontera elegida puede considerarse razonable; en caso contrario, su ubicación o formulación debe revisarse.

En modelos de flujo subterráneo, las condiciones de frontera más comunes son de tres tipos:

1. **Condición de Dirichlet (Tipo I).** En este caso se prescribe directamente el valor de la carga hidráulica en la frontera. De forma general:

$$h(x, y, z, t) = f(y, z, t) \quad \text{en } x = 0 \tag{A.5}$$

Un caso particular es una carga hidráulica constante en el tiempo, por ejemplo:

$$h = 100 \text{ [m]} \quad \text{en } x = 0 \tag{A.6}$$

Esta condición representa, por ejemplo, el contacto con un río, costa, lago o embalse cuya cota se asume constante. La frontera aporta o extrae el agua necesaria para mantener ese valor de carga.

2. **Condición de Neumann (Tipo II).** En este caso se prescribe el flujo normal a la frontera. Matemáticamente, puede expresarse como:

$$-K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x} = q_n(y, z, t) \quad \text{en } x = 0 \tag{A.7}$$

donde $q_n(y, z, t)$ es el flujo por unidad de área a través de la frontera. Un valor positivo indica entrada de agua al dominio y un valor negativo indica salida. Un caso particular de esta condición es la frontera de no flujo, para la cual:

$$q_n = 0 \tag{A.8}$$

Este tipo de frontera suele emplearse en divisorias de flujo o en límites impermeables. Aunque resulta útil, debe verificarse que no excluya flujos que realmente puedan ocurrir en el sistema.

3. **Condición mixta o de Cauchy (Tipo III).** Esta condición relaciona el flujo a través de la frontera con la diferencia entre una carga hidráulica externa y la carga hidráulica dentro del modelo. Su forma general es:

$$-K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{K'}{b'}(H_0 - h) \quad \text{en } x = 0 \tag{A.9}$$

donde H_0 es la carga hidráulica en el medio externo adyacente, y K'/b' representa la conductancia hidráulica de la interfaz. Esta condición se utiliza cuando no se desea imponer una carga fija estricta, sino permitir que el flujo dependa de la diferencia

de cargas. En MODFLOW, esta formulación corresponde al paquete GHB (*General Head Boundary*).

La aproximación numérica mediante diferencias finitas transforma la ecuación diferencial parcial de flujo subterráneo en un sistema de ecuaciones algebraicas para cada nodo o celda de la malla. Dicho sistema puede ser lineal o no lineal, dependiendo de la formulación del problema y de los paquetes empleados.

En MODFLOW 6, la solución se obtiene mediante métodos iterativos. El proceso parte de una estimación inicial de la carga hidráulica (paquete IC) y continúa con correcciones sucesivas hasta que los cambios entre iteraciones y los residuos cumplen los criterios de convergencia establecidos. Una vez alcanzada esa convergencia, se considera obtenida la solución numérica para el paso de tiempo correspondiente.

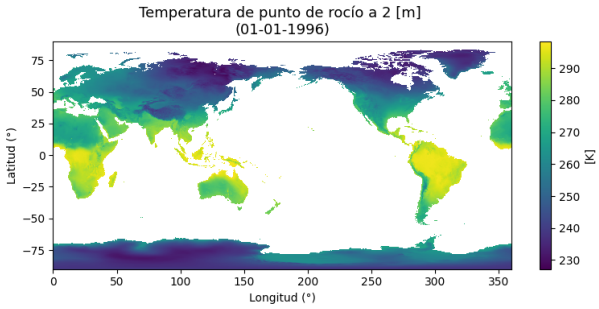
Apéndice B

Datos de ERA5

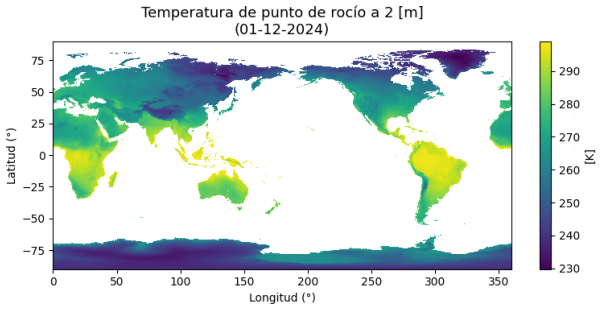
En esta sección se presentan los mapas de las series temporales (1996-2024) de ERA5 y su recorte para el estado de Yucatán, utilizados como insumo para calcular la evapotranspiración (EVT). Para mayor claridad, se muestran únicamente los mapas de los periodos extremos: 1996 y 2024.

Estan ordenados de la siguiente manera y se da una breve descripción de que representan:

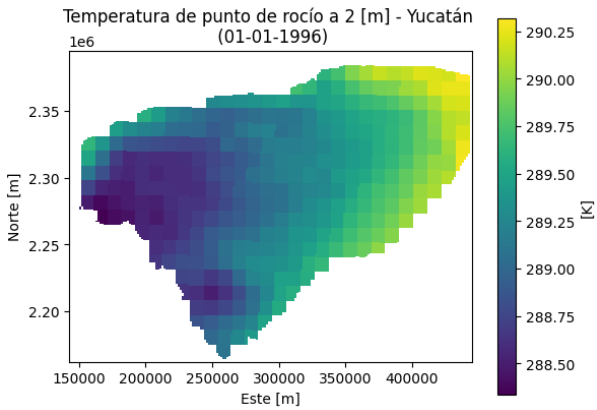
- Temperatura de punto de rocío a 2 [m] (*d2m*): Medida en **Kelvin (K)**. Representa la temperatura a la que el aire debe enfriarse para alcanzar la saturación. Es fundamental para determinar la **presión de vapor real** y el déficit de presión de vapor (VPD).



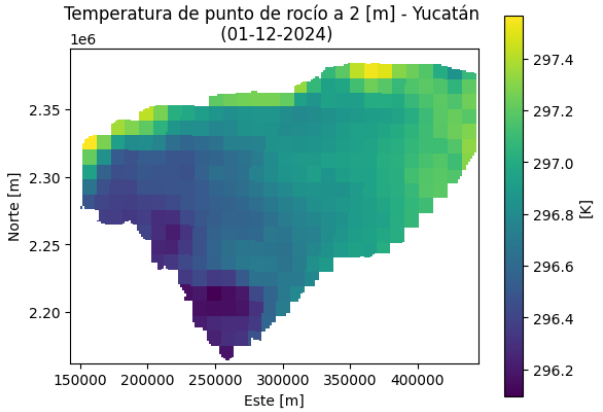
((a)) Temperatura de punto de rocío a 2 [m] (01-01-1996)



((b)) Temperatura de punto de rocío a 2 [m] (01-12-2024)



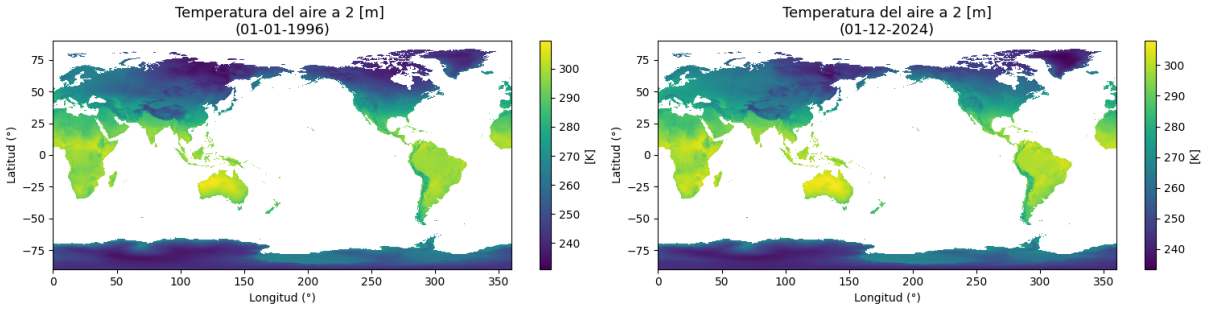
((c)) Temperatura de punto de rocío a 2 [m] en Yucatán (01-01-1996).



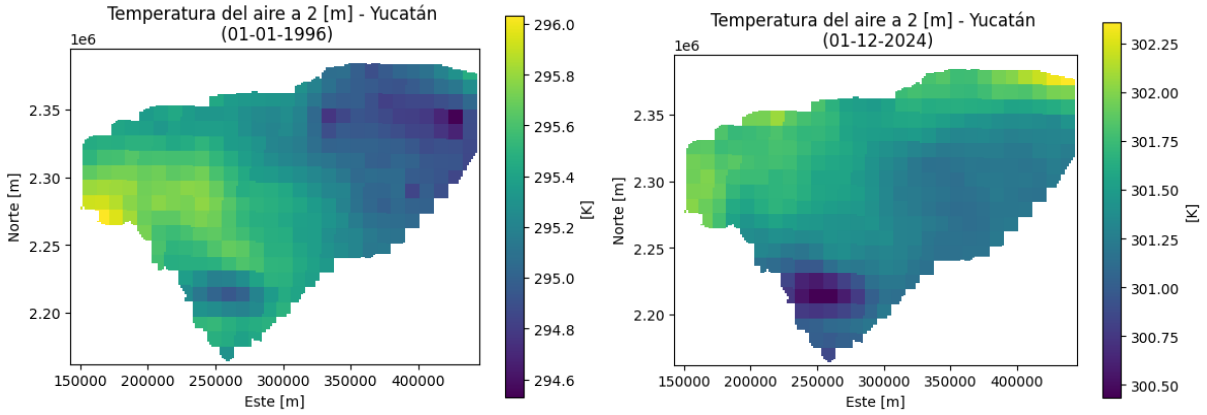
((d)) Temperatura de punto de rocío a 2 [m] en Yucatán (01-12-2024).

Figura B.1: Temperatura de punto de rocío a 2 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024)

- Temperatura del aire a 2 [m] (*t2m*): Medida en **Kelvin (K)**. Es la temperatura promedio del aire ambiente por encima de la superficie. Se utiliza para calcular la **presión de vapor de saturación** y la pendiente de la curva de presión de vapor (Δ).



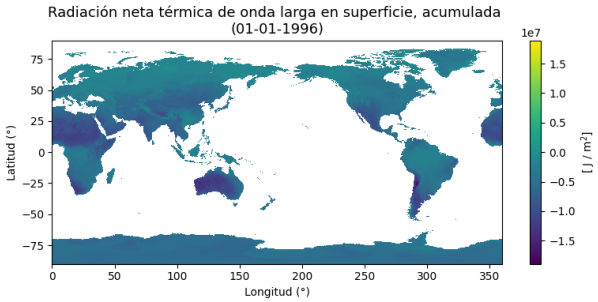
((a)) Temperatura del aire a 2 [m] (01-01-1996) ((b)) Temperatura del aire a 2 [m] (01-12-2024)



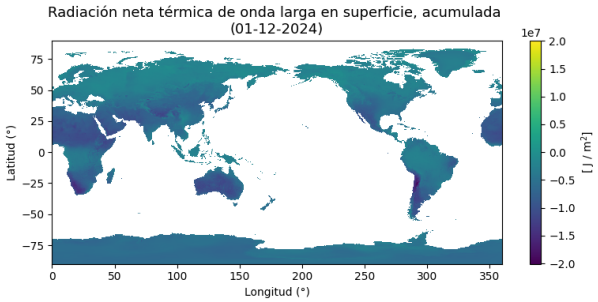
((c)) Temperatura del aire a 2 [m] en Yucatán (01-01-1996). ((d)) Temperatura del aire a 2 [m] en Yucatán (01-12-2024).

Figura B.2: Temperatura del aire a 2 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024)

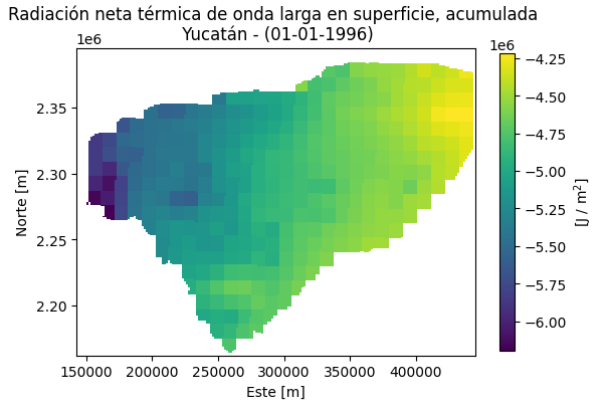
- Radiación neta de onda larga en superficie acumulada (*str*): Medida en **Joules por metro cuadrado (J/m^2)**. Es la diferencia entre la radiación infrarroja térmica descendente y la ascendente. Define el balance de enfriamiento de la superficie durante la noche y bajo cobertura nubosa.



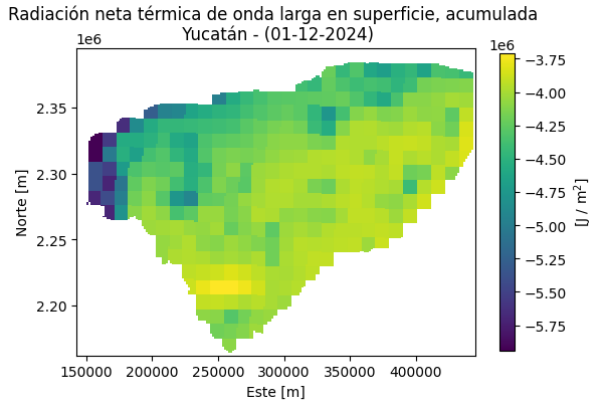
((a)) Radiación neta térmica de onda larga en superficie acumulada (01-01-1996)



((b)) Radiación neta térmica de onda larga en superficie acumulada (01-12-2024)



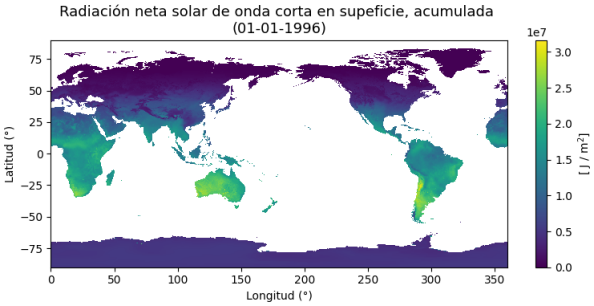
((c)) Radiación neta térmica de onda larga en superficie acumulada en Yucatán (01-01-1996).



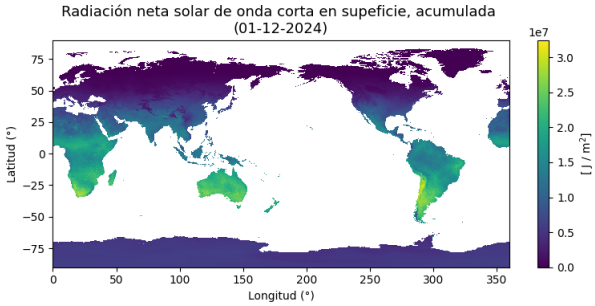
((d)) Radiación neta térmica de onda larga en superficie acumulada en Yucatán (01-12-2024).

Figura B.3: Radiación neta térmica de onda larga en superficie acumulada en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024)

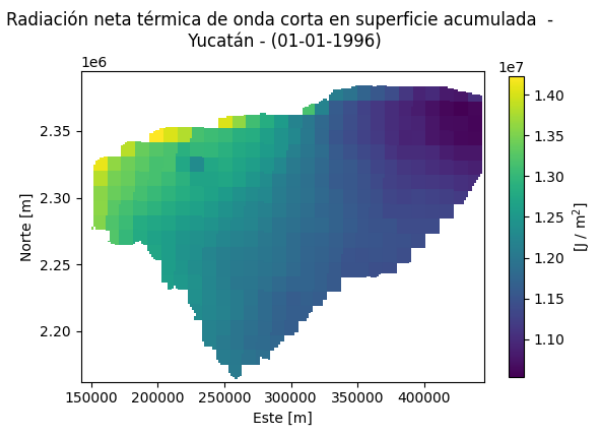
- Radiación térmica neta de onda corta en superficie acumulada (*ssr*): Medida en **Joules por metro cuadrado (J/m^2)**. Representa la cantidad de radiación solar absorbida por la superficie tras considerar el albedo. Es la principal fuente de **energía disponible** para el proceso de evaporación.



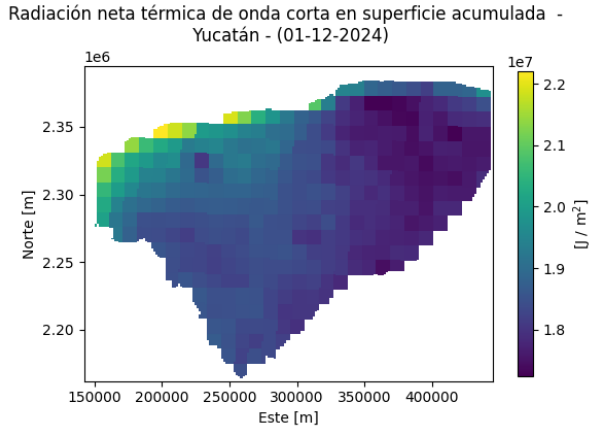
((a)) Radiación neta térmica de onda corta en superficie acumulada (01-01-1996)



((b)) Radiación neta térmica de onda corta en superficie acumulada (01-12-2024)



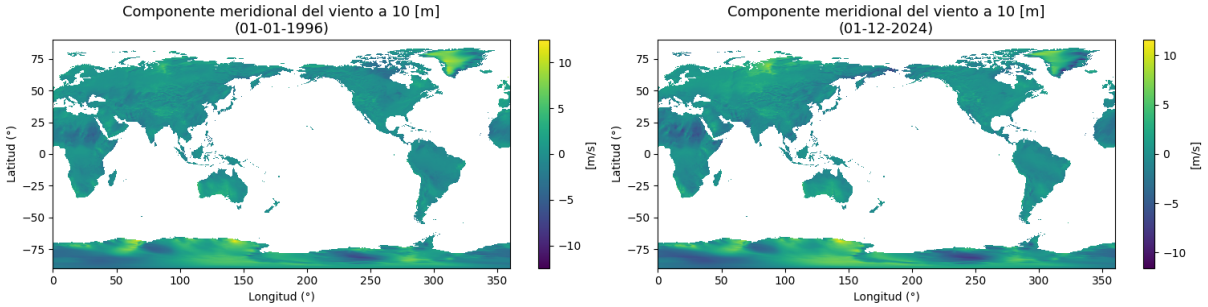
((c)) Radiación neta térmica de onda corta en superficie acumulada en Yucatán (01-01-1996).



((d)) Radiación neta térmica de onda corta en superficie acumulada en Yucatán (01-12-2024).

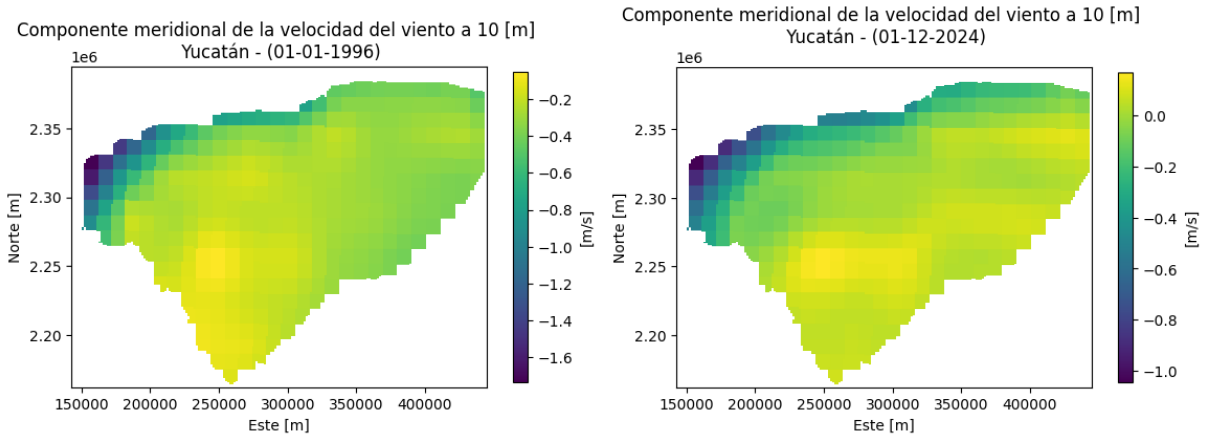
Figura B.4: Radiación neta térmica de onda corta en superficie acumulada en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024)

- Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] (*v10*): Medida en **metros por segundo** (m/s). Corresponde a la velocidad del aire en dirección norte-sur. Junto con la componente zonal, permite calcular la **velocidad del viento total** (U), necesaria para determinar la transferencia aerodinámica.



((a)) Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] (01-01-1996)

((b)) Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] (01-12-2024)

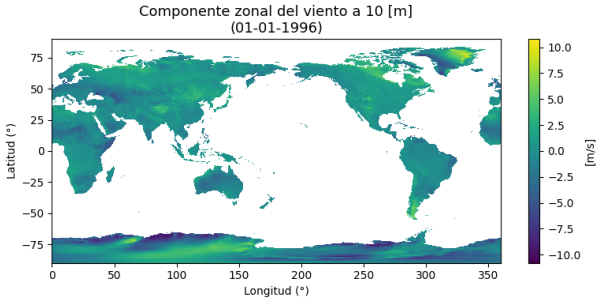


((c)) Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] (01-01-1996).

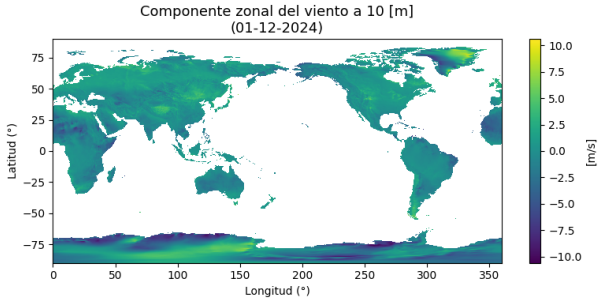
((d)) Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] (01-12-2024).

Figura B.5: Componente meridional de la velocidad del viento a 10 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024)

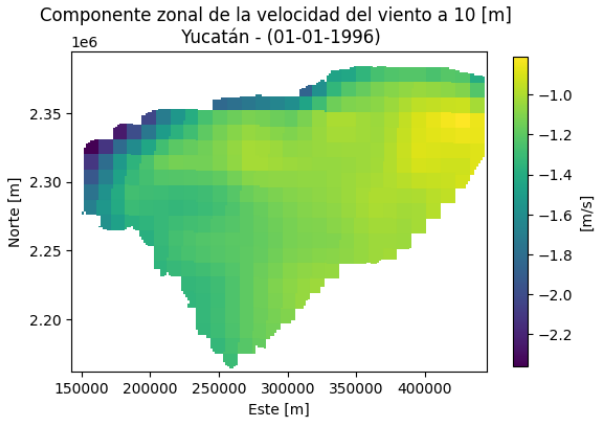
- Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] (*u10*): Medida en **metros por segundo** (m/s). Corresponde a la velocidad del aire en dirección oeste-este. Es esencial para cuantificar el transporte de humedad lejos de la superficie de evaporación.



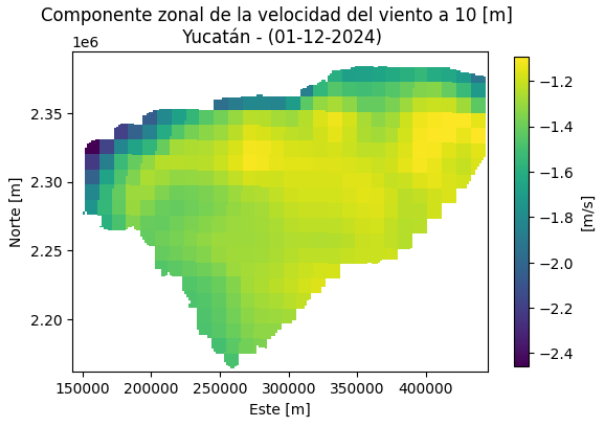
((a)) Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] (01-01-1996)



((b)) Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] (01-12-2024)



((c)) Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] (01-01-1996).



((d)) Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] (01-12-2024).

Figura B.6: Componente zonal de la velocidad del viento a 10 [m] en el mundo y Yucatán (Periodos 1996 y 2024)

Apéndice C

Repositorio de código (GitHub)

Con el fin de promover la reproducibilidad del flujo de trabajo presentado en esta tesis, el código fuente (scripts y utilidades) se encuentra disponible en mi repositorio público de GitHub. El repositorio incluye los componentes empleados para: construcción y ejecución del modelo con MODFLOW 6 mediante FloPy, calibración con PEST++/pyEMU, análisis de sensibilidad (Morris/Sobol), y los experimentos de aprendizaje automático, emuladores, GPR y la red neuronal.

Repositorio:

`https://github.com/90990/Yucatan_hidrogeological_model_PEST_AI`

Bibliografía

Richard G. Allen, Luis S. Pereira, Dirk Raes, and Martin Smith. *Crop evapotranspiration: Guidelines for computing crop water requirements*. Number 56 in FAO Irrigation and Drainage Paper. Food and Agriculture Organization of the United Nations, Rome, 1998. ISBN 92-5-104219-5.

M. Bakker, V. Post, C. D. Langevin, J. D. Hughes, J. T. White, J. J. Starn, and M. N. Fienen. Scripting modflow model development using python and flopy. *Groundwater*, 54(5):733–739, 2016. doi: 10.1111/gwat.12413.

Peter Bauer-Gottwein, B. R. N. Gondwe, G. Charvet, L. E. Marín, M. Rebolledo-Vieyra, and G. Merediz-Alonso. Review: The karst aquifer of the yucatan peninsula, mexico. *Hydrogeology Journal*, 19(3):507–524, 2011. doi: 10.1007/s10040-010-0699-5.

Comisión Nacional del Agua (CONAGUA). Geovisor de mediciones piezométricas, 2026. URL `https://sigagis.conagua.gob.mx/rp20/`. Consultado en Febrero 15, 2026.

CONAGUA-SMN. Base de datos climatológica nacional (sistema de información hidrológica). `https://sih.conagua.gob.mx/`, 2024. Accedido el: 24 de marzo de 2026. Datos de precipitación diaria/mensual.

Emilio Custodio and Manuel Ramón Llamas. *Hidrología Subterránea*. Ediciones Omega, Barcelona, España, 2 edition, 1983. ISBN 8428204462. Describe los parámetros dominantes en el flujo regional, incluyendo recarga, conductividad y pérdidas por evapotranspiración.

C. W. Fetter. *Applied Hydrogeology*. Prentice Hall, 4 edition, 2001.

C. R. Fitts. *Groundwater Science*. Academic Press, 2013.

A. I. J. Forrester, A. Sobester, and A. J. Keane. *Engineering Design via Surrogate Modelling*. Wiley, 2008.

R. A. Freeze and J. A. Cherry. *Groundwater*. Prentice Hall, 1979.

B. R. N. Gondwe, S. Lerer, S. Stisen, L. Marín, M. Rebolledo-Vieyra, G. Merediz-Alonso, and P. Bauer-Gottwein. Hydrogeology of the south-eastern yucatán peninsula. *Journal of Hydrology*, 393(3-4):272–287, 2010. doi: 10.1016/j.jhydrol.2010.08.022.

R. González-Herrera, I. Sánchez-y Pinto, and J. Gamboa-Vargas. Groundwater-flow modeling in the yucatan karstic aquifer, mexico. *Hydrogeology Journal*, 10(5):539–552, 2002. doi: 10.1007/s10040-002-0216-6.

N. Kresic. *Hydrogeology and Groundwater Modeling*. CRC Press, 2007.

C. D. Langevin, J. D. Hughes, E. R. Banta, R. G. Niswonger, S. Panday, and A. M. Provost. Modflow 6 modular hydrologic model. Technical Report Techniques and Methods 6-A55, U.S. Geological Survey, 2017.

L. E. Marín, E. C. Perry, H. I. Essaid, and B. Steinich. Hydrogeological investigations and numerical simulation of groundwater flow in the karstic aquifer of northwestern yucatan, mexico. *Hydrogeology Journal*, 8(1):108–122, 2000. doi: 10.1007/s100400050011.

C. Martínez-Salvador, M. Moreno-Gómez, and R. Liedl. Estimating pollutant residence time and no_3 concentrations in the yucatan karst aquifer: Considerations for an integrated karst aquifer vulnerability methodology. *Water*, 11(7):1431, 2019. doi: 10.3390/w11071431.

M. D. McKay, R. J. Beckman, and W. J. Conover. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 21(2):239–245, 1979.

M. Moreno-Gómez, C. Martínez-Salvador, R. Liedl, C. Stefan, and J. Pacheco. First application of the integrated karst aquifer vulnerability (ikav) method – potential and

actual vulnerability in yucatán, mexico. *Natural Hazards and Earth System Sciences*, 22:1591–1608, 2022. doi: 10.5194/nhess-22-1591-2022.

Dorina Murgulet, Audrey Douglas, Jorge Silveira, Ismael Tapia, and Arnoldo Valle-Levinson. Submarine groundwater discharge along the northern coast of the yucatán peninsula. In *Proceedings of the Gulf and Caribbean Fisheries Institute*, 2020. doi: 10.5038/9781733375313.1060.

Kevin P. Murphy. *Machine Learning: A Probabilistic Perspective*. MIT Press, 2012.

C. Narváez-Montoya, R. Mondragón Bonilla, N. Goldscheider, et al. Salinization patterns of groundwater in the yucatan peninsula reveal contamination and vulnerability of the karst aquifer. *Communications Earth & Environment*, 6(1):468, 2025. doi: 10.1038/s43247-025-02456.

R. G. Niswonger, S. Panday, and M. Ibaraki. Modflow-nwt, a newton formulation for modflow-2005. *U.S. Geological Survey Techniques and Methods*, 6(A37), 2011.

N. Oreskes, K. Shrader-Frechette, and K. Belitz. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science*, 263:641–646, 1994.

J. C. Ortiz-Alemán, M. Nava-Flores, J. H. Urrutia-Fucugauchi, S. Ortiz-Aguilar, M. G. Orozco-del Castillo, and S. López-Juárez. Detection of sedimentary basins and karstic faults in the yucatán peninsula by gravity inversion and euler deconvolution. *Earth*, 6 (2):42, 2025. doi: 10.3390/earth6020042.

S. Panday, C. D. Langevin, R. G. Niswonger, M. Ibaraki, and J. D. Hughes. Modflow-usg version 1: An unstructured grid version of modflow for groundwater flow and transport processes. *U.S. Geological Survey Techniques and Methods*, 6(A45), 2013.

R. Pérez-Ceballos, C. Canul-Macario, R. Pacheco-Castro, J. Pacheco-Ávila, J. Euán-Ávila, and M. Merino-Ibarra. Regional hydrogeochemical evolution of groundwater in the ring of cenotes, yucatán (mexico): An inverse modelling approach. *Water*, 13(5):614, 2021. doi: 10.3390/w13050614.

Eugene C. Perry, Jennifer N. Swift, Jose Gamboa, Andrew S. Reeve, Robert N. Sanborn, Luis E. Marin, and Miguel Villasuso. Geologic and environmental aspects of surface cementation, north coast, yucatan, mexico. *Geology*, 17(9):818–821, 1989. doi: 10.1130/0091-7613(1989)017<0818:GAEAOS>2.3.CO;2.

rioxarray Developers. rioxarray documentation, 2026. URL `https://corteva.github.io/rioxarray/stable/`. Consultado en Febrero 15, 2026.

R. Storn and K. Price. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, 11:341–359, 1997.

J. Tóth. *Groundwater Hydraulics*. Springer, 2000.

Jeremy T. White, Randall J. Hunt, Michael N. Fienen, and John E. Doherty. Approaches to highly parameterized inversion: PEST++ version 5. Techniques and Methods 7-C26, U.S. Geological Survey, 2020.

xarray Developers. xarray documentation, 2026. URL `https://docs.xarray.dev/en/stable/`. Consultado en Febrero 15, 2026.