

# CALIBRACIÓN AUTOMÁTICA DE PARÁMETROS EMPÍRICOS ASOCIADOS A FUNCIONES NO LINEALES

Andrés Alcolea<sup>1</sup> & Germán A. Galarza<sup>3</sup>

**Resumen** - El problema inverso en hidrología subterránea consiste en la estimación de los parámetros de un modelo, a partir de las respuestas del sistema (niveles, concentraciones, etc.) y de información previa sobre los propios parámetros, tanto físicos (conductividad hidráulica, almacenamiento específico, etc.) como empíricos asociados a alguna función no lineal, también empírica, que controla la evolución de los parámetros físicos en función de la variable de estado. Su uso es poco frecuente en la modelación de procesos en la zona no saturada. El inconveniente se halla en el elevado grado de incertidumbre que presentan estos parámetros empíricos (que, en la mayoría de los casos, controlan sobremanera la respuesta del modelo), así como en la dificultad intrínseca del problema matemático. En este trabajo se presenta una metodología de aplicación del problema inverso a casos complejos, referentes a la modelación en zona no saturada. Así, en la primera parte del presente trabajo se desarrolla la formulación matemática relativa al problema, para presentar en la segunda, a modo de ejemplo, los resultados obtenidos por aplicación de la metodología a un problema sintético. Los mismos muestran las capacidades del método y el algoritmo empleados.

**Palabras clave** - Flujo No Saturado, Problema Inverso, Van Genuchten.

## 1.- INTRODUCCIÓN

Las ecuaciones que gobiernan la resolución de problemas de flujo de agua en

---

<sup>1</sup> Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos de Barcelona (ETSICCPB), Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, España., Campus Norte UPC, 08034 Barcelona, España, e-mail: ,andres.alcolea@upc.es, Teléfono: +34 93 4016852, Fax:+34 93 4017251

<sup>3</sup> Escuela Colombiana de Ingeniería, Autopista Norte, km. 13, Santa Fé, Bogotá, Colombia., e-mail: [ggalarza@escuelaing.edu.co](mailto:ggalarza@escuelaing.edu.co), Teléfono: 571 6763888 Ext 278, Fax: 571 6762340

medio poroso pueden presentar distintos tipos de no linealidad. Por ejemplo, en medio saturado y acuífero libre, la transmisividad es proporcional al nivel piezométrico (aproximación de Dupuit). En el caso más general, cualquier parámetro involucrado en dichas ecuaciones puede depender de la variable de estado (incógnita de la ecuación).

Para la descripción de dicha dependencia se emplean diversas relaciones (alguna de ellas empírica), entre los parámetros de la ecuación y la variable de estado. Estas relaciones suelen expresarse por medio de funciones no lineales.

En este campo se han realizado numerosos estudios <sup>1,2,3</sup> para intentar obtener distintas curvas de ajuste, tratando de reproducir la variabilidad de los parámetros de las ecuaciones en función de la variable de estado. La problemática asociada a este tipo de funciones es la aparición de parámetros de ajuste en sus expresiones (y que, en adelante, denotaremos como empíricos), a veces sin sentido físico alguno. Además, generalmente, el grado de incertidumbre que presentan es elevado y controla sobremanera la evolución de la variable de estado. Este indeseado efecto puede dar lugar, en ocasiones, a graves errores en la predicción del modelo. Así, resulta útil disponer de una herramienta capaz de proporcionar una buena estimación de este tipo de parámetros (necesariamente de forma automática), a partir de datos sobre la respuesta del sistema real (en este caso, niveles piezométricos) y, si es posible, sobre los parámetros del modelo, bien sean hidráulicos, como conductividad hidráulica, almacenamiento específico, etc, o empíricos de las funciones no lineales. Con este propósito, entre otros, se ha actualizado un código de elementos finitos <sup>4</sup> que, originalmente, sólo permitía la estimación de parámetros hidráulicos.

El problema general, descrito anteriormente, consta de dos partes bien diferenciadas. La primera de ellas, conocida como problema directo o simulación, consiste en la resolución numérica del problema físico (esto es, la obtención de la variable de estado). Sobre ella trata la primera parte del presente trabajo, si bien se encuentra ampliamente documentada en la literatura especializada <sup>4,5,6</sup>. La segunda, conocida como problema inverso, consiste en la estimación propiamente dicha de los parámetros inciertos, mediante aplicación de un método de optimización. La formulación utilizada se describe ampliamente en la segunda sección del documento.

## **2.- FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DIRECTO**

La herramienta más recurrida para estudiar el movimiento del agua a través de medios porosos es la ley de Darcy (1856). Esta ley establece que el flujo de agua entre dos puntos, en un medio saturado, es proporcional al gradiente de nivel piezométrico

que existe entre ellos. En forma vectorial, puede escribirse como:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla h \quad (1)$$

donde  $\mathbf{q}$  [ $LT^{-1}$ ] es el flujo volumétrico de agua (comúnmente velocidad de Darcy),  $\mathbf{K}$  [ $LT^{-1}$ ] es el tensor de conductividad hidráulica del medio y  $h$  [L] es el nivel piezométrico, cuyo significado físico es potencial de energía por unidad de peso de fluido. Este término se puede expresar en función de sus componentes: la gravitatoria o de posición ( $z$ ) y la de presión ( $p/rg$ ), siendo  $z$  [L] la altura sobre un nivel de referencia,  $p$  [ $FL^{-2}$ ] la presión actuante en el fluido,  $r$  [ $ML^{-3}$ ] la densidad de éste y  $g$  la aceleración de la gravedad.

Por otra parte, la ecuación de conservación de masa establece el balance de fluido sobre un volumen de control (suponiendo densidad constante), en un instante dado como <sup>7</sup>:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + q_r \quad (2)$$

en la que  $\theta$  [-] representa el contenido volumétrico de agua,  $q_r$  [ $T^{-1}$ ] engloba los términos fuente/sumidero y  $t$  [T] denota tiempo.

Combinando las expresiones anteriores, se obtiene la llamada ecuación de flujo:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K}\nabla h] + q_r \quad (3)$$

Como se esbozó en la introducción, es conocido que la conductividad hidráulica depende del grado de saturación, por lo que, en el ámbito de la modelación en zona no saturada, se suele escribir como el producto de dos componentes:

$$(\mathbf{K})_{ij} = (\mathbf{K})_{ij}^{\text{sat}} K^r(S_w) \quad (4)$$

$$S_w = \frac{\theta}{\phi} \quad (5)$$

donde  $\phi$  [-] denota porosidad,  $\mathbf{K}^s$  es el tensor de conductividad hidráulica correspondiente al estado de saturación y  $K^r$  es una función no lineal, que depende del grado de saturación  $S_w$ . Resulta conveniente definir succión como:

$$\psi = \frac{p}{\rho g} \quad (6)$$

Aplicando las expresiones anteriores, junto con la regla de la cadena a la ecuación (3) se obtiene:

$$\left( \phi \frac{\partial S_w}{\partial \psi} + S_w \frac{\partial \phi}{\partial \psi} \right) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \mathbf{K}(S_w) \nabla(\psi + z) \right] + q_r \quad (7)$$

Por otra parte, la variación del contenido volumétrico de agua en el sistema (3), se produce por dos fenómenos distintos: en primer lugar, por deformación elástica del medio, bien sea ésta por variación de porosidad (cambios en la presión ocasionan modificaciones en la estructura del medio) o por efecto de la compresibilidad del fluido (variaciones de densidad). En segundo lugar, evidentemente, por entradas/salidas de fluido en el medio.

Dado que se ha supuesto nula la variación de la densidad, el cambio en el contenido volumétrico de agua se puede expresar en función del almacenamiento específico  $S_s$ , definido como el volumen de fluido liberado o absorbido por unidad de volumen de acuífero, cuando se produce una variación unitaria en el nivel piezométrico:

$$S_s = \frac{\partial \phi}{\partial \psi} \quad (8)$$

De esta forma, la ecuación (7) se transforma en:

$$\left( \begin{array}{c} \phi \frac{\partial S_w}{\partial \psi} + S_w S_s \\ \partial \psi \end{array} \right) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K} \nabla (\psi + z)] + q_r \quad (9)$$

La resolución analítica de la ecuación anterior no es posible más que en unos pocos casos sencillos, debiendo recurrir a técnicas de resolución numérica. En este caso, se realiza una discretización del modelo, separadamente en el espacio y en el tiempo. En el espacio se discretiza mediante elementos finitos, mientras que el tratamiento temporal se realiza según diferencias finitas ponderadas.

Tras algunas manipulaciones, la ecuación anterior adquiere la expresión siguiente 6, 7, 8.

$$\mathbf{A}(\psi^{k+\varepsilon}) \psi^{k+\theta} + \mathbf{D}(\psi^{k+\varepsilon}) \frac{\psi^{k+1} - \psi^k}{\Delta t} = \mathbf{b}^{k+\theta} \quad (10)$$

donde **A** y **D** son matrices que dependen de la forma de los elementos, de los parámetros de flujo (conductividad hidráulica y almacenamiento específico respectivamente) y del vector variable de estado  $\psi$  a través de las funciones no lineales; **b** es un vector que engloba los términos fuente/sumidero, además de las condiciones de contorno del modelo. En la expresión anterior, la ponderación temporal de la variable de estado se realiza mediante el escalar  $\theta$ , mientras que las matrices **A** y **D** se evalúan con el valor de la misma en el tiempo  $k+\varepsilon$ .

El método utilizado para la resolución de la ecuación (10) es el de Newton-Raphson completo pues, de este modo, la matriz de coeficientes relativa a la solución de los problemas directo e inverso coincide. No obstante, caso de resolverse únicamente el problema directo, pueden usarse otras aproximaciones, menos sofisticadas, como las del método de Newton-Raphson modificado, el método de Picard, etc.

En definitiva, se trata de hallar un vector de incógnitas  $\psi$ , de forma que la función vectorial de error **f** se anule, según la expresión siguiente:

$$\mathbf{f}(\psi^{k+\varepsilon}) = \mathbf{A}(\psi^{k+\varepsilon}) \psi^{k+\theta} + \mathbf{D}(\psi^{k+\varepsilon}) \frac{\psi^{k+1} - \psi^k}{\Delta t} - \mathbf{b}^{k+\theta} = \mathbf{0} \quad (11)$$

El sistema de ecuaciones anterior se resuelve de forma iterativa, hasta conseguir

que la función vectorial de error (11), sea lo suficientemente pequeña. Se toma dicha decisión en función de una serie de tolerancias de convergencia.

### 3.- PROBLEMA INVERSO. FORMULACIÓN

El problema inverso consiste en obtener el mejor estimador de los parámetros de la ecuación que representa el sistema físico, utilizando información previa sobre los mismos (obtenida, por ejemplo, mediante ensayos de laboratorio, documentación al respecto o por experiencia previa), su estructura de correlación y sobre la propia variable de estado.

El problema inverso en el contexto de las aguas subterráneas, consiste en la estimación de los parámetros de un acuífero (bien sean estos físicos, tales como conductividad hidráulica, almacenamiento específico, etc., o empíricos asociados a funciones no lineales), a partir de medidas directas de los mismos y de variables dependientes de los mismos, tales como niveles, concentraciones, etc.

Existen diversas formulaciones del problema inverso<sup>9, 10, 11</sup>. En lo que sigue, se adopta la basada en el método estadístico de la Máxima Verosimilitud, incluyendo información previa sobre los parámetros del modelo<sup>12</sup>. Por completitud, en este apartado se presentan las características básicas de dicha formulación. Para un mayor nivel de detalle, se puede consultar la bibliografía especificada.

La verosimilitud  $L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)$  de una hipótesis sobre los valores de los parámetros  $\mathbf{p}$ , dados los datos  $\mathbf{z}^* = (\mathbf{h}^*, \mathbf{p}^*)$  ( $\mathbf{h}^*$  denota el conjunto de datos de niveles piezométricos, mientras  $\mathbf{p}^*$  denota los referentes a los parámetros del modelo) y una estructura del modelo prefijada, se define como proporcional a  $f(\mathbf{z}^*|\mathbf{p})$ , función de densidad de probabilidad de haber observado  $\mathbf{z}^*$  dados los parámetros  $\mathbf{p}$ . Así, la estimación empleando el método de Máxima Verosimilitud consiste en hallar los parámetros  $\mathbf{p}$ , de forma que  $L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)$  sea máxima. Para completar los datos, es necesario especificar el vector  $\mathbf{z}^*$  y la estructura de correlación o de error entre las componentes de dicho vector.

En adelante, se supondrá que la estructura de dicho error se aproxima por una distribución multi-Gaussiana con media nula, con lo que quedará perfectamente definida mediante la matriz de covarianza. Esta hipótesis se basa en el teorema del límite central, según el cual, la distribución de un gran número de pequeños errores aleatorios (en este caso, errores de medida), se puede aproximar mediante una distribución multi-Gaussiana. Además, la hipótesis de multinormalidad permite el cálculo de intervalos de confianza de la estimación de los parámetros y la realización de tests de significación<sup>9</sup>, si bien esto también puede realizarse adoptando otras distribuciones estadísticas.

Es conveniente suponer la matriz de covarianza como:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_h &= \sigma_h^2 \mathbf{V}_h \\ \mathbf{C}_i &= \sigma_i^2 \mathbf{V}_i \end{aligned} \quad (12)$$

donde  $\mathbf{C}_h$  y  $\mathbf{C}_i$  son las matrices de covarianza de los niveles observados y la asociada al tipo  $i$ -ésimo de parámetro, respectivamente;  $\mathbf{V}_h$  y  $\mathbf{V}_i$  son matrices conocidas y definidas positivas y  $\sigma_h^2$  y  $\sigma_i^2$  son escalares desconocidos.

Con las hipótesis anteriores y suponiendo la distribución multi-Gaussiana antes comentada, la verosimilitud de  $\mathbf{p}$  dado  $\mathbf{z}^*$ , se expresa como:

$$L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} |\mathbf{C}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mathbf{z}^*)^t \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{z}-\mathbf{z}^*)\right\} \quad (13)$$

siendo  $N$  el número total de datos disponibles y  $\mathbf{C}$  la matriz de covarianza. En general, dado que las medidas de niveles y la información previa sobre los parámetros no están correlacionadas, puede suponerse que la matriz  $\mathbf{C}$  presenta la siguiente estructura:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_h & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_p \end{pmatrix} \quad (14)$$

donde la matriz  $\mathbf{C}_p$  incluye las correlaciones entre todos los parámetros y es diagonal por bloques, suponiendo que las estimaciones previas de los diferentes parámetros no estén correlacionadas.

Hallar el máximo de  $L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)$  es equivalente a hallar el mínimo de:

$$S = -2\ln(L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)) \quad (15)$$

Se denota como  $J_h$  y  $J_i$  las contribuciones de los niveles y de la información previa asociada al  $i$ -ésimo tipo de parámetro:

$$\begin{aligned} J_h &= (\mathbf{h}-\mathbf{h}^*)^t \mathbf{V}_h^{-1}(\mathbf{h}-\mathbf{h}^*) \\ J_i &= (\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_i^*)^t \mathbf{V}_i^{-1}(\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_i^*) \end{aligned} \quad (16)$$

Así, sustituyendo sustituye las expresiones anteriores en (15), se obtiene que:

$$S = \frac{J_h}{\sigma_h^2} + \sum_i \frac{J_i}{\sigma_i^2} + \ln|\mathbf{V}_h| + \sum_i \ln|\mathbf{V}_i| + n_h \ln \sigma_h^2 + \sum_i n_i \ln \sigma_i^2 + N \ln(2\pi) \quad (17)$$

donde  $n_h$  es el número de datos de niveles y  $n_i$  el número de datos sobre el tipo de parámetro  $i$ -ésimo.

Suponiendo conocida la estructura de correlación (matrices  $\mathbf{C}_h$  y  $\mathbf{C}_i$ ), la expresión anterior se reduce a:

$$S = J_h + \sum_i \lambda_i J_i + \text{constante} \quad (18)$$

$$\lambda_i = \frac{\sigma_h^2}{\sigma_i^2} \quad (19)$$

En este caso, la formulación del problema inverso, según el método de la Máxima Verosimilitud, se reduce a la minimización de la expresión (18), convirtiéndose en un problema de optimización. Para ello, se ha adoptado el método de Marquardt<sup>13, 14</sup>, si bien existen numerosas alternativas como el método de Simulated Annealing<sup>15, 16</sup>, métodos híbridos<sup>17, 18</sup>, etc.

#### 4.- DESCRIPCIÓN DE LAS FUNCIONES NO LINEALES DE VAN GENUCHTEN

Van Genuchten<sup>1</sup> formuló, de forma empírica, dos tipos de funciones no lineales, una para la conductividad hidráulica (en función del grado de saturación) y otra para el grado de saturación (en función de la presión). A continuación se describen dichas funciones y sus parámetros asociados.

La conductividad hidráulica relativa se calcula como (recuérdese la expresión (4)):

$$K^r(S_w) = \sqrt{\frac{S_w - S_{\min}}{S_{\max} - S_{\min}}} \left[ 1 - \left( 1 - \left( \frac{S_w - S_{\min}}{S_{\max} - S_{\min}} \right)^{1/\lambda} \right)^\lambda \right]^2 \quad (20)$$

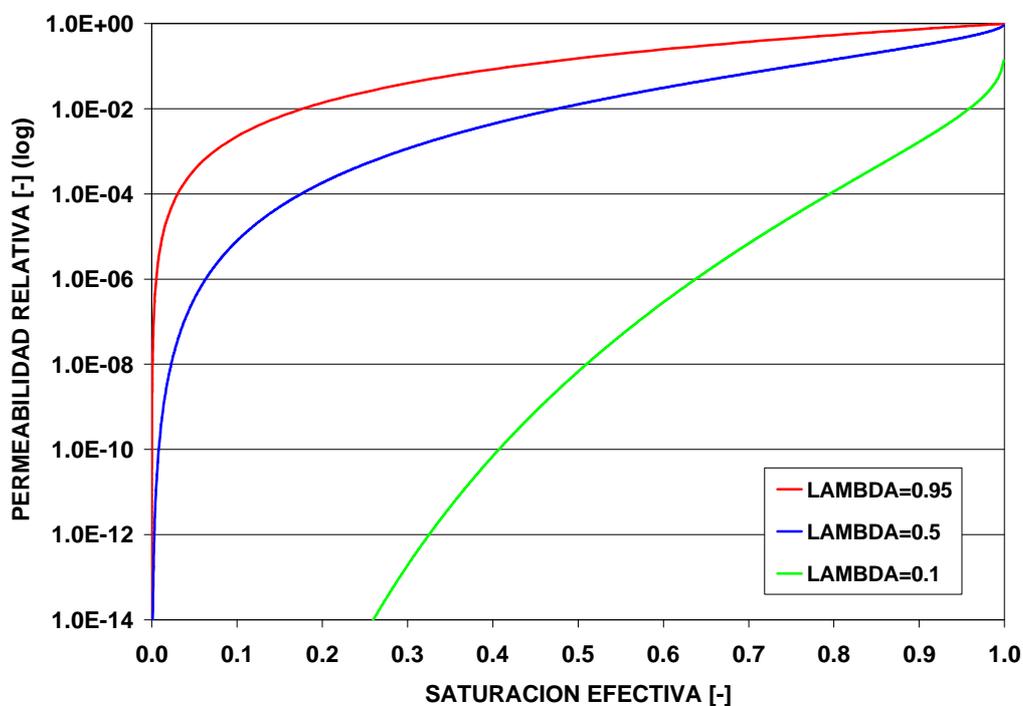
donde  $S_w$  es el grado de saturación del medio,  $S_{\max}$  y  $S_{\min}$  son las saturaciones máxima y mínima, respectivamente y  $\lambda$  es un parámetro empírico que controla la forma más o menos abrupta de la curva. El grado de saturación viene dado por la expresión:

$$S_w(p) = S_{\min} + (S_{\max} - S_{\min}) \left[ 1 + \left( \frac{p}{p_c} \right)^{1-\lambda} \right]^{-\lambda} \quad (21)$$

donde  $p_c$  es un valor umbral de presión, conocido como presión de entrada o de burbujeo. Esta última representa el valor mínimo de la presión de la fase gaseosa en el medio, para que ésta penetre en los poros del mismo, desplazando así la fase fluida (inicio del proceso de desaturación) <sup>5</sup>. En forma gráfica, podemos observar la sensibilidad de ambas curvas al parámetro empírico  $\lambda$  donde, por comodidad, se utiliza en el eje horizontal de las gráficas la saturación efectiva, definida como:

$$S_e = \frac{S_w - S_{\min}}{S_{\max} - S_{\min}} \quad (22)$$

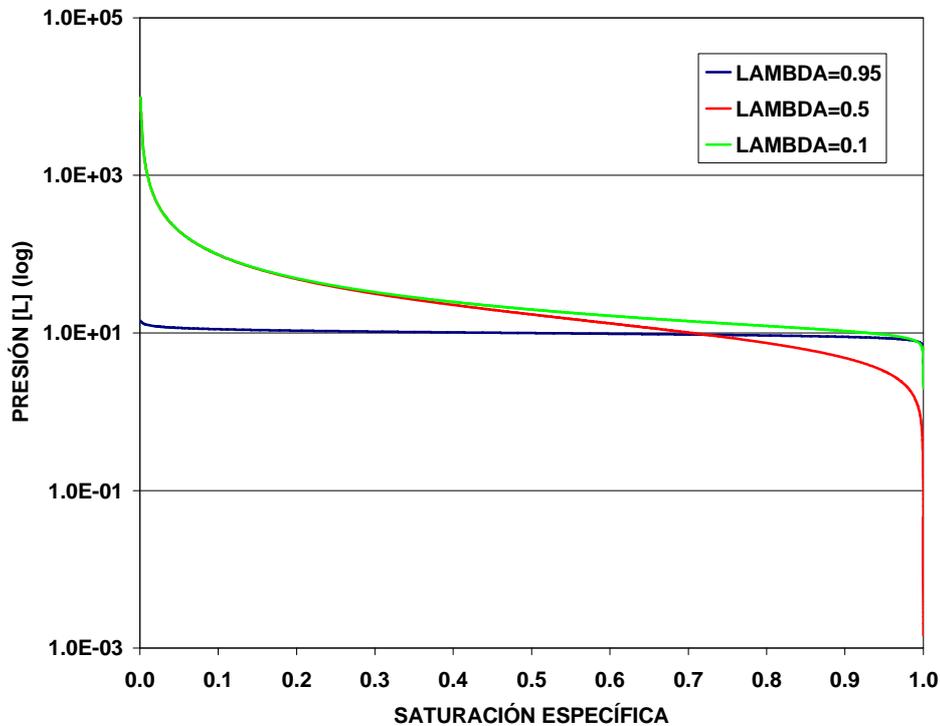
Obsérvese que la última expresión adquiere valores entre 0 y 1, correspondiendo el primer valor al estado de saturación mínima y el segundo al de saturación máxima.



**Figura 1.** Sensibilidad de la permeabilidad relativa al parámetro empírico  $\lambda$ .

Considérese, por ejemplo, un valor de 0.95 para la saturación específica. La permeabilidad relativa del medio adquiere valores de 0.85, 0.45 y  $7 \cdot 10^{-3}$  para valores del parámetro específico 0.95, 0.5 y 0.1, respectivamente. Esto implica que una reducción del valor de  $\lambda$  implica una reducción de la permeabilidad total del medio, si se mantienen inalterados el resto de condiciones y parámetros.

Considérese ahora un valor 0.1 para la saturación específica. La succión adquiere valores de unas pocas atmósferas (próximos a la presión de entrada) para un valor elevado del parámetro empírico (0.95), mientras que la succión es muy elevada para valores inferiores del mismo (0.5 y 0.1). En la figura 2 se observa la gran sensibilidad de la variable de estado al valor del parámetro específico.



**Figura 2.** Sensibilidad de la curva de retención al parámetro  $\lambda$

Para este tipo de funciones no lineales, el parámetro  $\lambda$  podría considerarse como una medida de la velocidad de saturación del medio: un valor del parámetro próximo a cero implica que el medio no comienza a saturarse (succión próxima a cero) hasta que el grado de saturación es próximo al máximo (la saturación efectiva tiende a la unidad). En cambio, un valor de  $\lambda$  próximo a la unidad permite que el medio comience a saturarse para valores de saturación efectiva inferiores.

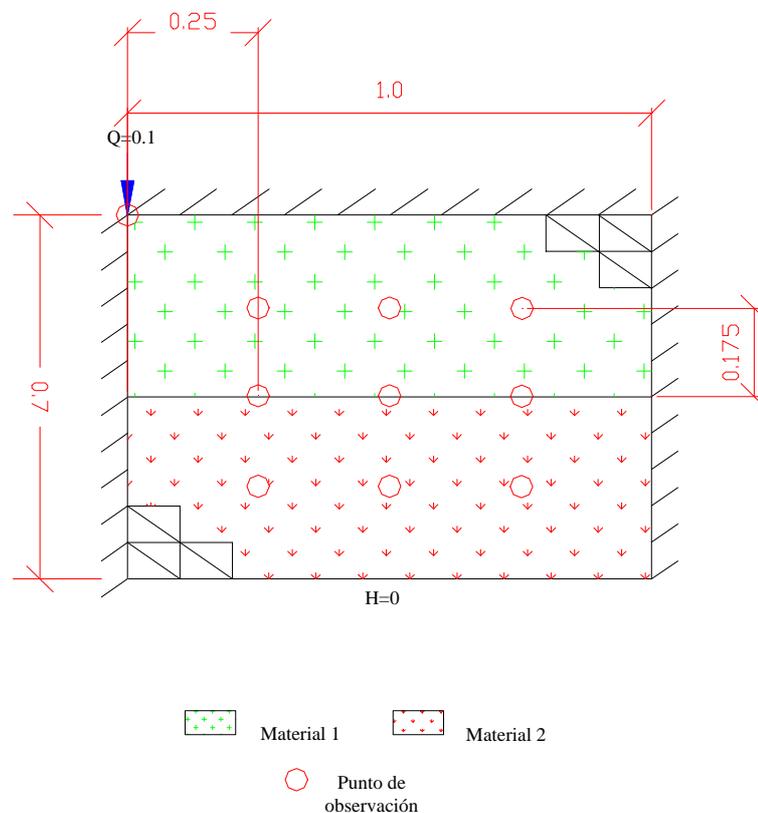
## 5.- EJEMPLO

La metodología descrita se aplica a la modelación de la infiltración de agua en una sección de  $1 \times 0.7$  de superficie (en adelante se trabajará con unidades genéricas y se supondrá una profundidad unitaria en la tercera dimensión), en estado inicial no

saturado, con un nivel piezométrico inicial definido por la función  $h=-y$ , siendo  $y$  la coordenada del punto. Se considera una condición de contorno de nivel nulo en el borde inferior, mientras que el resto se consideran impermeables. Por otra parte, en la sección se produce una entrada de agua constante en el tiempo, en su esquina superior izquierda, de valor  $10^{-1} [L^3T^{-1}]$ . El medio está formado por dos materiales, cuyos parámetros son los descritos en la siguiente tabla:

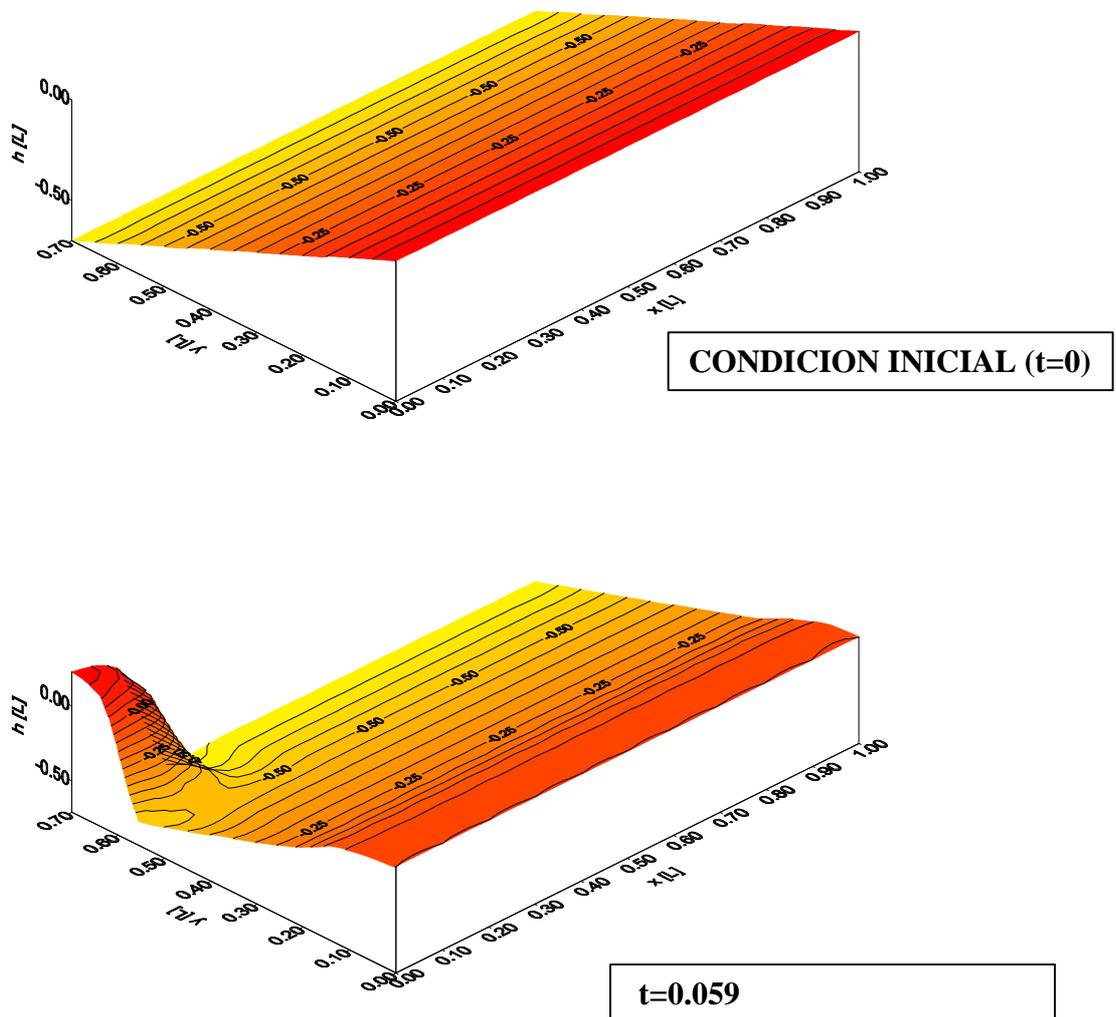
Parámetro / material	Material superior	Material inferior
Cond. hidr. estado saturado	1.0	0.5
Almacenamiento específico	1E-6	1E-6
Parám empírico $\lambda$	0.6	0.5
Saturación mínima	0.0	0.0
Saturación máxima	1.0	1.0
Presión de burbujeo	0.1	0.1
Porosidad	0.5	0.4

Tabla 1. Parametrización del modelo



**Figura 3.** Geometría del modelo, condiciones de contorno y distribución de los puntos de observación.

La discretización espacial se realiza mediante doscientos elementos triangulares, tal y como se esboza en la figura anterior. El intervalo de tiempos de simulación es de 0.1 [T], suficiente para que el medio se sature (parcialmente). Los resultados de la simulación se presentan en la figura siguiente, para el tiempo inicial y uno próximo a éste ( $t=0.059$ ).



**Figura 4.** Distribución de niveles piezométricos para  $t=0$  y  $t=0.059$

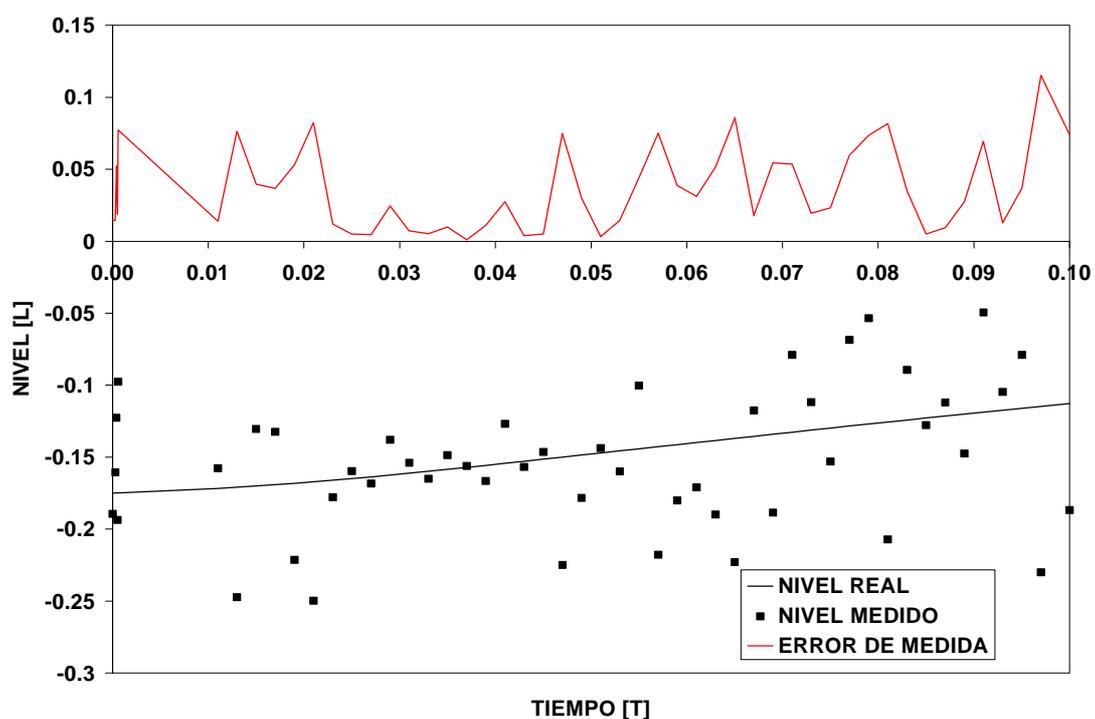
En la figura anterior se puede apreciar cual es la evolución del nivel piezométrico (eje vertical) en la sección. En ella se distingue claramente la posición y el efecto de la inyección de agua. Obsérvese que, para un tiempo próximo al inicial ( $t=0.059$ ), la parte del medio colindante al punto de inyección ya se ha saturado.

El propósito de este ejercicio es hallar una estimación para los parámetros empíricos de las funciones no lineales que caracterizan los materiales, más en particular, para los parámetros  $\lambda$ , dada la alta sensibilidad de la variable de estado a estos, como se comentó en el apartado anterior.

La metodología empleada <sup>19</sup> para la calibración de los parámetros inciertos se puede resumir en dos pasos. Primero, a partir de la estructura del modelo antes comentada (considerada como “real”), se resuelve el problema directo o simulación, obteniéndose el valor de la variable de estado en todos los puntos de la malla de elementos finitos (valores “reales”) y, en particular, en la red de puntos de observación dispuesta en la Figura 3.

Dado que todo proceso de medida está sujeto a error, los valores “medidos” se obtienen añadiendo a los “reales” una componente aleatoria, representando el error de medida. En este caso, dicho error se representa mediante una distribución Gaussiana de media nula y desviación impuesta (valores de 0.01 y 0.05) en virtud, de nuevo, del teorema del límite central.

En la siguiente figura se observa la magnitud del error de medida para el punto de inyección, con una desviación de 0.05.



**Figura 5.** Evolución del nivel calculado vs nivel medido. Error de medida

En el caso de estudio se dispone de un total de 500 medidas de niveles piezométricos, correspondientes a 10 puntos de observación y 50 tiempos de medida. En cuanto a los valores iniciales de los parámetros a calibrar, se toman unos muy distintos a aquellos supuestos como “reales” (los que dieron lugar a los niveles “reales”). La desviación estándar considerada para estos es de 0.1.

Los resultados se presentan en la tabla siguiente, donde se puede observar que, pese a la disparidad entre los valor “reales” de los parámetros y los impuestos inicialmente, el algoritmo consigue alcanzar los valores “óptimos” de los parámetros (bajo ambas hipótesis de nivel de error).

Se presentan resultados bajo cuatro hipótesis distintas: en primer lugar, considerando o no información previa sobre los parámetros a estimar, y cada una de éstas, bajo dos niveles distintos de error de medida en los niveles piezométricos.

<b>Variable/hipótesis</b>	<b><math>\sigma=0.01</math></b>	<b><math>\sigma=0.05</math></b>
<b>Función objetivo total (final)</b>	533.6	712.6
<b>Func. obj. de parámetros (final)</b>	0.539	179.6
<b>Func. obj. óptima (valor esperado)</b>	534	534
<b>Norma del gradiente (final)</b>	10.81	419.0
<b>Parám. inicial (zona sup.)</b>	0.3500	0.3500
<b>Parám. calibrado (zona sup.)</b>	0.5975	0.5937
<b>Parám. inicial (zona inf.)</b>	0.3500	0.3500
<b>Parám calibrado (zona inf.)</b>	0.5016	0.4537
<b>Número de iteraciones p. inverso</b>	16	29
<b>Número de iteraciones p. directo</b>	11465	18721

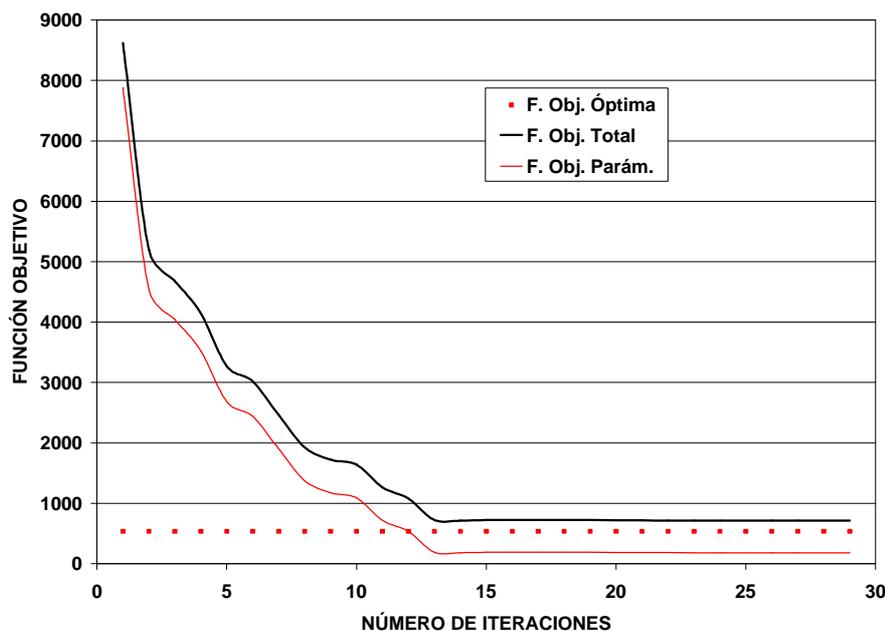
**Tabla 2.** Resultados obtenidos considerando información previa sobre los parámetros a estimar.

<b>Variable/hipótesis</b>	<b><math>\sigma=0.01</math></b>	<b><math>\sigma=0.05</math></b>
<b>Función objetivo total (final)</b>	533.0	532.9
<b>Func. obj. óptima (valor esperado)</b>	534	534
<b>Norma del gradiente final</b>	10.81	5.934
<b>Parám. inicial (zona sup.)</b>	0.3500	0.3500

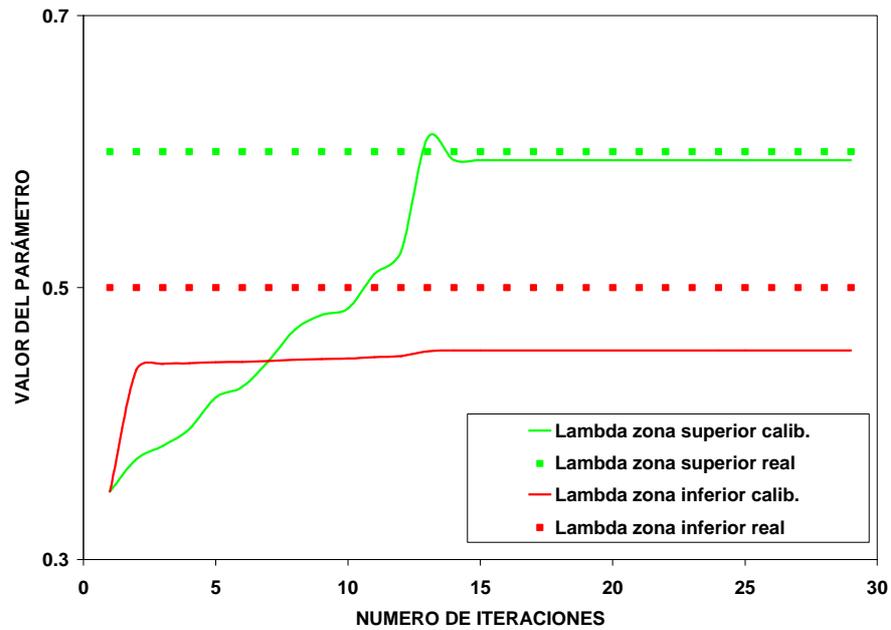
<b>Parám. calibrado (zona sup.)</b>	0.5975	0.5889
<b>Parám. inicial (zona inf.)</b>	0.35	0.35
<b>Parám calibrado (zona inf.)</b>	0.5016	0.4533
<b>Número de iteraciones p. inverso</b>	16	17
<b>Número de iteraciones p. directo</b>	11465	12073

**Tabla 3.** Resultados obtenidos sin considerar información previa sobre los parámetros a estimar

En las tablas anteriores, se entiende por valor “óptimo” de la función objetivo, aquel que se obtiene por simulación del modelo real, utilizando como medidas los datos “perturbados” (medidos) de nivel piezométrico. A continuación se presentan los resultados de forma gráfica, bajo la hipótesis supuesta en la tabla 2, con errores de medida correspondientes a una desviación  $\sigma=0.05$ .



**Figura 6.** Evolución del valor de la función objetivo, en función del número de iteraciones efectuadas por el método de Marquardt.



**Figura 7.** Historia de parámetros estimados, en función del número de iteraciones efectuadas por el método de Marquardt.

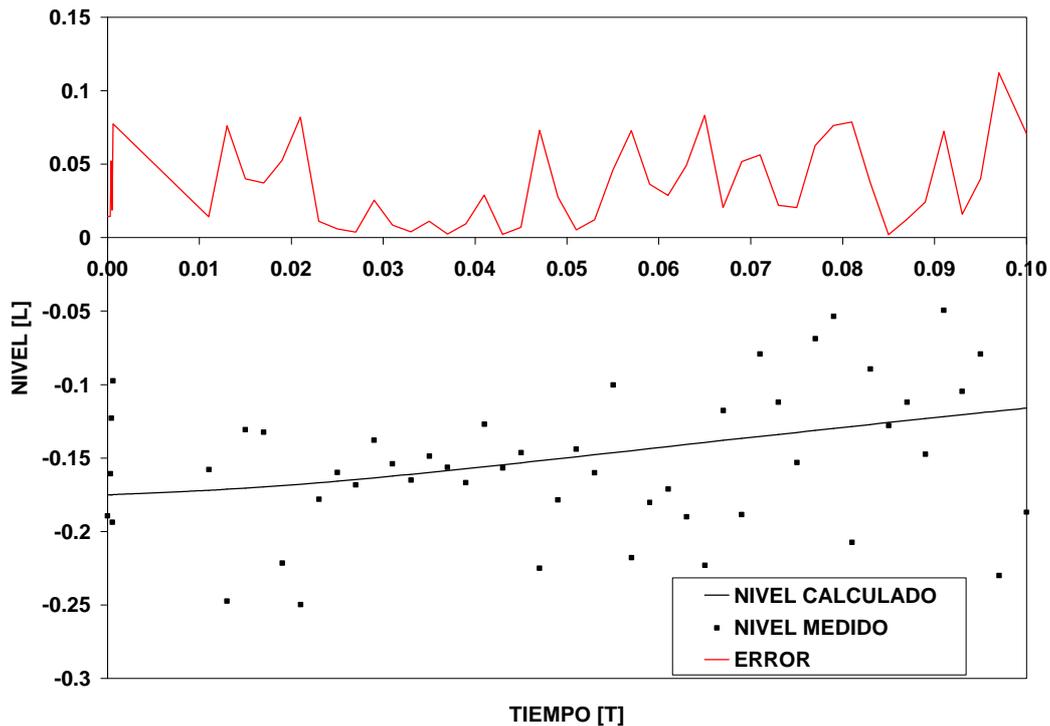
Los resultados reflejan como, para el caso de estudio, el uso de la información previa sobre los parámetros a estimar resulta irrelevante, hecho atribuible a que, dada la cantidad de datos de nivel piezométrico disponibles, dicha información resulta innecesaria. Asimismo, se observa como, en los cuatro casos, se consigue alcanzar un valor (final) muy similar en cuanto a los parámetros a calibrar.

Además, la calidad de la calibración puede contrastarse mediante la comparación de los niveles medidos con los calculados tras el proceso de calibración.

Se presenta a continuación una de estas gráficas, obtenida bajo la hipótesis de información previa y error de medida de niveles piezométricos correspondiente a una desviación de 0.05, así como una tabla resumen con información sobre los errores (tras la calibración) en los puntos de observación para dicha hipótesis.

	mín (h-h*)	máx (h-h*)	(1/n) · Σ (h-h*)	σ	mín  h-h*	máx  h-h*	(1/n) · Σ  h-h*	σ (abs.)
<b>P 1</b>	-0.1363	-0.0427	-0.0080	0.3712	0.0427	0.1363	0.0438	0.2122
<b>P 2</b>	0.0144	0.0708	0.0045	0.3227	0.0144	0.0708	0.0362	0.1991
<b>P 3</b>	-0.0502	0.0108	0.0045	0.3946	0.0108	0.0502	0.0455	0.2302
<b>P 4</b>	0.0144	0.0586	-0.0076	0.4123	0.0144	0.0586	0.0475	0.2453
<b>P 5</b>	-0.0588	-0.0403	-0.0093	0.3490	0.0403	0.0588	0.0410	0.2048
<b>P 6</b>	-0.1246	0.0243	-0.0032	0.3416	0.0243	0.1246	0.0383	0.2091
<b>P 7</b>	-0.0237	0.0140	0.0083	0.3101	0.0140	0.0237	0.0346	0.1995
<b>P 8</b>	-0.0691	-0.0397	-0.0053	0.3409	0.0397	0.0691	0.0400	0.1936
<b>P 9</b>	0.0303	0.1000	0.0032	0.4600	0.0303	0.1000	0.0519	0.2780
<b>P 10</b>	-0.0986	0.0590	-0.0049	0.3720	0.0590	0.0986	0.0409	0.2362

**Tabla 4.** Errores (tras la calibración) en los puntos de observación, bajo la hipótesis de existencia de información previa sobre los parámetros a calibrar y un error de medida correspondiente a una desviación de 0.05. Se presentan, de izquierda a derecha, el mínimo y máximo error cometido en cada uno de los puntos de observación, el error medio por pozo y su desviación (se repiten los mismos cálculos, pero en valor absoluto).



**Figura 8.** Errores de calibración para un punto de observación

## 6.- CONCLUSIONES

Se ha presentado una metodología para la estimación de parámetros empíricos asociados a funciones a no lineales, mediante el empleo del método estadístico de Máxima Verosimilitud, incluyendo información a priori sobre los parámetros a estimar. Este método termina reduciéndose a la minimización de la llamada función objetivo, operación realizada mediante el método de Marquardt (minimización sin restricciones).

Se aplica dicha metodología a la estimación de los parámetros empíricos que aparecen en las funciones no lineales formuladas por Van Genuchten. Tras analizar las respuestas del modelo, resulta evidente la elevada sensibilidad de la respuesta del mismo al valor de dichos parámetros y, por tanto, el uso de una estimación adecuada de dichos valores resulta crucial en la modelación en zona no saturada.

Como ilustran los resultados anteriormente expuestos, la metodología se muestra válida para la obtención de dichas estimaciones. No obstante, y debido al uso de un método de minimización sin restricciones, pueden obtenerse valores sin sentido (ni físico ni matemático) para alguno de estos parámetros. Así, una posible respuesta frente a la calibración de un grado de saturación puede ser un valor mayor que la unidad. Resulta pues necesario, el uso de algoritmos de minimización con restricciones, así como el desarrollo de nuevas técnicas de optimización a tal efecto.

## AGRADECIMIENTOS

El trabajo del primero de los autores fue financiado por ENRESA. Asimismo, ambos dejan constancia expresa de su gratitud al Dr. Agustín Medina.

## REFERENCIAS

- [1] M. Th. Van Genuchten & D. R. Nielsen, "On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils", *Ann. Geophys.*, **3**, 615-628 (1985).
- [2] P. Broadbridge & I. White, "Constant rate rainfall infiltration: a versatile nonlinear model. 1. Analytic solution". *Water resources research* , **24** (1), 145-154 (1988).
- [3] W.J. Rawls & D.L. Brakensiek, "Estimation of soil water retention and hydraulic properties", de *Unsaturated Flow in Hydrologic Modelling. Theory and practice*, Kluwer Academic Publishers, 275-300 (1989).
- [4] G. Galarza, A. Medina & J. Carrera, *Transin III. Fortran code for solving the coupled non-linear flow and transport inverse problem. User's guide*, de *El Berrocal Project. Topical Reports*, ENRESA, 424-680 (1996).
- [5] G.F. Pinder & W.G. Gray, *Finite element simulation in surface and subsurface hydrology*. Academic Press, Inc. (1977)
- [6] G. Galarza, *Calibración automática de parámetros en problemas no lineales de flujo y transporte*. Tesis Doctoral, ETSICCPB-UPC, (1993)
- [7] J. Bear, *Dynamics of fluids in porous media*, Dover Publications (1972).
- [8] P.S. Huyakorn & G.F. Pinder, *Computational methods in subsurface flow*. Academic Press, Inc. (1983)
- [9] S. Finsterle & J. Najita, "Robust estimation of hydrogeologic model parameters", *Water Resources Research*, Vol. **34** (11), pp.2939-2947 (1998).
- [10] A. Medina, *Estimación conjunta de parámetros de las ecuaciones de flujo y transporte*, Tesis Doctoral, ETSICCPB-UPC, (1993)
- [11] J. Carrera & S.P. Neuman, "El problema inverso de la hidrología subterránea. Estado del arte y método de solución", *Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería*, **2**(1) , 3-25 (1986).
- [12] J. Carrera & S.P. Neuman, " Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, I. Maximum Likelihood Method Incorporating Prior Information. *Water Resources Research*, Vol. 22, No.2, (1986) 211-227
- [13] Marquardt, D. W. "An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters." *Journal of SIAM*, Vol. 11, 2, (1963).

- [14] Alcolea, A. *Método híbrido entre Marquardt y Simulated Annealing para la resolución del problema inverso. Aplicación a Hidrología Subterránea*. ETSICCPB-UPC, (1999)
- [15] van Laarhoven, P. J. M. & Aarts, E. H. L., *Simulated Annealing; Theory and Applications*, Kluwer Academic Publishers, (1987).
- [16] Deutsch, C.V. "Conditioning reservoir models to well test information, *Geoenvl-Geostatistics for environmental Applications*, Kluwer Academic Publishers, Vol 2, (1996), 351-361.
- [17] Alcolea, A., Medina, A. & Carrera, J. "A hybrid Marquardt-Simulated Annealing method for solving the groundwater inverse problem", *publicado provisionalmente en Preproceedings del Congreso Model-Care'99. Calibration and reliability in groundwater modelling*, Vol I, (1999), 190-199. Aceptado para la versión final, en preparación.
- [18] Renyuan, T. et al., "Combined strategy of Improved Simulated Annealing and Genetic algorithm for Inverse Problem", *IEEE Transactions on Magnetics*, **32** (1), 1326-1330 (1992).
- [19] Alcolea, A., Medina, A. "Estimación de parámetros específicos asociados a funciones no lineales", *Proceedings del Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería*. Publicación en CD-ROM.