

Calibración del Modelo Hidrogeológico del Acuífero de Bucaramanga a través del Software
PEST y FloPy

Laura Melissa Argüello Rey

Trabajo de Grado para Optar el Título de Ingeniera Civil

Director:

Wilfredo Del Toro Rodríguez

MSc. en Geotecnia

Codirector:

Óscar Sánchez

Ingeniero Civil

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingeniería Físicomecánicas

Escuela de Ingeniería Civil

Bucaramanga

2021

Tabla de Contenido

	Pág.
Introducción	11
1 Objetivos	14
1.1 Objetivo General.....	14
1.2 Objetivos Específicos	14
2 Marco Teórico	15
2.1 Aguas Subterráneas	15
2.1.1 Acuíferos	16
2.1.2 Carga Hidráulica (H).....	17
2.1.3 Conductividad Hidráulica (K)	19
2.2 Modelo Conceptual	20
2.3 Modelo Matemático	22
2.3.1 Modelo Matemático Numérico.....	22
2.3.2 Ecuación Gobernante para el Flujo de Agua Subterránea	23
2.4 MODFLOW 6	25
2.5 FloPy	27
2.6 Calibración y Problema Inverso.....	29
2.6.1 Análisis de Sensibilidad	31

2.6.2	Estimación de Parámetros: Coincidencia Automatizada	31
2.6.3	Calibración de un Modelo Altamente Parametrizado con Inversión Regularizada ..	34
2.6.4	Función Objetivo (φ)	35
2.6.5	Matriz Jacobiana.....	37
2.6.6	Descomposición de Valores Singulares (SVD).....	38
2.6.7	Parámetros Base y Súper Parámetros.....	39
2.6.8	Gauss-Levenberg-Marquardt (GLM).....	41
2.6.9	Regularización de Tikhonov.....	43
2.6.10	Puntos Piloto	47
2.7	Software de Estimación de Parámetros: PEST.....	49
2.7.1	PEST++	50
2.7.2	PESTPP-GLM.....	51
2.7.3	pyEMU	52
2.8	ParaView.....	54
3	Metodología	55
3.1	Caso de Estudio	55
3.2	Construcción del Modelo Numérico en MODFLOW 6.....	57
3.3	Calibración	65
3.4	Análisis de Sensibilidad	69
3.5	Montaje 3D del Modelo: ParaView	70

4 Resultados	77
4.1 Construcción del Modelo Numérico en MODFLOW 6.....	77
4.2 Calibración	79
4.3 Análisis de Sensibilidad	85
4.4 Montaje 3D del Modelo: ParaView	90
5 Discusión y Conclusiones	94
6 Recomendaciones	98
Referencias Bibliográficas.....	100
Apéndices	105

Lista de Tablas

	Pág.
Tabla 1 Conductividad hidráulica inicial asignada al modelo hidrogeológico	60
Tabla 2 Estadísticas de los residuales obtenidos por el modelo calibrado en PEST++	82
Tabla 3 Sensibilidad promedio y parámetro de mayor influencia en las capas del modelo	86

Lista de Figuras

	Pág.
Figura 1 Figura de gradiente hidráulico basado en dos puntos de medida	18
Figura 2 Modelo conceptual genérico de un gran valle ribereño con terrazas	21
Figura 3 Volumen elemental representativo ($\Delta x \Delta y \Delta z$)	24
Figura 4 Ejemplo básico de un modelo de aguas subterráneas	28
Figura 5 Gráfico de dispersión del ajuste simulado al observado de los niveles de agua	33
Figura 6 Representación de la función objetivo como superficie y líneas de contorno	42
Figura 7 Diagrama de Pareto	45
Figura 8 Ejemplo de ubicación de puntos piloto	48
Figura 9 Coordenadas y delimitación de la zona de estudio	56
Figura 10 Fondo de la capa 1: Limos Rojos del modelo hidrogeológico	59
Figura 11 Conductividad hidráulica horizontal en m/s para la capa 1: Limos Rojos	61
Figura 12 Dominio y carga hidráulica asignada en la capa 2: Gravoso	62
Figura 13 Dominio y carga hidráulica asignada en la capa 4: Órganos	63
Figura 14 Ubicación de los puntos de observación de carga hidráulica	64
Figura 15 Ubicación de puntos piloto en el dominio de la capa 2: Gravoso	67
Figura 16 Archivos de entrada cargados en ParaView sin modificar	72
Figura 17 Vista en planta del modelo en 3D con escala aumentada en el eje z	73
Figura 18 Profundidad del modelo en 3D con escala aumentada en el eje z	73
Figura 19 Carga hidráulica simulada, paquetes RIV y NPF en 3D	74

CALIBRACIÓN DE UN MODELO HIDROGEOLÓGICO EN PEST Y FLOPY	7
Figura 20 Cortes realizados en el montaje 3D del modelo hidrogeológico	75
Figura 21 Corte 2 realizado a la carga hidráulica simulada	76
Figura 22 Resultados del flujo subterráneo en la capa 2, antes de la calibración	77
Figura 23 Resultados del flujo subterráneo en la capa 4, antes de la calibración	78
Figura 24 Variación de Phi en función de las ejecuciones del modelo	80
Figura 25 Representación gráfica de los resultados obtenidos en la calibración del modelo	81
Figura 26 Conductividad hidráulica horizontal después de la calibración en la capa 4	83
Figura 27 Resultados del flujo subterráneo en la capa 2, después de la calibración	84
Figura 28 Resultados del flujo subterráneo en la capa 4, después de la calibración	85
Figura 29 Sensibilidades promedio de los puntos piloto en la capa 2	87
Figura 30 Sensibilidades promedio de los puntos piloto en la capa 4	88
Figura 31 Residuales obtenidos para cada observación	89
Figura 32 Vista en planta en 3D del modelo calibrado en ParaView	90
Figura 33 Corte 1 en la carga hidráulica simulada del modelo calibrado en 3D	91
Figura 34 Corte 2 en la carga hidráulica simulada del modelo calibrado en 3D	91
Figura 35 Corte transversal al eje z para HK del modelo calibrado en 3D	92
Figura 36 Corte transversal al eje z para VK del modelo calibrado en 3D	93

Lista de Apéndices

	Pág.
Apéndice A. Fondo de las capas del modelo hidrogeológico	105
Apéndice B. Conductividad hidráulica horizontal del modelo sin calibrar	106
Apéndice C. Conductividad hidráulica vertical del modelo sin calibrar	107
Apéndice D. Condiciones de frontera y dominio del modelo hidrogeológico	108
Apéndice E. Carga hidráulica y dirección de flujo del modelo sin calibrar	109
Apéndice F. Variación de Phi con respecto al valor inicial	110
Apéndice G. Observaciones identificadas en la capa 2 y capa 4	111
Apéndice H. Residuales obtenidos en los puntos de observación de H	112
Apéndice I. Conductividad hidráulica horizontal del modelo calibrado	113
Apéndice J. Conductividad hidráulica vertical del modelo calibrado	114
Apéndice K. Carga hidráulica y dirección de flujo del modelo calibrado	115
Apéndice L. Condiciones de frontera y H del modelo calibrado en ParaView	116
Apéndice M. Líneas de contorno de H del modelo calibrado en ParaView	117
Apéndice N. Contorno de H y malla del dominio del modelo calibrado en ParaView	118

Resumen

Título: Calibración del Modelo Hidrogeológico del Acuífero de Bucaramanga a través del Software PEST y FloPy*

Autora: Laura Melissa Argüello Rey**

Palabras clave: Calibración, Modelamiento de Aguas Subterráneas, Flujo en Estado Estacionario, Python, Análisis de Sensibilidad, Software Libre.

Descripción:

La programación del modelo hidrogeológico en estado estacionario para la meseta de Bucaramanga del presente estudio se desarrolla a partir de un modelo conceptual existente que, con el apoyo de herramientas informáticas avanzadas de software libre como FloPy, MODFLOW 6, pyEMU y PEST++ logra construirse y calibrarse en el lenguaje de Python para evaluar el comportamiento del sistema con determinadas condiciones de frontera, conductividad hidráulica y medidas en campo de carga hidráulica. A través de las simulaciones del modelo construido se logra identificar una disminución de carga hidráulica más abrupta en relación con la carga hidráulica simulada del modelo calibrado, en donde esta última demuestra una disminución gradual al obtenerse conductividades hidráulicas más altas en ciertas áreas del dominio de las capas que conforman el modelo calibrado.

Los resultados de la calibración permitieron determinar que el ajuste alcanzado es aceptable y se logra comparar estadísticamente el modelo calibrado de manera automatizada frente al mismo modelo calibrado manualmente, obteniendo una disminución igual a 92.67% del residual promedio con respecto a la calibración manual. La sensibilidad del modelo es evaluada antes y después de la calibración, identificando la conductividad horizontal como el parámetro que más influye en los resultados del modelo y un montaje tridimensional de este mismo es realizado en el software libre ParaView.

*Trabajo de Grado para Optar el Título de Ingeniera Civil.

** Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas. Escuela de Ingeniería Civil. Director: Wilfredo Del Toro Rodríguez, MSc. en Geotecnia. Codirector: Óscar Sánchez, Ing. Civil.

Abstract

Title: Hydrogeological Model Calibration of the Bucaramanga Aquifer through the PEST and FloPy Software*

Author: Laura Melissa Argüello rey**

Keywords: Calibration, Groundwater Modelling, Steady-State Flow, Python, Sensitivity Analysis, Free Software.

Description:

The programming of a steady-state hydrogeological model for the Bucaramanga plateau in the present study is developed from an existing conceptual model that, with the support of advanced free software computing tools such as FloPy, MODFLOW 6, pyEMU and PEST++, is successfully built and calibrated in the Python language to evaluate the behavior of the system with certain boundary conditions, hydraulic conductivity, and field measured hydraulic heads. The model simulations allowed the identification of an abrupt decrease of the hydraulic head in relation to the simulated hydraulic head from the calibrated model, in which the latter shows a gradual decrease as higher hydraulic conductivities are obtained in certain areas of all the layers within the domain of the calibrated model.

Calibration results allowed to determine that the fit is acceptable, as well as performance comparisons statistically of the automated calibrated model versus the same model manually calibrated, obtaining a decrease equal to 92.67% of the average residual with respect to the manual calibration. Model sensitivity is evaluated by comparing the sensitivities obtained before and after calibration, identifying the horizontal conductivity as the parameter that most influences the modelling results, and a three-dimensional assembly of the model is accomplished in the ParaView software.

* Research Work to Opt for the Civil Engineer Degree.

**Faculty of Physical-Mechanical Engineering. School of Civil Engineering. Director: Wilfredo Del Toro Rodríguez, MSc. in Geotechnics. Co-director: Óscar Sánchez, B. Eng.

Introducción

Las aguas subterráneas son un recurso natural que representan cerca del 95% del agua dulce en el mundo (excluyendo los casquetes polares), que resulta de la filtración del agua producto de la precipitación, pasando a través del subsuelo y rocas que actúan como filtros antes de llegar a un acuífero, por lo que es un recurso abundante, renovable (NGWA, s/f) que se caracteriza por su alta calidad y pureza. El rol dominante de los recursos de aguas subterráneas es relevante para continuar el abastecimiento pues este es uno de los cuerpos de agua que incluyendo lagos, ríos y reservorios está sujeto a influencias antropogénicas o con uso intencional para lograr las actividades que aportan al desarrollo y crecimiento de la población humana (UNESCO/WHO/UNEP, 1992). Sin embargo, el constante empleo de las aguas superficiales para abastecer las necesidades ha impactado en la abundancia, calidad y disponibilidad de estas mismas, dando paso a emplear como alternativa las aguas subterráneas las cuales, a nivel nacional como se afirma por Minambiente (s/f):

constituyen un recurso que día a día adquiere mayor importancia, pues son reconocidas tanto por ser fuentes alternas de aprovechamiento en cuencas con acceso limitado de aguas superficiales, como por su influencia en obras civiles, túneles y carreteras, proyectos mineros, entre otros.

El desarrollo sustentable de los recursos hídricos subterráneos y su manejo dependen del conocimiento de los acuíferos, recarga, descarga y almacenamiento considerando el crecimiento demográfico, la demanda para su potabilización y el cambio climático (UNESCO, 2019). De aquí la necesidad por contribuir a su investigación para que a largo plazo se pueda crear e implementar

una adecuada gestión que garantice un mejor uso, cuidado y aprovechamiento al comprender el comportamiento de los sistemas de recurso hídrico que se encuentran en el subsuelo, pues aún carece de estudio y exploración.

Para tener una aproximación a este sistema natural y lograr el estudio de su funcionamiento, es posible la construcción de un modelo hidrogeológico numérico, el cual es creado a partir de un modelo hidrogeológico conceptual que logra simplificar un sistema que se aproxima a cómo este funciona en la realidad al recolectar datos e información de campo que permiten un mejor entendimiento del sistema de agua subterránea (Woessner et al., 2015). En este caso, se recurre a metodologías avanzadas de estimación de parámetros hidrogeológicos por medio de software que permita desarrollar los procesos de estas funcionalidades de manera automatizada. Las calibraciones ayudan a reducir las incertidumbres al ajustar los datos, lo que más adelante permite realizar pronósticos de lo que no podría ocurrir en un futuro en el sistema que se está estudiando, analizar su comportamiento y en base a esto poder apoyarse en la toma de decisiones ambientales basadas en el comportamiento del sistema físico en estudio (Doherty, 2020d). Herramientas computacionales como PEST soportan modelos de aguas subterráneas y superficiales, posibilitando la calibración de modelos altamente parametrizados, que aplica métodos matemáticos para conceder como resultado una única respuesta en la calibración optimizando la precisión y el tiempo de ejecución (Doherty, 2020d).

En el presente proyecto de investigación se busca contribuir al desarrollo de un modelo numérico del acuífero de Bucaramanga en estado estacionario, haciendo uso del software libre MODFLOW 6 (Langevin et al., 2020) y la librería de FloPy (Bakker et al., 2021), y su calibración realizada en el también software libre PEST++ (White et al., 2020) y pyEMU (White et al., 2016),

todo desarrollado principalmente en lenguaje de Python, favoreciendo así el alcance de una herramienta viable que permita conocer el comportamiento del flujo y posiblemente pueda ser la base para el desarrollo de próximos estudios ingenieriles e hidrogeológicos dentro de la zona de estudio.

En Antolínez (2014) se describe un modelo conceptual y numérico que fue calibrado manualmente para el acuífero de Bucaramanga tomando como base principal esta información previa para el desarrollo de este proyecto de investigación considerada en conjunto para suministrar los principales datos de entrada para la construcción y calibración del modelo en Python. Se resume el proceso de la construcción y ejecución en Python del modelo de aguas subterráneas y se representan los resultados del modelo gráficamente. Posteriormente, una vez generados los archivos de salida de la ejecución del modelo, se inicia el proceso de calibración con información de campo disponible proveniente de la misma fuente de información previa, y se utilizan los resultados del modelo como datos de entrada en el software PEST++ a través del módulo de Python, pyEMU. De estos resultados se evalúa la sensibilidad del modelo, y finalmente, se representa el modelo hidrogeológico reconstruido en vista tridimensional a través del software libre ParaView, mostrando el montaje realizado en el proceso de modelamiento.

1 Objetivos

1.1 Objetivo General

Realizar la calibración del modelo de aguas subterráneas del acuífero de Bucaramanga a través del software PEST y FloPy para garantizar el mejor ajuste a los datos y el modelo conceptual existente.

1.2 Objetivos Específicos

- Reconstruir el modelo hidrogeológico de Bucaramanga en el software MODFLOW a partir de un modelo conceptual previamente creado y FloPy.
- Ejecutar la estimación automática de parámetros por medio del software PEST y pyEMU.
- Evaluar la sensibilidad de los parámetros para obtener información estadística cuantitativa del modelo.
- Generar la visualización tridimensional de los resultados a través del software ParaView.

2 Marco Teórico

2.1 Aguas Subterráneas

Las aguas subterráneas según Geoscience Australia (s/f) se definen como:

Cuando llueve, parte del agua que cae fluye a través de la superficie de la tierra y se acumula en ríos, lagos y eventualmente en el océano. Otra parte del agua se filtra en el suelo y se acumula dentro de las grietas o poros de las rocas (acuíferos), formando recursos de agua subterránea, que a su vez también desembocan en ríos, lagos o el océano.

Las aguas subterráneas pueden moverse tanto verticalmente como horizontalmente. El agua que se mueve hacia abajo también puede encontrarse con rocas y suelos no porosos más densos y resistentes al agua, lo que hace que fluya de una manera más horizontal, generalmente hacia arroyos, océano o más profundamente en el suelo. El agua que se mueve bajo tierra depende de la permeabilidad (qué tan fácil o difícil es para el agua moverse) y de la porosidad (la cantidad de espacio abierto en el material) de la roca subterránea. Si la roca tiene características que permiten que el agua se mueva con relativa libertad a través de ella, entonces el agua subterránea puede moverse distancias significativas en varios días (U.S. Geological Survey, s/f).

2.1.1 Acuíferos

En la hidrogeología se conoce como un acuífero a un volumen subterráneo de roca y arena que contiene agua, siendo esta agua almacenada una parte importante del ciclo hidrológico, pues además se considera que cerca del 30% del caudal superficial proviene de fuentes hídricas que se encuentran en el subsuelo (Ordóñez, 2011, pág. 10).

La parte superior del nivel del agua en un acuífero se llama nivel freático. En ciertas áreas, el agua podría atravesar el suelo del acuífero, mientras que en otras entra por juntas y grietas en las rocas donde se desplaza hacia abajo hasta encontrar rocas menos permeables (Salako & Adepelumi, 2018, pág. 12).

Los acuíferos pueden ser clasificados en dos categorías principales, acuíferos confinados y acuíferos no confinados (Salako & Adepelumi, 2018, pág. 13):

- **Acuíferos confinados**

Según Ordóñez (2011) los acuíferos confinados “Son aquellos cubiertos por una capa impermeable confinante. El nivel de agua en estos acuíferos está por encima del techo de la formación acuífera” (pág. 10).

Las barreras geológicas que no son permeables y que se encuentran entre el acuífero hacen que el agua dentro de él esté bajo una presión que es comparativamente mayor que la presión atmosférica. El flujo de agua subterránea a través de los acuíferos es vertical u horizontal a tasas a menudo influenciadas por la gravedad y las formaciones geológicas en estas áreas (Salako & Adepelumi, 2018, pág. 13).

- **Acuíferos no confinados**

Los acuíferos no confinados se encuentran ubicados cerca de la superficie terrestre y no tienen capas impermeables sobre el nivel freático, aunque se encuentran relativamente por encima de capas de rocas de arcilla impermeables. El límite superior del agua subterránea dentro del acuífero no confinado es el nivel freático (Salako & Adepelumi, 2018, pág. 13-14).

2.1.2 Carga Hidráulica (H)

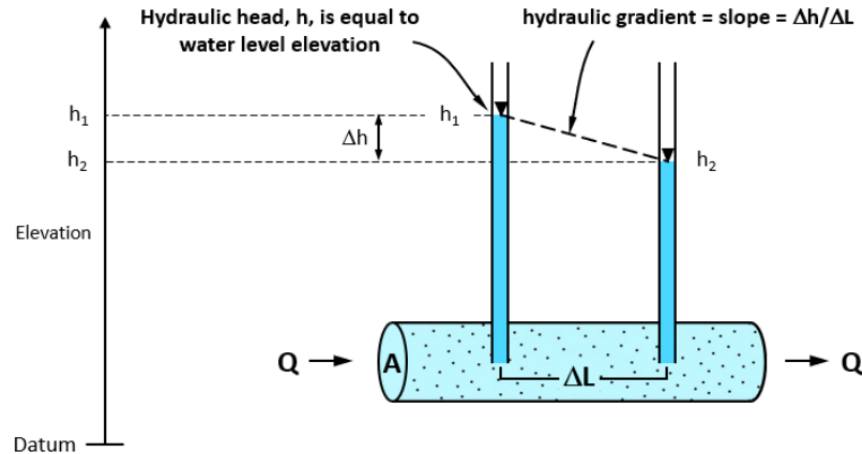
La característica esencial de un sistema acuífero es el equilibrio entre las entradas, las salidas de flujo y la cantidad de agua almacenada. Generalmente no es posible medir las velocidades de aguas subterráneas dentro de un acuífero. Sin embargo, se pueden construir piezómetros de observación (pozos) para determinar la elevación del nivel del agua en el piezómetro. Este nivel del agua proporciona información sobre la altura del agua subterránea en la sección abierta del piezómetro. Por lo tanto, carga hidráulica del agua subterránea para un volumen elemental en un acuífero es la altura en la cual el agua se elevará en un piezómetro o pozo de observación en relación con el sistema de referencia (Rushton, 2003, pág. 10).

La Ley de Darcy es fundamental para entender y predecir el comportamiento del flujo de agua subterránea y es la base para interpretar mediciones como los niveles de agua en los pozos.

La Figura 1 es una representación abreviada que describe la Ley de Darcy (Cohen & Cherry, 2020, pág. 2-3):

Figura 1

Figura de gradiente hidráulico basado en dos puntos de medida



Nota: Estableciendo un dato arbitrario en la elevación $z = 0$ (por ej., el nivel medio del mar), las elevaciones del agua en los piezómetros son h_1 y h_2 y la distancia entre los piezómetros es ΔL . El gradiente hidráulico es definido por la distancia entre los piezómetros y la diferencia en carga hidráulica. Tomada de *Conceptual and Visual Understanding of Hydraulic Head and Groundwater Flow* (pág. 3) por Cohen, A. J. B., & Cherry, J. A, 2020, en The Groundwater Project (gw-project.org).

La Ley de Darcy establece que el caudal volumétrico, Q , es proporcional a la diferencia en la altura hidráulica ($h_2 - h_1$) a lo largo de un intervalo de longitud, denominado ΔL y también, proporcional a un coeficiente K que se refiere a la conductividad hidráulica, el cual explica la restricción de flujo impuesta por el medio y la densidad y viscosidad del fluido que fluye a través del medio poroso y el área de la sección transversal perpendicular a la dirección del flujo. Esta ley está expresada en la siguiente Ecuación 1 (Cohen & Cherry, 2020):

$$Q = -K * \frac{(h_2 - h_1)}{\Delta L} * A \quad (1)$$

2.1.3 Conductividad Hidráulica (K)

La conductividad hidráulica, K, es una constante de proporcionalidad que se puede conceptualizar como la relativa facilidad de paso del fluido a través de un material poroso. Esta constante de proporcionalidad tiene dirección y magnitud y se representa como un vector; sin embargo, también es posible presentarlo como un valor escalar (Woessner & Poeter, 2021).

Esta es una propiedad del suelo que mide la capacidad de este mismo para transmitir fluido a través de espacios porosos y fracturas. La conductividad hidráulica es un parámetro que influye en gran medida la simulación de agua subterránea (Lin et al., 2017). Como se expone en Woessner & Poeter (2021) la conductividad hidráulica se puede obtener matemáticamente a partir de la Ecuación 1, obteniendo la siguiente Ecuación 2:

$$K = -Q * \frac{\Delta l}{\Delta h * a} \quad (2)$$

Las unidades de la conductividad hidráulica pueden ser deducidas a partir de la Ecuación 2. Esta se expresa entonces en las unidades L/T, como se muestra en la siguiente Ecuación 3 (Cohen & Cherry, 2020):

$$\frac{L}{T} : \frac{L^3}{T} * \frac{L}{LL^2} \quad (3)$$

Por lo tanto, la constante de proporcionalidad, K , tiene unidades de velocidad (por ej., metros/segundos, metros/día). Sin embargo, K no es una velocidad, en vez de eso K representa las propiedades de transmisión del material poroso. Si el agua pasa fácilmente a través de un material poroso, este es escrito como alta conductividad hidráulica; si lo opuesto ocurre, se tiene baja conductividad hidráulica. Estas condiciones son también referidas como permeable o de baja permeabilidad, respectivamente (Woessner & Poeter, 2021, pág. 42).

2.2 Modelo Conceptual

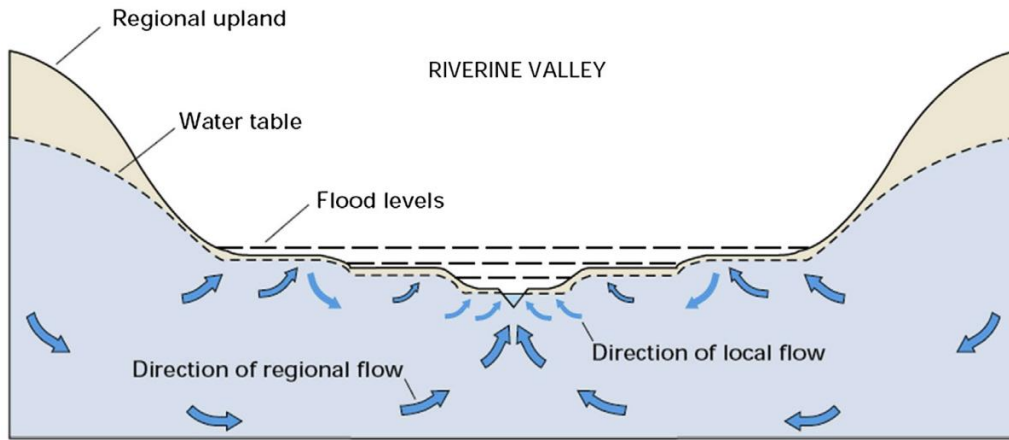
Un modelo conceptual de un sistema de agua subterránea simplifica y resume lo que se conoce sobre la hidrogeología en forma de texto escrito, diagramas de flujo, secciones transversales, diagramas de bloques, y tablas. Es una expresión del estado actual y pasado del sistema basado en la información de campo del lugar y el conocimiento disponible en sitios similares (Woessner et al., 2015, pág. 5).

Para resolver cualquier problema específico de agua subterránea del sitio en estudio, el hidrogeólogo debe reunir y analizar datos de campo relevantes y articular aspectos importantes del sistema de agua subterránea. Un modelo conceptual se construye generalmente para un entorno hidrogeológico específico del sitio, pero también se puede construir para un entorno geológico genérico (Woessner et al., 2015, pág. 29).

Como se describe en Woessner et al. (2015) un ejemplo de un modelo conceptual genérico se muestra en la siguiente Figura 2:

Figura 2

Modelo conceptual genérico de un gran valle ribereño con terrazas



Nota: Como se observa en la figura, los procesos pueden ser simplificados al identificar la dirección del flujo subterráneo, niveles de inundación, la capa freática del agua subterránea y su geología general para representar la complejidad del comportamiento del sistema real a través de un modelo conceptual. Tomada de *Applied Groundwater Modeling — Simulation of Flow and Advective Transport* (pág. 29) por Woessner et al., 2015, en ELSEVIER ([https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)).

La mayoría de los problemas de las aguas subterráneas se abordan con un modelo matemático desarrollado a partir de modelo conceptual. En general, cuanto más se aproxime el modelo conceptual a la situación de campo, es más probable que el modelo numérico dé pronósticos razonables. El nivel de detalle necesario está determinado por el propósito del modelado, los datos de campo disponibles y los límites prácticos de la complejidad de construcción en el modelo numérico, además es deseable que el modelo conceptual sea simplificado para incluir sólo aquellos procesos importantes para abordar el propósito y que aun así tenga la suficiente complejidad para representar

comportamientos relevantes del sistema. Si es necesario, más complejidad puede ser agregada más adelante en el proceso de modelamiento (Woessner et al., 2015, pág. 29-30).

2.3 Modelo Matemático

Los modelos matemáticos, se dividen en dos tipos; modelos basados en datos o modelos basados en procesos. El modelo basado en datos calcula variables desconocidas a través de ecuaciones empíricas o estadísticas. Por otro lado, los basados en procesos usa procesos y principios de la física para representar el flujo de agua subterránea dentro del dominio del problema. Un modelo de flujo de agua subterránea matemático basado en procesos consiste en una *ecuación gobernante* que describe los procesos físicos dentro del dominio del problema; condiciones de frontera que especifican la cargas hidráulicas o flujos a lo largo de los límites del dominio; y para problemas dependientes del tiempo, condiciones iniciales que especifican cargas hidráulicas dentro del dominio del problema al comienzo de la simulación. Los modelos matemáticos se pueden resolver analítica o numéricamente (Woessner et al., 2015).

2.3.1 Modelo Matemático Numérico

Los modelos numéricos utilizan una forma aproximada de la ecuación gobernante del flujo de agua subterránea para calcular la carga hidráulica en ubicaciones específicas, además, una solución numérica no es continua en el espacio ni tiempo. En un modelo numérico la carga hidráulica se calcula en puntos discretos (también llamados nodos) del espacio y para determinados valores de tiempo. Sin embargo, los modelos numéricos pueden resolver la ecuación gobernante

3D, transitoria, heterogénea y anisotrópica (Ecuación 4) bajo condiciones iniciales y de frontera complejas. Los métodos numéricos más comúnmente usados en modelamiento de aguas subterráneas son basados en el método de diferencias finitas (DF) o el método de elementos finitos (EF). Debido a su versatilidad, los modelos DF y EF se utilizan con mayor frecuencia para resolver problemas de aguas subterráneas. Al implementar el uso de códigos (tales como Python) se pueden procesar los datos de entrada de un modelo específico por medio de programas computacionales resolviendo ecuaciones basadas en procesos que describen justamente los procesos de aguas subterráneas (Woessner et al., 2015).

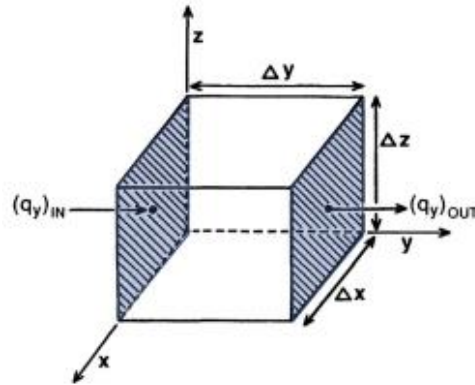
2.3.2 Ecuación Gobernante para el Flujo de Agua Subterránea

Un modelo matemático para flujo de agua subterránea consiste en una ecuación gobernante (derivada de la conservación de masa y Ley de Darcy) que representa los procesos dentro del dominio, condiciones de frontera y condiciones iniciales del modelo hidrogeológico. La ecuación gobernante que se presenta más adelante es la que se usa con más frecuencia en el modelado y representa el flujo de un fluido de una sola fase (agua) a densidad constante en un medio poroso continuo según la Ley de Darcy (Woessner et al., 2015).

La ecuación gobernante se deriva tradicionalmente refiriéndose al flujo de agua a través de un cubo de material poroso que es lo suficientemente grande para ser representativo de las propiedades del medio poroso pero lo suficientemente pequeño como para que el cambio de altura dentro del volumen sea relativamente pequeño. Este cubo de material poroso se conoce como volumen elemental representativo con volumen igual a $\Delta x \Delta y \Delta z$ (Woessner et al., 2015), y se muestra en la siguiente Figura 3:

Figura 3

Volumen elemental representativo ($\Delta x \Delta y \Delta z$)



Nota: El volumen representativo muestra las componentes del flujo a lo largo del eje y. Tomada de *Applied Groundwater Modeling — Simulation of Flow and Advective Transport* (pág. 71) por Woessner et al., 2015, en ELSEVIER ([https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)).

Es a través de este volumen elemental representativo que se obtiene la ecuación gobernante para el flujo de agua subterránea, su análisis permite considerar el flujo a través de los ejes x, y, z, así como también la conservación de la masa, la cual requiere un balance hídrico dentro del volumen. Al considerar el volumen elemental representativo, se puede obtener la ecuación gobernante general (ecuación diferencial) que representa el flujo de agua subterránea transitorio tridimensional (3D) para condiciones heterogéneas y anisotrópicas (Woessner et al., 2015). La ecuación gobernante para el flujo de aguas subterráneas es extraída de Woessner et al. (2015) presentada a continuación, en la Ecuación 4:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} - W^* \quad (4)$$

Donde la variable de interés, h , es la variable dependiente mientras que x , y , z y t son las variables independientes y K_x , K_y , K_z , S_s y W^* son parámetros. S_s corresponde al almacenamiento específico, W^* representa la tasa cambio de flujo de entrada de fuentes y sumideros, ∂h es el cambio de la carga hidráulica (para los tres ejes), K es la conductividad hidráulica y ∂t es el cambio en el tiempo. Los subíndices de K denotan condiciones anisotrópicas, lo que significa que la conductividad hidráulica puede variar en la dirección x , y , z . La ubicación de K dentro de los signos diferenciales permite una variación espacial (heterogeneidad) en la conductividad hidráulica (Woessner et al., 2015).

2.4 MODFLOW 6

MODFLOW es un modelo de flujo de agua subterránea de código abierto distribuido por el Servicio Geológico de Estados Unidos. Con el tiempo, el creciente interés en las interacciones de las aguas superficiales y subterráneas, el refinamiento local con mallas anidadas y no estructuradas, el flujo de aguas subterráneas kársticas, el transporte de solutos y la intrusión de agua salada, ha llevado al desarrollo de numerosas versiones de MODFLOW.

La versión MODFLOW 6 fue desarrollada para proporcionar una plataforma que pueda soportar múltiples modelos numéricos en una simulación. Estos modelos pueden ser

independientes entre sí sin interacción, pueden intercambiar información entre sí o pueden acoplarse estrechamente agregándolos a la misma solución numérica. También permite que un modelo de agua subterránea a escala regional se pueda combinar con múltiples modelos de agua subterránea a escala local. O, modelos de flujo de agua superficial pueden ser agrupados a múltiples modelos de agua subterránea (Hughes et al., 2017, pág. 2).

MODFLOW 6 contiene el modelo de flujo de agua subterránea (GWF) el cual se basa en un enfoque de diferencia finita de volumen de control generalizado (DFVC) en el que una celda puede conectarse hidráulicamente a cualquier número de celdas circundantes. Los usuarios pueden definir la cuadrícula del modelo usando: (1) una cuadrícula regular que consta de capas, filas y columnas, (2) una cuadrícula en capas definida por pares de vértices como (x, y), o (3) una red general no estructurada. Para problemas complejos que involucran condiciones del nivel freático, se puede activar una formulación llamada Newton-Raphson de manera opcional (Langevin et al., 2020).

El modelo GWF se divide en “paquetes”, siendo esta última, la parte del modelo que se ocupa de manejar un único aspecto de la simulación. Los paquetes en el modelo GWF incluyen aquellos relacionados a cálculos internos de flujo de agua subterránea (discretización, condiciones iniciales, conductancia hidráulica y almacenamiento), paquetes de estrés (cargas hidráulicas constantes, pozos, recarga, ríos, fronteras de carga hidráulica, drenajes y evapotranspiración), y paquetes de estrés avanzados (enrutamiento de caudal, lagos, pozos de múltiples acuíferos y flujo de zona no saturada). Además, el modelo GWF también tiene paquetes para obtener y controlar la salida del modelo (Langevin et al., 2020).

2.5 FloPy

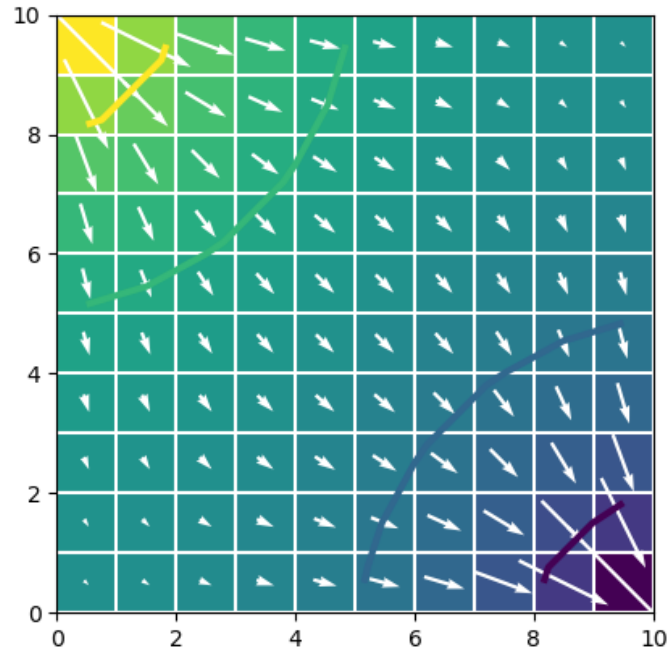
MODFLOW 6 puede ser ejecutado a través de Python haciendo uso de la librería FloPy que incorpora los paquetes, ejecución y posprocesamiento de modelos de MODFLOW y sus demás ejemplares como todas las demás versiones de MODFLOW, MT3DMS, MODPATH o SEAWAT. Las interfaces gráficas de usuario (GUI) son comúnmente usadas para procesar y posprocesar modelos numéricos de aguas subterráneas, sin embargo, a través de lenguaje de programación de Python es una alternativa ventajosa que cuenta con numerosos paquetes disponibles facilitando el proceso de desarrollo del modelo, incluidos los paquetes para el trazado, la manipulación de arreglos numéricos (matrices), la optimización y el análisis de datos, evaluaciones de modelos alternativos y análisis de modelos que pueden ser difíciles de realizar con GUI. Además, los scripts de Python son un registro completo, transparente y repetible del proceso de modelado (Bakker et al., 2016).

FloPy proporciona funcionalidad para la creación de nuevos modelos, así como también trabajar con modelos existentes. El concepto es que el usuario escribe un script para construir, ejecutar y posprocesar el modelo de agua subterránea. El script establece variables de Python para definir la cuadrícula, los parámetros hidrogeológicos, las condiciones iniciales, las condiciones de los límites, los parámetros del solucionador y otra información requerida por el modelo (Bakker et al., 2016, pág. 734).

La siguiente Figura 4 es un ejemplo haciendo uso del paquete FloPy realizado por los desarrolladores Bakker et al. (2021) para mostrar el uso básico de este paquete en MODFLOW 6. Es un modelo que consta de 10 filas y 10 columnas en el que se muestra una capa, el resultado de la variación de la carga hidráulica en el dominio y la dirección del flujo:

Figura 4

Ejemplo básico de un modelo de aguas subterráneas



Nota: En la figura se muestra el resultado de la construcción de un modelo de una capa con 10 filas y 10 columnas haciendo uso del paquete FloPy y MODFLOW versión 6. Tomada de FloPy v3.3.4 — *release candidate: U.S. Geological Survey Software Release* por Bakker et al., 2021, en Repositorio de GitHub (<http://dx.doi.org/10.5066/F7BK19FH>).

Los paquetes de Python para leer y procesar información geoespacial (por ejemplo, archivos tipo shape y rásteres basados en SIG) también se pueden emplear para facilitar la incorporación de datos de propiedad y datos de frontera de una variedad de fuentes. El script puede ser usado para ejecutar el modelo, leer los resultados del modelo, incluida la salida del modelo binario, y realizar cualquier tipo de trazado personalizado. Una vez que se leen los resultados del modelo, muchos otros análisis que utilizan la funcionalidad y los paquetes de Python están disponibles (Bakker et al., 2016, pág. 734).

2.6 Calibración y Problema Inverso

Para juzgar qué tan bien se realizó el paso de un modelo conceptual a un modelo numérico, el desempeño del modelo debe evaluarse utilizando observaciones de campo que se puedan comparar con la salida o resultados del modelo, así como todo lo demás que se conoce sobre el sistema en estudio.

El proceso de calibración optimiza la solución a *problemas inversos* que pueden ser *mal planteados* o *bien planteados*. Un problema es denominado como *inverso* porque lo que es conocido, es decir, los valores medidos en campo también llamados targets, observaciones u objetivos de calibración (por ej., carga hidráulica) deben ser invertidos para encontrar lo que no se conoce (por ej., conductividad hidráulica, recarga, transmisividad o almacenamiento). En otras palabras, al resolver un problema inverso para el flujo de agua subterránea, se pueden encontrar valores para los parámetros porque se asume que las cargas hidráulicas son completamente conocidas (Woessner et al., 2015).

Los problemas mal planteados son aquellos que contienen un gran número parámetros, pero tienen menor cantidad de observaciones (también llamados altamente parametrizados). Esto se soluciona a través de operaciones matriciales y derivadas. Al tener un gran número de ecuaciones generadas a partir de los parámetros a estimar, estas para tener solución requieren de las observaciones. Por lo tanto, no es posible estimar muchos parámetros con pocas observaciones, pues no se tendría una única solución si no, múltiples o infinitas soluciones (Doherty, 2020c).

Un problema bien planteado es aquél que tiene una solución que depende continuamente en los datos y es única. Un problema de modelado puede considerarse una expresión de

múltiples hipótesis de trabajo sobre cómo funciona el sistema natural, donde la evaluación del modelo es una forma de prueba de hipótesis en lugar de una cuestión de encontrar el modelo óptimo. Por lo tanto, el modelo mejor calibrado seleccionado debería idealmente: (1) basarse en el modelo conceptual; (2) utilizar toda la información contenida en las observaciones disponibles; (3) evitar la simplificación inapropiada de los procesos y la estructura del mundo natural que son importantes para los pronósticos de interés; (4) estar suficientemente discretizados en espacio y tiempo; y (5) tener tiempos de ejecución manejables dadas las limitaciones financieras y de tiempo del proyecto (Woessner et al., 2015, pág. 378-379).

El problema inverso se puede resolver de manera indirecta al automatizar el proceso manual de prueba y error donde las propiedades se estiman iterativamente usando regresión estadística y algoritmos computacionales, llamado estimación de parámetros. Para esto se ha logrado desarrollar un código inverso utilizando regresión no lineal con un enfoque ampliado posteriormente al código de estimación de parámetros como PEST, el cual es el paquete de software que actualmente se usa ampliamente para modelado aplicado de aguas subterráneas. Por medio de software como PEST se pueden estimar los parámetros y obtener una única solución al problema inverso, asimismo, resultados en un campo de parámetros de error de varianza mínima al aplicar la técnica de regularización matemática (Doherty, 2020c).

Problemas inversos también han sido abordados aplicando teoría estadística y matemáticas avanzadas para resolver problemas altamente parametrizados (por ejemplo, descomposición de valor singular (SVD) y regularización de Tikhonov), muchos de estos están disponibles en el software libre PEST (Woessner et al., 2015). Una vez realizada la calibración de un modelo se pueden comparar los valores simulados con los datos observados en campo.

2.6.1 Análisis de Sensibilidad

Antes de la amplia disponibilidad de métodos de estimación de parámetros, los modelos de aguas subterráneas se calibraban exclusivamente mediante prueba y error manual. El análisis de sensibilidad se realizaba al fijar todos los parámetros de la calibración en sus valores ya calibrados, excepto el parámetro seleccionado, el cual era variado en ejecuciones secuenciales del modelo aumentando y disminuyendo su valor gradualmente en cierto porcentaje de su valor calibrado, demostrando así qué tanto se desvió el modelo, es decir, los resultados de la calibración por cambios realizados en los parámetros de calibración seleccionados (Woessner et al., 2015).

La estimación de parámetros por medio de software como PEST, ha reducido en gran medida el esfuerzo necesario para realizar análisis de sensibilidad. Actualmente el análisis de sensibilidad de los parámetros utiliza una matriz Jacobiana para desarrollar conocimientos cuantitativos estadísticos sobre el modelo, por lo que hacen innecesario dicho análisis de sensibilidad manual ya que los coeficientes de sensibilidad de los parámetros se calculan automáticamente para todos los objetivos de calibración y se incluyen en la matriz Jacobiana. Por lo tanto, así como el cálculo de la matriz Jacobiana es un paso intermedio hacia la identificación de parámetros, el análisis de sensibilidad de los parámetros es un paso intermedio para encontrar un mejor modelo para obtener los pronósticos (Woessner et al., 2015).

2.6.2 Estimación de Parámetros: Coincidencia Automatizada

La ventaja de la coincidencia automatizada es el poder de los métodos informáticos modernos para aliviar los aspectos laboriosos de la calibración manual de prueba y error

(Woessner et al., 2015), pues este mismo proceso realizado de manera manual puede llegar a ser bastante exhaustivo y riguroso.

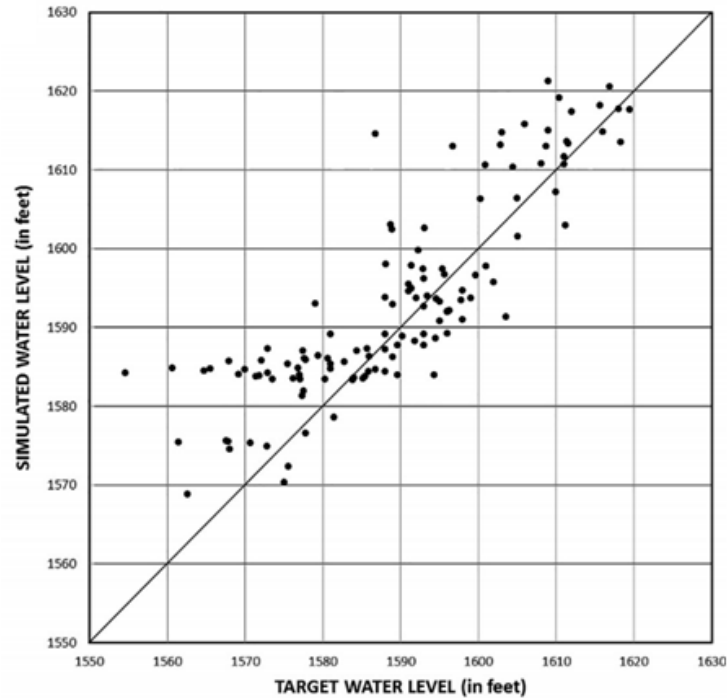
En Antolínez (2014) se expone el proceso de estimación de parámetros a prueba y error manual, para este mismo modelo hidrogeológico del presente proyecto de investigación. Esta estimación de parámetros realizada manualmente consiste en que el modelador cambia manualmente los valores de los parámetros y evalúa los resultados después de cada estimación realizada. Posterior a esto, el proceso central será el pronóstico y estimar la incertidumbre en los pronósticos (Woessner et al., 2015).

Los modelos hidrogeológicos normalmente son complejos pues describen lo más cercano posible el ambiente real. También pueden llegar a ser muy extensos, pueden tener mucha más información por calibrar y, por ende, tomaría mucho más tiempo en realizarse la estimación. Esto también conlleva a que puede ser un trabajo no solo tedioso sino, también costoso. La estimación manual tampoco puede garantizar al modelador que al final se ha encontrado el mejor ajuste posible; lo que puede traer repercusiones en trabajos o proyectos donde se lidiarían con asuntos legales y/o regulatorios (Woessner et al., 2015).

Por lo tanto, el código computacional para la estimación de parámetros ayuda a encontrar los valores de los parámetros de calibración que dan la mejor coincidencia posible con las observaciones de campo (targets u objetivos de calibración) de manera automatizada. En la siguiente Figura 5 presentada en Woessner et al. (2015) se muestra a manera de ejemplo el resultado de una calibración, una de nube de puntos en la gráfica 1:1, que demuestra la relación entre los valores simulados vs. Valores observados. El ajuste “perfecto” es aquel que se acerque más a la línea diagonal:

Figura 5

Gráfico de dispersión del ajuste simulado al observado de los niveles de agua



Nota: La línea de ajuste perfecto 1:1 de la figura también se muestra como referencia para visualizar el sesgo.

Adaptada de *Applied Groundwater Modeling — Simulation of Flow and Advective Transport* (pág. 388) por Woessner et al., 2015, en ELSEVIER ([https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)).

Si el ajuste es inaceptable, el modelador modifica los tipos de objetivos, ponderaciones y parámetros de calibración, lo cual después el proceso de estimación de parámetros es repetido. El modelador también realizará una evaluación de conocimiento blando de la calibración al decidir si los valores de los parámetros calibrados son hidrogeológicamente razonables y se ajustan al modelo conceptual. Si el mejor ajuste del modelo sigue siendo inaceptable, un nuevo modelo conceptual y un nuevo modelo numérico deben ser

formulados y el proceso de calibración, comenzando con la comparación del historial de prueba y error, es repetido (Woessner et al., 2015, pág. 398).

2.6.3 Calibración de un Modelo Altamente Parametrizado con Inversión Regularizada

La regularización inversa permite asignar un gran número de parámetros al dominio del modelo (modelo altamente parametrizado) en donde todos los parámetros son seleccionados como parámetros de calibración (Woessner et al., 2015).

“La regularización inversa es comúnmente empleada cuando el modelo tiene gran variedad de parámetros diferentes o cuando un número de modelos son simulados simultáneamente” (Zhou et al., 2014, pág. 27).

La regularización se desarrolla por medio de métodos matemáticos, principalmente por medio de Tikhonov y descomposición de valores singulares (Singular Value Decomposition: SVD), los cuales pueden proveer una solución de error de varianza mínima al problema inverso. Asimismo, cuando se usan en conjunto, SVD aporta estabilidad numérica y Tikhonov sigue una solución de error de varianza mínimo en maneras más flexibles. Por lo tanto, se puede usar SVD para calcular los parámetros y la regularización de Tikhonov para formular el problema inverso, que es el que permitirá tener un acercamiento más a la realidad geológica y al mismo tiempo alcanzar la estabilidad numérica (Doherty, 2020b), permitiendo generar una mejor ajustada y única respuesta manteniendo la flexibilidad del modelo.

La inversión regularizada consiste en (1) asignar un gran número de parámetros al modelo en donde todos los parámetros se seleccionan como parámetros de calibración y (2) restringir el

conjunto de parámetros más grande con regularización matemática, lo que permite resolver el problema de la estimación de parámetros. Cuando se realiza correctamente, la inversión regularizada proporciona un marco sistemático y cuantitativo para lograr la simplificación de los parámetros. Además, produce un único modelo apropiado de mejor ajuste, estabilizando un problema inverso mal planteado que se requiere para muchos modelos utilizados en la toma de decisiones (Woessner et al., 2015).

2.6.4 Función Objetivo (φ)

Cuando se registran observaciones o datos en campo, algunos valores pueden considerarse como más confiables o precisos a partir del conocimiento previo para mejorar la precisión en la calibración. Para expresar esto en el proceso de calibración es posible asignar un grado de importancia a los valores registrados al asignar ponderaciones a estos datos. Para cumplir este fin existe la función objetivo.

La función objetivo consiste en agregar ponderaciones a las observaciones, por lo que son asignadas en valores más grandes a aquellas en las que se pueden confiar y valores más pequeños a aquellas medidas que no, es decir, las ponderaciones de observación más altas reflejan mayor importancia de la observación en la calibración del modelo. Matemáticamente, estas ponderaciones son usadas para aumentar o disminuir la contribución de los residuales individuales a la suma total del error del modelo, llamado función objetivo, representado como φ (Woessner et al., 2015).

Esta función convierte un problema inverso en un problema lineal o una minimización del problema, con el fin de cumplir con la convergencia suficiente de esta función en el problema de aguas subterráneas asegurando la estabilidad en la estimación de parámetros (Zhou et al., 2014).

La minimización de la función objetivo es un medio para determinar una solución única al problema inverso que equilibra el ajuste del modelo al considerar el conocimiento que se incorpora en un modelo, es decir, a los datos observados y la adherencia al conocimiento blando del sistema (Doherty & Hunt, 2010).

Para encontrar los mínimos de la función, el código de estimación de parámetros realiza una serie de ejecuciones del modelo, cada una con un conjunto diferente de valores para los parámetros de calibración. El algoritmo luego calcula la función objetivo usando una ecuación como (Woessner et al., 2015, pág. 403) la siguiente expresión 5:

$$\varphi_{total} = \sum_{i=1}^n (\omega_i r_i)^2 \quad (5)$$

Donde: $r = h_m - h_s$

Como se muestra en la Ecuación 5, φ se calcula como la suma de los residuales ponderados al cuadrado. Donde r_i se obtiene de la diferencia entre, por ejemplo, la carga hidráulica medida (u observada, h_m) y la carga hidráulica simulada equivalente (h_s) para la i-ésima observación de carga y ω_i es la respectiva ponderación asignada a cada residual. La función objetivo puede expandirse para incluir cualquier tipo de observación, no solo carga hidráulica (Woessner et al., 2015).

2.6.5 Matriz Jacobiana

La matriz Jacobiana también denominada matriz de sensibilidad es el resultado de un conjunto de coeficientes de sensibilidad que forman un arreglo bidimensional de valores de i filas y j columnas. Las cargas hidráulicas, por ejemplo, calculadas utilizando los valores de parámetros iniciales forman la base para la comparación; los cambios en las salidas o resultados obtenidos son calculados al cambiar los valores de los parámetros de sus valores iniciales. Al momento de realizar ese proceso, después de la ejecución inicial, se realiza una serie de ejecuciones en las que cada parámetro individual de calibración es cambiado en una pequeña cantidad (generalmente 1%) y el modelo se ejecuta mientras todos los demás parámetros se mantienen constantes en sus valores iniciales. Los cambios en los valores simulados para cada observación u objetivo ($\Delta observación_i$) son calculados al restar el resultado obtenido en la ejecución con los parámetros perturbados de los resultados obtenidos en la ejecución del modelo con parámetros no perturbados (Woessner et al., 2015). Como se presenta en Woessner et al. (2015), la sensibilidad para el parámetro que fue perturbado se calcula a partir de la Ecuación 6 y se ingresa en la matriz Jacobiana:

$$coeficiente\ de\ sensibilidad_{ij} = \frac{\Delta observación_i}{\Delta parámetro_j} \quad (6)$$

Los elementos de una matriz Jacobiana representan derivadas parciales de los resultados del modelo con respecto a los parámetros del modelo. Cada columna de la matriz Jacobiana contiene derivadas parciales de los resultados del modelo con respecto a un parámetro en particular. Cada fila de una matriz Jacobiana contiene derivadas parciales de una salida del modelo

con respecto a todos los parámetros ajustables. Si un parámetro se denota como transformado logarítmicamente en un archivo de control de PEST, entonces las derivadas parciales contenidas en un archivo de matriz Jacobiana son con respecto al logaritmo de ese parámetro. La matriz Jacobiana se almacena en un archivo binario comprimido llamado *case.jco* donde *case* es el nombre del archivo base de un archivo de control PEST. Los usos a los que se puede asignar un archivo JCO incluyen (1) evaluar las sensibilidades locales de los resultados del modelo a los parámetros y/o variables de decisión, (2) darle a PEST o PEST-GLM una “ventaja” en la calibración de un modelo al proporcionarle una matriz Jacobiana precalculada para usar en su primera iteración, (3) calcular la identificabilidad de los parámetros, incertidumbre predictiva, contribuciones de los parámetros a la incertidumbre predictiva, entre otros (PEST++ Development Team, 2020).

2.6.6 Descomposición de Valores Singulares (SVD)

Cuando se tiene un modelo altamente parametrizado, algunos de estos parámetros serán insensibles y otros altamente correlacionados con otros parámetros. Aunque un parámetro es importante para el objetivo de modelado, no significa que sea capaz de estimarse. Para esto se necesita una herramienta de calibración inteligente como SVD que detecte lo que puede y no puede ser estimado. SVD es una forma de procesar matrices en un conjunto más pequeño de aproximaciones lineales independientes que representan la estructura subyacente de la matriz; llamado método subespacial. SVD utiliza una representación reducida del problema y reconoce que ciertas combinaciones de observaciones son únicamente informativas. La estimación de parámetros basada en SVD fija los valores iniciales de parámetros insensibles y no los usa para el

proceso de la estimación de parámetros. Por lo tanto, las combinaciones de parámetros en la solución espacial se convierten en una parte esencial del proceso de calibración. Ya que las combinaciones de parámetros son usadas en el proceso de estimación de parámetros, la solución del problema inverso es único e incondicionalmente estable. Al usar combinaciones de parámetros, conocidos como *súper parámetros*, el tamaño de la matriz Jacobiana es reducido, así como también el tiempo de procesamiento (Woessner et al., 2015).

Con esta herramienta, si muchas combinaciones de parámetros son estimadas (muchos valores singulares), el problema seguirá siendo mal planteado y numéricamente inestable. Y, si muy pocos parámetros son estimados, el ajuste del modelo puede ser innecesariamente deficiente y los errores de pronóstico pueden ser mayores que para un modelo parametrizado de manera óptima. Por lo tanto, cuando SVD se usa solo, puede resultar en un sobre ajuste, produciendo campos de parámetros calibrados que carecen de características geológicamente realistas. Es por esto por lo que SVD se emplea a menudo en conjunto con la regularización de Tikhonov, pues obtiene distribuciones de parámetros geológicamente realistas debido a limitaciones de conocimiento blando (Woessner et al., 2015).

2.6.7 Parámetros Base y Súper Parámetros

En la descomposición de valores singulares se usa álgebra lineal para la descomposición de matrices; se transmite la máxima información de las observaciones en la menor cantidad posible de coeficientes (parámetros de calibración). Como se menciona anteriormente, la matriz Jacobiana consta de coeficientes de sensibilidad (Ecuación 6) que relacionan todos los parámetros iniciales (es decir, los *parámetros base*) con todas las observaciones. SVD, por lo tanto, opera en la matriz

Jacobiana para dividir el espacio de parámetros en un conjunto de combinaciones de parámetros linealmente independientes (Woessner et al., 2015).

Cada una de estas combinaciones es multiplicada por un factor conocido como valor singular, y se suman para reproducir el campo de parámetros completo. De esta manera, los valores singulares constituyen un conjunto reducido de combinaciones lineales del conjunto completo de parámetros de calibración (llamados como parámetros base) (Woessner et al., 2015, pág. 423).

A pesar de que SVD puede proveer una calibración del modelo único y estable, esta no alivia la alta carga computacional de un alcance altamente parametrizado, pues la matriz Jacobiana completa es calculada para cada iteración de la estimación de parámetros. Antes de iniciar la estimación de parámetros en SVD, un conjunto de *súper parámetros* es definido a partir de las sensibilidades calculadas del conjunto de valores de parámetros de calibración o también llamados parámetros base (Woessner et al., 2015).

Los súper parámetros se componen de combinaciones lineales de parámetros informados por los objetivos de observación, gracias a este proceso, se logra significativamente acelerar el proceso de estimación de parámetros porque una vez definidos por SVD, el número de súper parámetros es menor que el número de parámetros base, pero pueden estimarse como si fueran parámetros base ordinarios. En la matriz Jacobiana, las derivadas se calculan utilizando el número más pequeño de súper parámetros en lugar del conjunto completo de parámetros base. Aunque es posible que una matriz Jacobiana sea calculada a partir de los parámetros optimizados finales, puede que esta sea apreciablemente diferente a la calculada a partir de los valores iniciales, esto es debido a la no linealidad. Si es lo suficientemente diferente, la matriz Jacobiana puede ser recalculada a partir de los valores de los parámetros calibrados, los súper parámetros se redefinen

y se realiza de nuevo otra ejecución de parámetros. Un código de estimación de parámetros como PEST++ automatiza este proceso de relinealización y redefinición de valores singulares en caso de que sea necesario, facilitando esta tarea de verificación al modelador (Woessner et al., 2015).

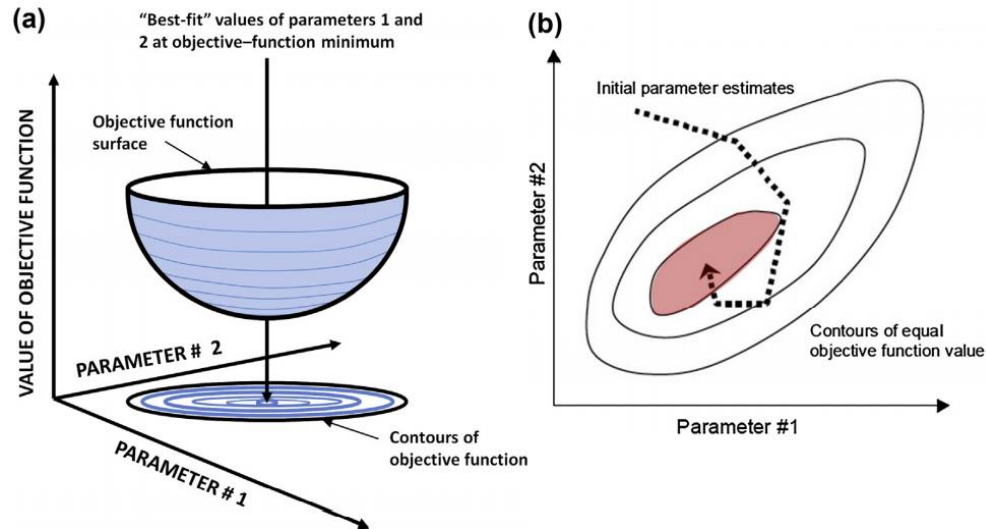
2.6.8 Gauss-Levenberg-Marquardt (GLM)

Un método bastante conocido para buscar el mínimo de φ es el método de Gauss-Levenberg-Marquardt (GLM), el cual asume que los valores de las observaciones simulados varían como una función continua en respuesta a los cambios en los parámetros de calibración. Es decir, este método asume que las entradas (parámetros) y salidas del modelo o resultados (valores simulados) son continuamente diferenciables. En general, la ecuación gobernante del flujo de aguas subterráneas se ajusta a esta suposición (Woessner et al., 2015).

Una manera gráfica de visualizar la función objetivo y la búsqueda de su valor mínimo se representa en la siguiente Figura 6:

Figura 6

Representación de la función objetivo como superficie y líneas de contorno



Nota: (a) Superficie de función objetivo idealizada para un problema de dos parámetros. (b) Mejora en la solución mediante la actualización sucesiva de las iteraciones de estimación de parámetros (mostradas por la línea punteada) que conducen al mínimo de la función objetivo. Adaptada de *Applied Groundwater Modeling — Simulation of Flow and Advective Transport* (pág. 402) por Woessner et al., 2015, en ELSEVIER ([https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)).

El valor de la función objetivo se visualiza fácilmente como contornos de esta misma.

La búsqueda de parámetros óptimos normalmente no es aleatoria; las técnicas de búsqueda no lineales basadas en derivadas utilizadas para la mayoría de los modelos aplicados evalúan las pendientes de la superficie de la función objetivo y ajustan los parámetros para forzar al modelo a progresar hacia el mínimo global de la función objetivo.

Sin embargo, la falta de singularidad inherente a los modelos de aguas subterráneas significa que múltiples combinaciones de parámetros pueden proporcionar ajustes

similares a los objetivos. Cuando se cuentan con dos parámetros, la no singularidad puede ser visualizada como un conjunto de valores óptimos que se encuentran en el “valle” de la función objetivo (Woessner et al., 2015, pág. 403).

2.6.9 Regularización de Tikhonov

La regularización de Tikhonov se involucra en el proceso de estimación de parámetros y es un método que permite la aplicación de conocimiento “blando” (soft knowledge) y “duro” (hard knowledge) del modelador durante este proceso, buscando alcanzar mejor ajuste a los objetivos de calibración (Woessner et al., 2015).

La integridad del proceso de calibración requiere que el conocimiento intuitivo y la experiencia geológica se incorporen al proceso de calibración.

La regularización de Tikhonov proporciona un vehículo para incorporar formalmente esta información "blanda" en el proceso de calibración al aumentar la función objetivo de medida con una función objetivo de regularización que captura la desviación de los parámetros de la condición preferida especificada por el usuario (Doherty & Hunt, 2010, pág. 3).

El conocimiento blando incluye conocimiento intuitivo, juicio profesional, valores de la literatura regional e información de experiencia geológica que a menudo es cualitativa o marginalmente relevante para el sitio que se está modelando (Woessner et al., 2015, pág. 417).

Ya que el conocimiento blando puede ser aplicado a través de la regularización de Tikhonov, existe otro término que describe matemáticamente la función objetivo encontrado en la siguiente Ecuación 7, que refleja la desviación y penalización del conocimiento blando del sistema. Esta expresión como se expone en Woessner et al. (2015) se muestra a continuación:

$$\varphi_{total} = \varphi_{desajuste\ de\ datos} + \varphi_{desviación\ del\ conocimiento\ blando} \quad (7)$$

Al término $\varphi_{desajuste\ de\ datos}$ se le denomina función objetivo de medida y $\varphi_{desviación\ del\ conocimiento\ blando}$ se denomina función objetivo de regularización. Al juntar estos términos se obtiene el valor total de φ que es el valor que se busca minimizar, pues considera no solo la desviación del conocimiento blando sino, también, los residuales de los valores Observados vs. Simulados. De igual manera, como se presenta en Woessner et al. (2015), la anterior expresión (Ecuación 7) puede complementarse para obtener la siguiente Ecuación 8:

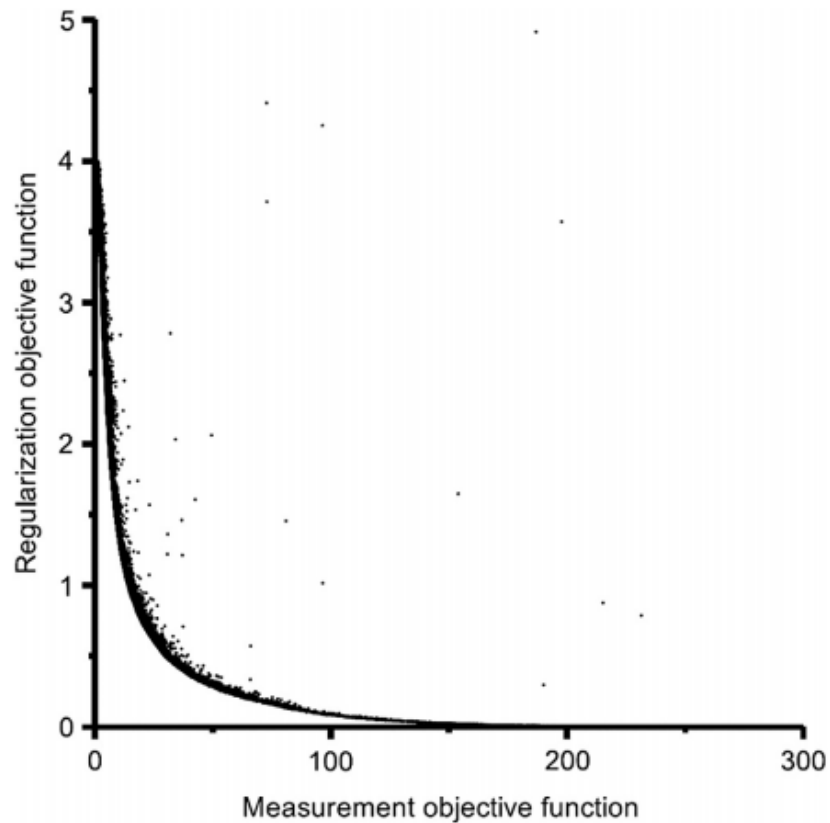
$$\varphi_{total} = \sum_{i=1}^n (\omega_i r_i)^2 + \sum_{j=1}^q (f_j(p)) \quad (8)$$

Donde el segundo término que se añade corresponde a la penalización del conocimiento blando y es la suma de q desviaciones de j condiciones de conocimiento blando, siendo f_j una función de los parámetros del modelo p . El intercambio entre el conocimiento blando y duro se puede mostrar gráficamente, mediante el diagrama de Pareto mostrado en la Figura 7 en donde los

puntos representan múltiples calibraciones realizadas por la regularización de Tikhonov en el mismo modelo, que se fusionan en una línea gruesa (Woessner et al., 2015):

Figura 7

Diagrama de Pareto



Nota: El diagrama de Pareto ilustra la compensación inherente entre un ajuste perfecto (cero en el eje x) y una adherencia en el conocimiento blando del modelador (cero en el eje y). Tomada de *Applied Groundwater Modeling — Simulation of Flow and Advective Transport* (pág. 420) por Woessner et al., 2015, en ELSEVIER ([https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)).

De la figura anterior, las múltiples calibraciones ejecutadas se muestran en el diagrama mediante puntos que se fusionan en la línea gruesa. Por medio del diagrama de Pareto se puede decir que ninguna de las calibraciones ejecutadas que se encuentran ubicadas en los extremos es óptima, pues una coincidencia histórica que es demasiado buena refleja el ruido (es decir, variaciones aleatorias) asociado con las mediciones de campo y/o las deficiencias del modelo en lugar de las propiedades del sistema natural, por lo que en ese instante se dice que el modelo está sobre ajustado (overfit). Asimismo, en el otro extremo del diagrama de Pareto, el conocimiento duro de los objetivos (es decir, targets u observaciones) disminuye de manera inaceptable y el modelo está dominado por una noción del sistema preconcebida del modelador; por lo tanto, tal modelo se dice entonces que el modelo está desajustado (underfit). Por lo que el “mejor” modelo se basa en la selección subjetiva del modelador de una única calibración entre muchos resultados alcanzados de calibración (Woessner et al., 2015).

El enfoque de Tikhonov es actualmente el medio más eficiente y numéricamente estable de lograr un modelo hidrogeológico razonable y altamente parametrizado de aguas subterráneas pues como ya se ha mencionado, el uso de Tikhonov junto con SVD permiten una respuesta mucho más estable numéricamente y realista geológicamente (Woessner et al., 2015). Por lo tanto, la regularización de Tikhonov puede introducirse en un problema inverso para promulgar la singularidad y sensibilidad de los parámetros, es por esto por lo que es una práctica recomendada al calibrar un modelo incluir la regularización de Tikhonov en el proceso de inversión, pues expresa el conocimiento experto en lo que respecta a los parámetros (PEST++ Development Team, 2020).

Con la regularización de Tikhonov es posible expresar el conocimiento blando aplicado de manera cuantitativa para que sea posible minimizarlo. Para esto se agregan condiciones preferidas

que, típicamente son denominados como: (1) valor preferido y (2) diferencia preferida. El (1) se refiere puntualmente a qué valor de, por ejemplo, conductividad hidráulica considera el modelador que debe tener determinada área de la zona de estudio (por ej., “el valor de este parámetro es alrededor de ...”). En el caso de (2), se refiere a una comparación de dos áreas, es decir, es cuando el modelador a partir de su conocimiento especifica un valor del parámetro de conductividad, pero en comparación con otra área (por ej., “el valor de este parámetro en esta área es de ... más alto que en aquella área”) (Fienen et al., 2018). Tanto las condiciones (1) como (2) pueden ser utilizadas para aplicar Tikhonov en el código mediante PEST, a través de pyEMU que permite el desarrollo de este software y la creación de los archivos necesarios para su ejecución en Python.

2.6.10 Puntos Piloto

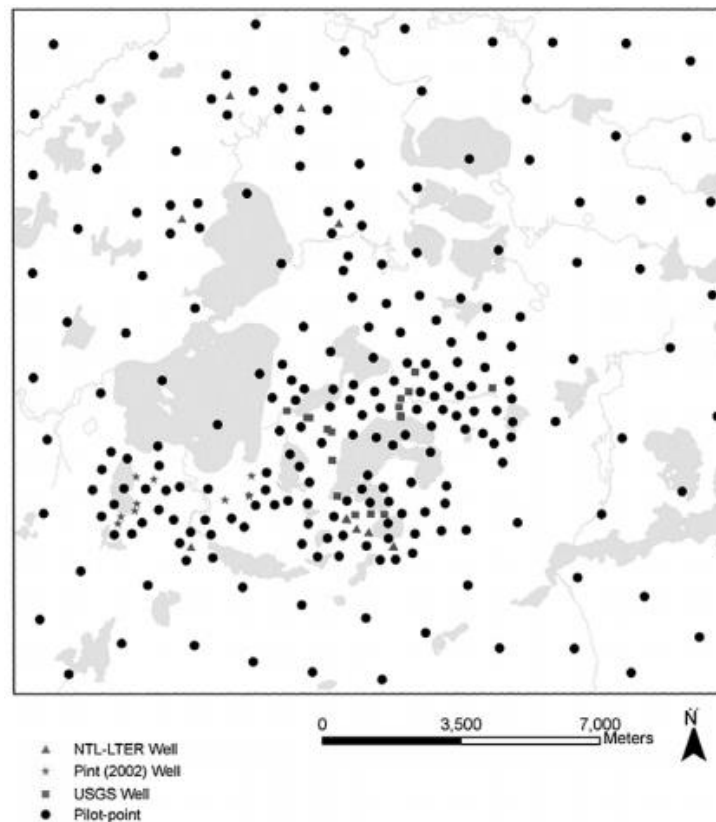
“Reducir el número de parámetros de calibración mediante el uso de puntos piloto es una forma de regularización porque menos parámetros hacen que el proceso de estimación sea más manejable” (Woessner et al., 2015, pág. 414). Los puntos piloto son ubicaciones asignadas en el espacio, de manera que cada punto piloto tiene una coordenada x y una coordenada y en caso de ser bidimensional. También puede tener coordenadas x, y, z en caso de ser tridimensional. Los puntos piloto pueden ser distribuidos a lo largo del dominio del modelo (Doherty, 2020a).

A pesar de que no hay una manera correcta para la ubicación de puntos piloto, estos pueden ser ubicados de manera regular o irregular en mayor cantidad en áreas de interés que contengan datos de alta densidad de datos o cantidad considerable de información, en vez de zonas que carezcan de información. Para la parametrización de un modelo por medio de puntos piloto, inicialmente PEST asigna valores a los puntos piloto y seguido de esto se hacen interpolaciones

desde los puntos piloto hasta la grilla o malla del modelo. Variados métodos pueden ser usados para la interpolación de puntos piloto a la malla del modelo, así como también cualquier tipo de parámetro puede usar los puntos piloto como método de parametrización (Doherty, 2020a). Un ejemplo de la distribución de los puntos piloto se observa en la siguiente Figura 8, en donde se muestra que los puntos piloto han sido distribuidos de manera heterogénea en diferentes zonas:

Figura 8

Ejemplo de ubicación de puntos piloto



Nota: El ejemplo mostrado se realiza en un modelo de flujo de agua subterránea, concentrando una mayor cantidad de puntos piloto alrededor de los pozos ubicados en la zona. Adaptada de *Applied Groundwater Modeling — Simulation of Flow and Advective Transport* (pág. 415) por Woessner et al., 2015, en ELSEVIER ([https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)).

De la figura anterior se observa que unos puntos piloto se encuentran más cercanos que otros, en donde el mayor número de ellos se encuentra rodeando los pozos del área (NTL-LTER, PINT, USGS WELLS) y en el resto del dominio, donde se encuentra menos información, se ubican con más espaciamientos entre ellos.

De esta manera, los valores de parámetros son estimados en ubicaciones discretas (puntos piloto) distribuidas en el dominio del modelo. Una vez los puntos piloto han sido ubicados y los valores de parámetros han sido asignados, interpolación espacial como Kriging es usada para asignar valores de parámetros a todos los demás nodos o elementos (Woessner et al., 2015, pág. 414).

El número total de puntos piloto puede ser propuesto dependiendo del recurso computacional disponible. Hay que tener en cuenta que, si se tienen muchos parámetros, cada parámetro se vuelve insensible en la calibración. Por lo tanto, los puntos piloto son un medio conveniente para parametrizar un modelo de agua subterránea. Si se tienen suficientes parámetros, puede ser útil para aplicar heterogeneidad donde sea necesario, para que la heterogeneidad surja de manera significativa y, para ser usada en conjunto con la regularización Tikhonov (Doherty, 2020a).

2.7 Software de Estimación de Parámetros: PEST

PEST es un paquete de software de código abierto que permite la estimación de parámetros independientes del modelo y el análisis de incertidumbre predictiva de parámetros (Doherty & Hunt, 2010). Este software libre es normalmente usado para apoyar la toma de decisiones

ambientales y la gestión de los sistemas ambientales, bien sean, sistemas de agua subterránea, sistemas de agua superficial o sistemas que involucren la representación de diferentes usos de suelo (Doherty, 2020d).

Este software realiza inversiones de modelos ambientales altamente parametrizados. Al hacerlo, ejecuta un modelo muchas veces, ya sea secuencialmente o en paralelo, de manera no intrusiva. Para PEST, es necesario que el usuario prepare inicialmente tres tipos de archivos: los archivos de plantilla, los archivos de instrucción y un archivo de control (Doherty, 2020d).

El archivo de plantilla corresponde a uno por cada archivo de entrada del modelo y es en este archivo donde se encuentran las variables de decisión o parámetros. El archivo de instrucción corresponde a uno para cada archivo de salida del modelo y en este se leen los números o datos disponibles de campo o laboratorio; es decir, por cada archivo de salida que contenga observaciones, se debe proveer un archivo de instrucción al software. Y, el archivo de control que proporciona al programa PEST los nombres de los archivos de plantilla y de instrucciones, los nombres de los archivos de entrada y salida del modelo, los valores de las variables de control, los valores de los parámetros iniciales, los valores de medición, ponderaciones, etc. (PEST++ Development Team, 2020).

2.7.1 PEST++

El nombre PEST viene del inglés “Parameter ESTimation” (estimación de parámetros). El término “PEST++” describe una suite de programas las cuales tienen ciertas cosas en común, la principal de ellas es su capacidad para realizar numerosas ejecuciones de modelos en paralelo en un solo computador, en una red de oficina, en un clúster de alto rendimiento y en la nube

informática. Los nombres de todos los programas que componen la suite comienzan con “PESTPP” (PEST++ Development Team, 2020).

Los programas que componen la suite PEST++ aplican métodos de última generación para modelar la calibración y la exploración de los parámetros posteriores a la calibración y la incertidumbre predictiva. Sus algoritmos son capaces de manejar un gran número de parámetros, de implementar dispositivos de regularización avanzados y de explorar parámetros e incertidumbre predictiva. Un miembro de la suite optimiza la gestión del sistema ambiental en un contexto del modelado que respeta los niveles (a veces altos) de incertidumbre que acompañan todas las predicciones del modelo (PEST++ Development Team, 2020, pág. 3).

2.7.2 PESTPP-GLM

PESTPP-GLM es el miembro original de la suite PEST ++. Al igual que PEST, PESTPP-GLM realiza una inversión no intrusiva y altamente parametrizada de un modelo ambiental. Como tal, puede considerarse como un reemplazo directo de PEST. Si bien este omite algunas funciones PEST, PESTPP-GLM incluye una funcionalidad significativa que está ausente en PEST. Utiliza la misma plantilla y archivos de instrucciones que utiliza PEST para interactuar con un modelo y lee un archivo de control para adquirir información sobre la definición del problema. Como PEST, puede realizar ejecuciones de modelos en serie o en paralelo (PEST++ Development Team, 2020, pág. 10).

El programa PESTPP-GLM impone un límite adicional a la cantidad en la que se permite que cambie el valor de un parámetro durante cualquier iteración del proceso de inversión.

En el proceso de estimación de parámetros PESTPP-GLM intenta reducir una función objetivo que define el nivel actual de desajuste de modelo entre lo simulado y lo medido. A menos que el modelo al cuál se le estén estimando los parámetros muestre un comportamiento notoriamente no lineal, dará como resultado una función objetivo más baja. Sin embargo, si un modelo es altamente no lineal, puede “sobrepasar” el valor mínimo de la función objetivo, y el nuevo valor de esta función puede de hecho ser peor que el anterior.

Para evitar la posibilidad de que se sobrepase, es una buena práctica establecer un límite razonable en el cambio que puede tener como máximo cualquier parámetro ajustable en cualquier iteración del proceso de inversión realizado por PESTPP-GLM.

Por lo tanto, PESTPP-GLM siempre “apunta por” una función objetivo de medida que sea menor que la actual (PEST++ Development Team, 2020, pág. 38, 71).

Además, evalúa el cambio de los parámetros para todos los parámetros ajustables al final de las iteraciones ejecutadas por el programa y siempre utiliza descomposición de valores singulares (SVD) para resolver un problema inverso, sin embargo, puede ser anulado por el usuario si este incluye una sección de “descomposición de valores singulares” en un archivo de control de PEST (PEST++ Development Team, 2020).

2.7.3 pyEMU

White et al., (2016) han desarrollado pyEMU, un marco de python para análisis de Incertidumbre de Modelado Ambiental, una herramienta de código abierto que es no

intrusiva, fácil de usar, computacionalmente eficiente y escalable a problemas inversos altamente parametrizados. El marco implementa varios tipos de análisis de incertidumbre lineales (first-order, second-moment (FOSM)) y no lineales. Los análisis basados en FOSM también se pueden completar antes de la estimación de parámetros para ayudar a informar decisiones de modelado importantes, como la parametrización y la formulación de la función objetivo (pág. 217).

pyEMU fue creado con el propósito de aumentar el número de análisis de modelamientos ambientales que incluyen estimaciones de incertidumbre de manera que las decisiones de gestión de recursos basadas en modelos puedan estar mejor informadas. El software se desarrolló en el contexto del modelado de aguas subterráneas, pero las técnicas son generales y pueden ser usadas con cualquier modelado numérico de sistemas ambientales u otros, siempre que el modelo pueda manejarse a través de archivos de texto y que los resultados del modelo se puedan leer desde archivos sin intervención manual del usuario (pág. 218).

Además de Python, pyEMU tiene tres dependencias, NumPy, SciPy, y Pandas (pág. 221).

Además, es compatible con PEST y PEST++, puede leer y escribir archivos de entrada y de salida de PEST y PEST (White et al., 2016).

2.8 ParaView

ParaView es un software libre de visualización y análisis de datos de código abierto con la capacidad de facilitar al usuario la visualización y análisis de sus datos cuyo procesamiento puede ser posible interactivamente en 3D. ParaView fue desarrollado para analizar conjuntos grandes de datos y puede ser ejecutado tanto en supercomputadoras como en portátiles, para datos más pequeños. Se ha convertido en una herramienta integral para laboratorios, universidades e industrias y ha ganado reconocimientos gracias a su alto rendimiento (ParaView Developers, s/f).

ParaView admite secuencias de comandos y procesamiento por lotes mediante Python. Para la visualización de modelos y datos en ParaView se sigue un proceso de conversión de datos como procesar en imágenes y representaciones para obtener una mejor comprensión cognitiva de los datos. El programa utiliza VTK (Visualization Toolkit/herramienta de visualización), para proporcionar la visualización y el procesamiento de datos (ParaView Documentation, 2020).

La Herramienta de Visualización (VTK) es un sistema de código abierto disponible gratuitamente para gráficos en 3D, modelado, procesamiento de imágenes, reproducción de volumen, visualización científica, y visualización de información (ParaView Documentation, 2020).

VTK se implementa como un conjunto de herramientas de C++, que puede incorporarse en otros lenguajes de programación como Python, Java y Tcl para la interpretación de los datos. Por lo tanto, el programa ParaView permite crear y aplicar filtros para transformar los datos, cada uno de los cuales realiza diferentes operaciones y tipos de procesamiento para generar varios tipos de representaciones, incluidas vistas de superficie 3D, vistas de líneas y barras bidimensionales, vistas de coordenadas paralelas, entre otros. Con los módulos de Python incluidos, se pueden

escribir scripts que pueden realizar casi todas las funciones expuestas por la aplicación interactiva (ParaView Documentation, 2020).

3 Metodología

3.1 Caso de Estudio

El presente estudio está basado en una investigación previa documentada (Antolínez, 2014) en donde se describe el sistema físico del área de estudio e incluye su respectivo modelo hidrogeológico conceptual.

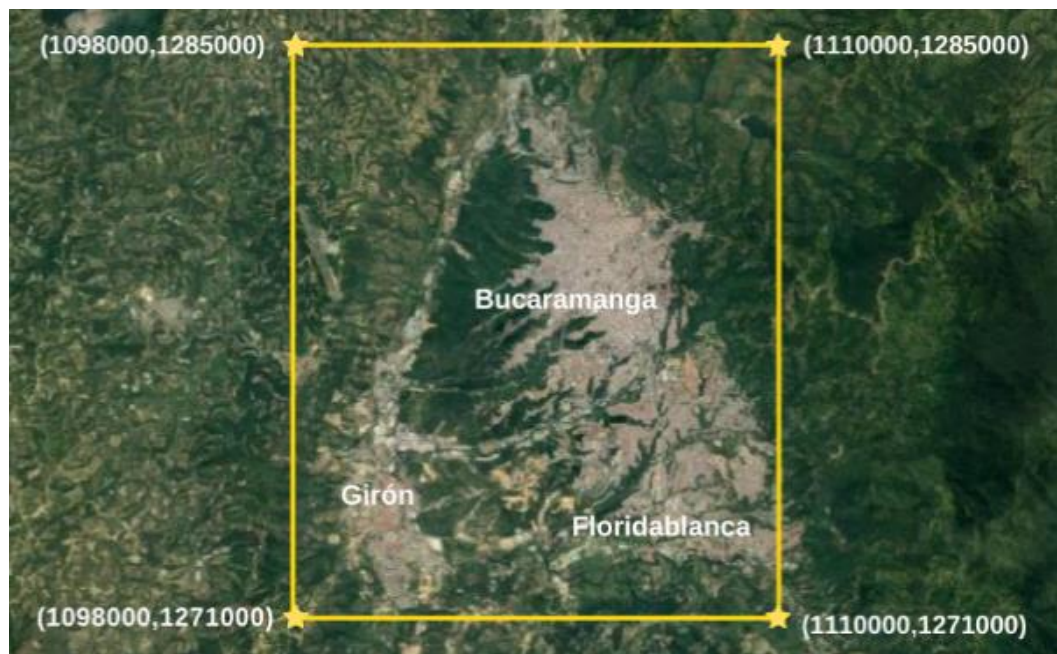
A nivel litológico, el área de estudio contiene rocas sedimentarias que hacen parte de la formación Bucaramanga, el cual se trata de un importante depósito sedimentario de edad cuaternaria que morfológicamente corresponde a un abanico aluvial erosionado, posiblemente asociado en su mayor parte al río Suratá, acumulado sobre una depresión de origen tectónico, sobre el cual se ubica el casco urbano de la ciudad de Bucaramanga. Este abanico limita al nororiente y oriente con el macizo de Santander, al noroccidente y occidente con el cerro de Palonegro y el río de Oro, y al sur con la mesa de Ruitoque. Se ha dividido la formación Bucaramanga, de superficie a fondo de la formación, en los siguientes miembros: miembro Limos Rojos, miembro Gravoso, miembro Finos y miembro Órganos (Antolínez, 2014).

Con respecto a su ubicación, el área de estudio, de acuerdo a Antolínez (2014) circunscribe parcialmente a los municipios de Girón, Bucaramanga y Floridablanca, contiene un área aproximada de 150 km² y posee elevaciones desde los 600 msnm en el sector Café Madrid hasta

los 1200 m.s.n.m. en el Macizo de Santander. Se encuentra delimitada al Norte por el Río Suratá, al Oriente por la Falla Bucaramanga – Santa Marta, al Occidente y Sur por la línea del parte aguas de la Cuenca Superior del Río Lebrija. La zona se encuentra entre las coordenadas 1.098.000 y 1.110.000 W y 1.271.000 y 1.285.000 N según la cartografía básica a escala 1:25.000 del Instituto Geográfico Agustín Codazzi de Colombia – IGAC (pág. 18-19), bajo el sistema de referencia MAGNA-SIRGAS Bogotá, Colombia. Las coordenadas y delimitación de la zona de estudio se presentan en la siguiente Figura 9:

Figura 9

Coordenadas y delimitación de la zona de estudio



En la meseta de Bucaramanga se lograron identificar dos unidades, un acuífero superior y un acuífero profundo, que también pueden ser referidas a lo largo de este libro. El acuífero superior se halla sobre el nivel superior del miembro Gravoso de la formación Bucaramanga y puede

extenderse a lo largo de toda la meseta y el acuífero profundo que se encuentra en los niveles más profundos de la formación Bucaramanga y corresponde al miembro Órganos (Antolínez, 2014). Estos cuatro miembros mencionados en este capítulo son las cuatro capas por las que está compuesto el modelo hidrogeológico principalmente: Limos Rojos, Gravoso, Finos y Órganos. Por lo tanto, los estudios y análisis previos presentados por Antolínez (2014) son utilizados para el desarrollo de esta investigación como los datos de entrada para la construcción del modelo de aguas subterráneas y su calibración.

3.2 Construcción del Modelo Numérico en MODFLOW 6

El modelo numérico se desarrolla en Python incorporando las librerías FloPy para su construcción, Pandas y NumPy para el procesamiento de los datos. En este modelo el flujo del agua subterránea se encuentra en régimen estacionario y se requirieron datos de entrada que incluyera la superficie topográfica de la zona de estudio, los espesores de las capas identificadas en el área, valores de las conductividades hidráulicas, mapas de las cargas hidráulicas y la ubicación de observaciones de campo tomadas de cargas hidráulicas.

GDAL (Warmerdam et al., 2021), una librería de traducción para formatos de datos geoespaciales vectoriales y ráster utilizada para que, en conjunto con las librerías anteriormente nombradas, faciliten el importe, lectura y operaciones de archivos ráster y el código en general. Como datos de entrada se emplearon mapas ráster de la superficie total del terreno y mapas que incluyen los espesores de las capas Limos Rojos, Gravoso, Finos y Órganos. Todos estos mapas se encuentran en la extensión total de la zona de estudio. También se tienen mapas ráster de cargas hidráulicas, ríos y observaciones entre los archivos de entrada.

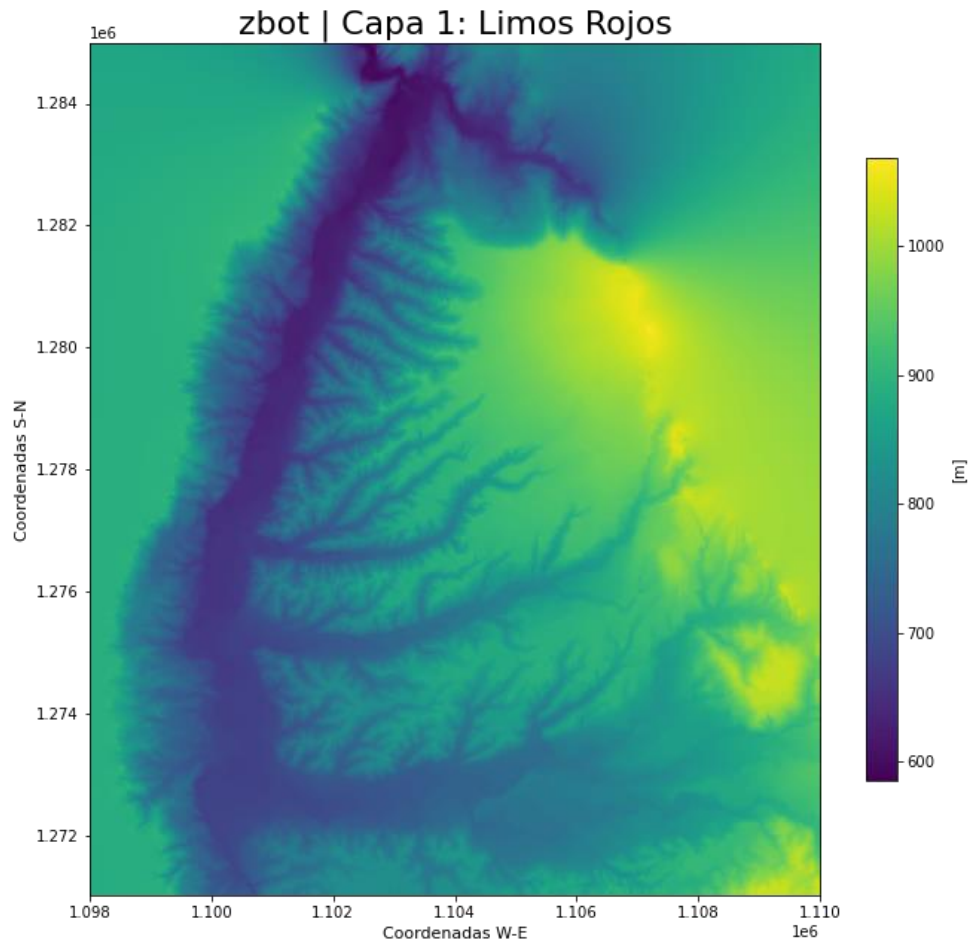
Para los mapas de espesores dados tipo ráster, fue necesario realizar interpolaciones pues presentaban huecos o vacíos (valores negativos de espesor). Estas interpolaciones se realizaron en el software ArcMap 10.8 haciendo uso de un método de interpolación denominado IDW que permite utilizar las funciones propias del ráster, otorgando a las celdas vacías valores muy cercanos y similares a las celdas que las rodeaban. Una vez estas interpolaciones fueron realizadas en cada capa se cargaron los mapas ráster por medio de GDAL, en donde estos son leídos como matrices.

Para comenzar la construcción del modelo numérico en MODFLOW 6 se estableció un tamaño de celda de 50mx50m, número de capas igual a 4, número de filas igual a 280 y número de columnas igual a 240. También se especificó el sistema de coordenadas como EPSG: 3116 y las unidades de longitud en metros. Esta información se agrega en el paquete de discretización DIS. Las unidades de tiempo se asignaron en segundos y para señalar el estado estacionario se asignó el valor de 1 como número de periodos en los parámetros 'nper' y 'perioddata' del paquete de discretización temporal TDIS.

Al tener la superficie total del modelo, se crea una matriz que contenga el fondo de cada capa calculado a partir de la superficie y los espesores de las capas. Al ser un modelo hidrogeológico multicapa, agrupar el fondo de las capas del modelo en única matriz es importante para que pueda ser añadido al paquete DIS de MODFLOW 6. En la siguiente Figura 10, se grafica el fondo de Limos Rojos y en el Apéndice A se representa gráficamente el fondo de las capas restantes del modelo:

Figura 10

Fondo de la capa 1: Limos Rojos del modelo hidrogeológico



Para la definición del dominio de las capas del modelo (idomain) se utilizaron otros mapas ráster disponibles que constaban únicamente de la forma de las capas, en donde cada celda dentro de la correspondiente forma de la capa (dominio) tenía valores existentes (mayores a 0) y fuera de ella no tenían valores válidos (menores a 0) lo que facilitó la asignación del dominio en un bucle.

Si la matriz de IDOMAIN no es especificada, entonces todas las celdas del modelo existen dentro de la solución. Si el valor de IDOMAIN para una celda es 0, la celda no existe en la

simulación. Si el valor de IDOMAIN para una celda es 1 o más, la celda existe en la simulación. Si el valor de IDOMAIN para una celda es -1, la celda no existe en la simulación. Además, la primera celda existente encima se conectará a la primera celda existente debajo. Este tipo de celda es referida como celda de “paso vertical” (U.S. Geological Survey, 2018, pág. 28).

Posteriormente, se incluyó el paquete de condiciones iniciales de carga hidráulica (IC) para establecer la carga hidráulica inicial, que se determinó como la misma altura de la superficie total en todas las capas, es decir, que el estado inicial de todas las capas es saturado.

Con respecto a las conductividades hidráulicas asignadas al modelo hidrogeológico, estas se tomaron a partir de los valores hallados por Antolínez (2014) en “Figura 5.7 valores de conductividades hidráulicas horizontales y verticales” (pág. 86). Los valores de conductividades para cada capa suministrados al paquete NPF sin transformarlos al logaritmo en base 10, se muestran en la siguiente Tabla 1:

Tabla 1

Conductividad hidráulica inicial asignada al modelo hidrogeológico

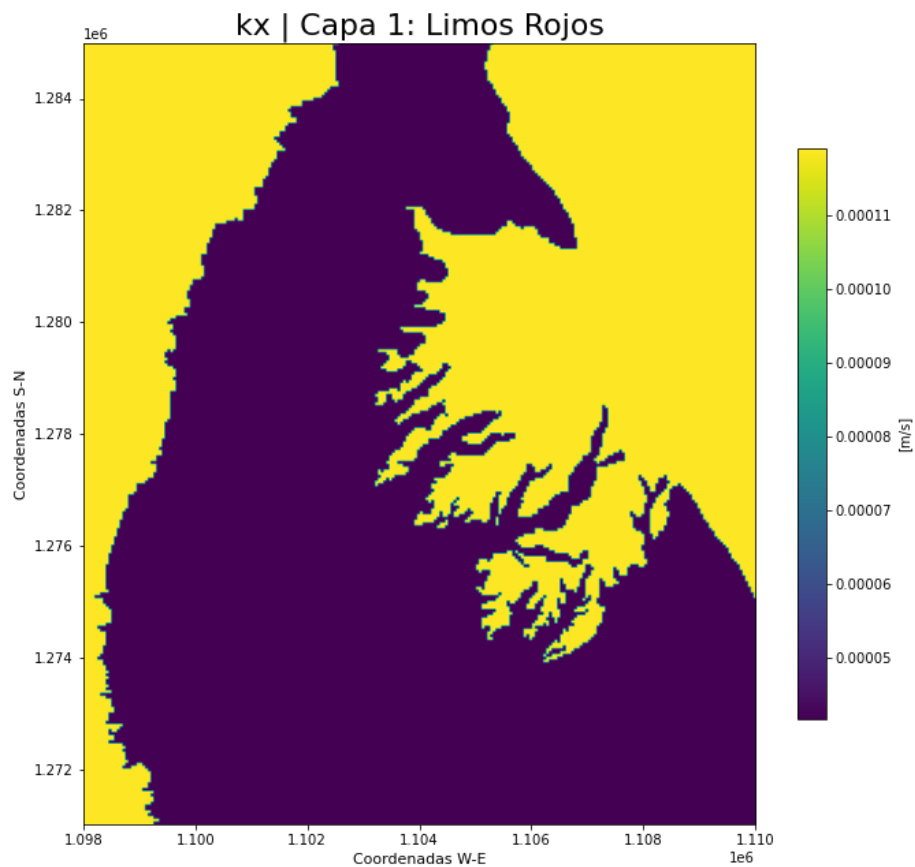
K [m/s]	Limos Rojos	Gravoso	Finos	Órganos
Kx	1.192e-04	1.192e-04	1.157e-07	4.167e-05
Kz	2.199e-05	2.199e-05	1.042e-07	1.736e-06

Nota: Información adaptada de la Figura 5.7 en *Modelo Numérico del Flujo de Agua Subterránea en las Formaciones Acuíferas de Bucaramanga* (pág. 86) por Antolínez W., 2014, en Tesis de Maestría en Ingeniería Civil, Universidad Industrial de Santander.

Como se observa en la Tabla 1, la conductividad es constante en todas las capas, sin embargo, en Limos Rojos, debido a la extensión del dominio asignada para facilitar la ubicación de los ríos en esta capa, se consideraron dos valores de conductividad que corresponden a la capa de Limos Rojos (amarillo) y la capa de Órganos (morado) como se muestra en la Figura 11, lo anterior con el fin de adaptarse a las condiciones geológicas de la realidad:

Figura 11

Conductividad hidráulica horizontal en m/s para la capa 1: Limos Rojos

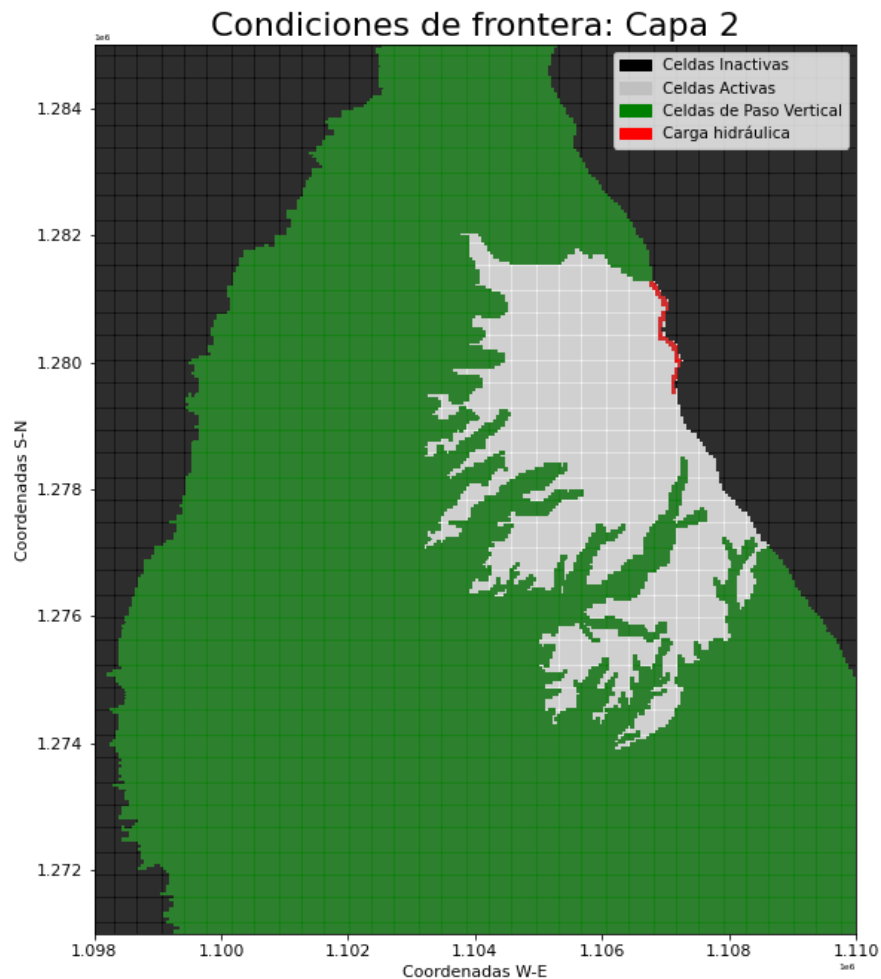


En el Apéndice B y Apéndice C se encuentran representadas gráficamente la conductividad hidráulica horizontal y vertical asignadas respectivamente en todas las capas del modelo.

En el mismo paquete NPF se asignaron los tipos de celda, para simplicidad computacional en la calibración, se determinó que el modelo es confinado en sus cuatro capas ($\text{icelltype} = 0$). Los ríos se añaden al paquete RIV y se ubicaron en la capa Limos Rojos con una conductancia igual a $1.157\text{e-}4$ [m/s] y carga hidráulica constante igual a la superficie del terreno más 1 metro (Antolínez, 2014). Lo asignado para la capa 2 (Gravoso) se muestra en la siguiente Figura 12:

Figura 12

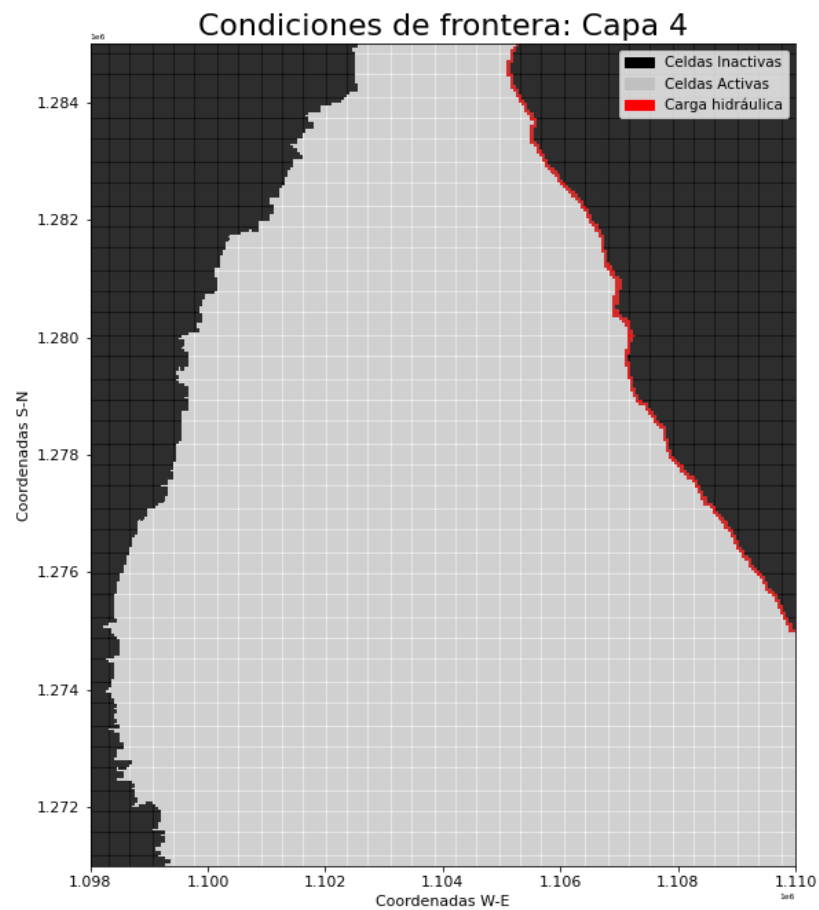
Dominio y carga hidráulica asignada en la capa 2: Gravoso



En la capa 4 (Órganos) también se presentan cargas hidráulicas constantes, esta condición de frontera fue agregada a su respectivo paquete de MODFLOW 6, CHD y, al igual que Gravoso, se encuentran ubicadas al borde oriental del dominio de la capa como se muestra en la Figura 13:

Figura 13

Dominio y carga hidráulica asignada en la capa 4: Órganos

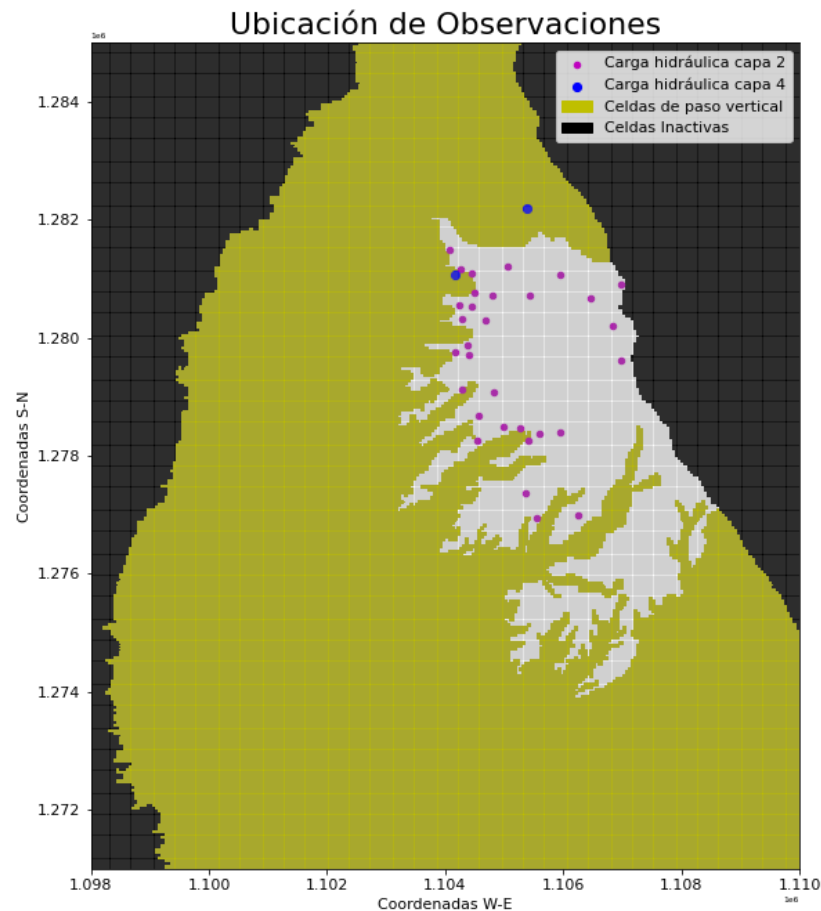


En el Apéndice D se muestran las condiciones de frontera y el dominio para todas las capas del modelo. Observaciones de carga hidráulica fueron agregadas al paquete OBS. Para este procedimiento se tomaron las ubicaciones de los puntos de observación (targets) tomadas de

Antolínez (2014) en “Tabla 5.3 Resumen de targets y valores residuales para el estado permanente.” (pág. 88), donde se encontraron un total de 33 observaciones: 31 de ellas identificadas dentro del dominio de Gravoso y las dos restantes en el dominio de Órganos. La ubicación de las observaciones de carga hidráulica hallados en el dominio de la capa 2: Gravoso (gris) y capa 4: Órganos (amarillo) se muestran en la siguiente Figura 14:

Figura 14

Ubicación de los puntos de observación de carga hidráulica



Nota: Información obtenida de la Tabla 5.3 en *Modelo Numérico del Flujo de Agua Subterránea en las Formaciones Acuíferas de Bucaramanga* (pág. 88-89) por Antolínez W., 2014, en Tesis de Maestría en Ingeniería Civil, Universidad Industrial de Santander.

Finalmente, en el modelo se incorporó la formulación de Newton-Raphson para su solución, pues permite alcanzar una mejor convergencia. Este parámetro se especificó en el paquete GWF y, la complejidad del modelo se fijó en el paquete IMS como moderada. En total, en este modelo se hizo uso de 10 paquetes de MODFLOW 6: SIM, TDIS, GWF, IMS, DIS, IC, NPF, CHD, RIV, OBS y, además, el último paquete llamado ‘Output Control option’ u OC que será el paquete que formalizará la escritura de los archivos de salida para el flujo de agua subterránea, es decir, este determina cómo y cuándo se imprimen los datos de carga hidráulica y/o si se escriben en un archivo de salida binario independiente (U.S. Geological Survey, 2018). El código completo en Python de este modelo se encuentra disponible en el repositorio de GitHub realizado en Jupyter Notebook como mf6model.ipynb (Sánchez & Argüello, 2021).

3.3 Calibración

Para realizar la calibración, PEST++ requiere tres archivos principales: archivos de instrucción, archivos de plantilla y archivo de control que fueron creados a través de pyEMU utilizando los archivos de salida generados previamente por el modelo como el de observaciones que está en formato .csv y conductividades que están en formato de texto.

Los archivos de instrucción corresponden a uno por cada archivo de salida del modelo y de este se leen los valores dados (PEST++ Development Team, 2020), los cuales corresponden al resultado que se busca que obtenga el modelo al final de la calibración. Es decir, en este caso, las observaciones de cargas hidráulicas medidas forman el archivo de instrucción necesario para PEST+. Estas fueron almacenadas en el archivo de salida que ha sido generado por el modelo en MODFLOW 6 (heads.csv) y, además, su valores fueron modificados en Excel, sustituyéndolos por

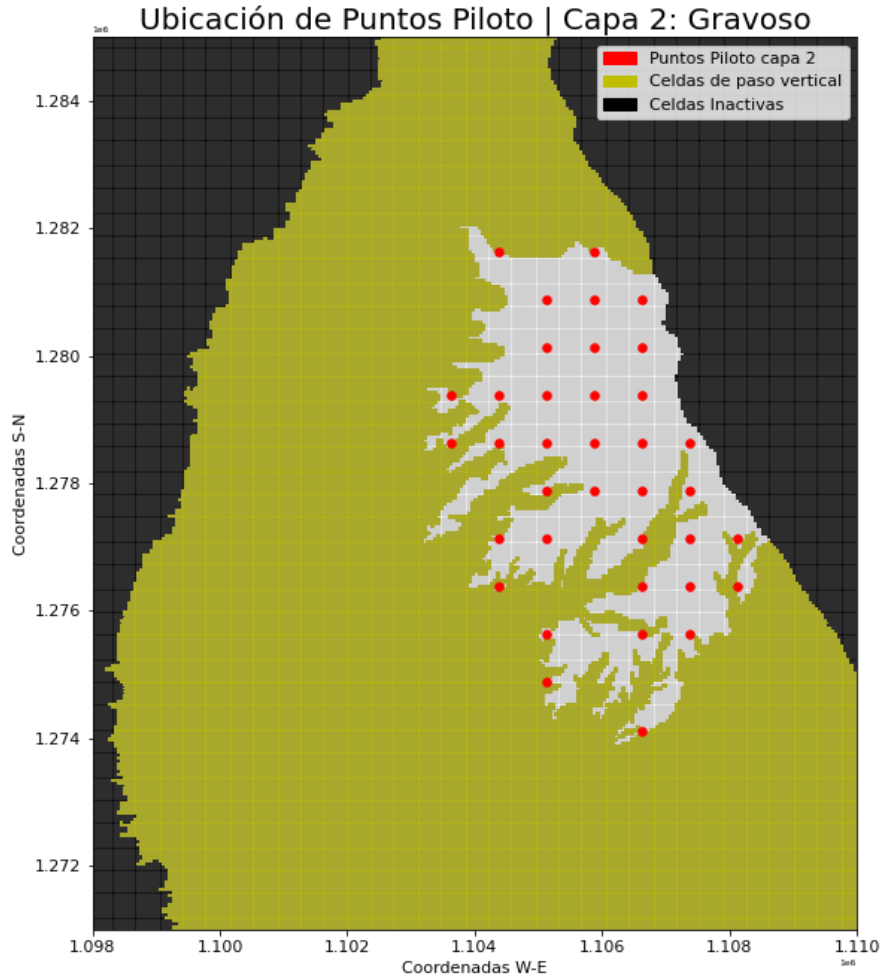
las observaciones tomadas de los estudios previos por Antolínez (2014), pues originalmente el archivo contiene simulaciones de observaciones realizadas por MODFLOW 6.

“Los archivos de plantilla corresponden a uno para cada archivo de entrada del modelo en el que residen parámetros o variables de decisión” (PEST++ Development Team, 2020, pág. 16). En este modelo, los parámetros a calibrar son las conductividades hidráulicas horizontal y vertical empleando puntos piloto para asignar los valores de los parámetros en ubicaciones discretas y demás nodos en el modelo a través de interpolaciones como Kriging, disminuyendo así la carga computacional de la calibración (Woessner et al., 2015). Estos puntos piloto fueron ubicados dentro del dominio de cada una de las capas. Para Órganos, se utilizó un espaciamiento de 30 celdas entre cada punto piloto en el dominio y para las capas Gravoso y Finos se asignó un espaciamiento de 15 celdas entre cada punto dentro del dominio buscando que se obtuvieran alrededor de 40 puntos piloto en cada capa, obteniendo así 37 para Gravoso y Finos, 48 en Órganos; a partir de los puntos piloto se interpolan geo estadísticamente los valores al resto de las celdas del modelo. Con respecto a Limos Rojos, dado que en la realidad suele estar insaturada y no participa activamente en el comportamiento del flujo, esta capa se asignó como parámetro constante, por lo que no cuenta con puntos piloto.

El resultado de la ubicación automatizada de los puntos piloto dentro del dominio de Gravoso es mostrado en la siguiente Figura 15:

Figura 15

Ubicación de puntos piloto en el dominio de la capa 2: Gravoso



Los archivos externos de texto creados para las conductividades en la construcción del modelo fueron empleados como valor inicial para los parámetros de conductividades hidráulicas, y se asignan límites para los valores de los parámetros de conductividades hidráulicas de salida: upper_bound/lower_bound, iguales a 10 [m/d] y 0.1 [m/d] respectivamente y de entrada: ult_ubound/ult_lbound, iguales a los valores de la Tabla 1 multiplicados por 10 para 'ult_ubound' y dividido en 10 para 'ult_lbound', considerando así el valor inicial como un intermedio. A partir

de lo anterior se obtiene el archivo de plantilla para PEST++. Por último, es importante mencionar que los resultados que arroja PEST++ serán en [m/s] transformados al logaritmo en base 10. Teniendo esta información se crea el archivo de control, que “provee a PEST y PEST++ los nombres de todas las plantillas y archivos de instrucciones, los nombres de los archivos de entrada y salida del modelo correspondiente, los valores de las variables de control, los valores de los parámetros iniciales, los valores de medición, ponderaciones, etc.” (PEST++ Development Team, 2020, pág. 16).

Posteriormente el valor de la variable NOPTMAX (Número de Optimizaciones Máximas) se iguala a 0 con el propósito de preparar el modelo para que ejecute sin estimar ningún parámetro, verifique que la información suministrada hasta el momento es consistente y se encuentra en orden. Una vez terminado el proceso con NOPTMAX igual a 0, se cambió el valor de esta variable a -1 para calcular la matriz Jacobiana inicial. Luego, NOPTMAX se hizo igual a 10, 20 y 30; para la calibración del modelo, de manera que se ejecutan como máximo 10, 20 y 30 iteraciones respectivamente. Es decir, se realizaron 3 calibraciones con diferente número de iteraciones para determinar cuál de estos resultados presenta un mejor ajuste y a partir de esto analizar el comportamiento del modelo.

PyEMU también facilita la asignación de más opciones como “PESTmode” en el programa de PEST que determina el modo de comportamiento de PEST, en donde se pueden escoger opciones como “estimation”, “prediction”, “pareto” o “regularization” (PEST++ Development Team, 2020). La opción “regularization” es utilizada para el modelo de calibración pues se va a emplear el método Tikhonov y SVD que ya se encuentra incorporado en PEST++, mejorando notablemente la convergencia, aportando estabilidad numérica y la obtención de resultados más realistas geológicamente (Woessner et al., 2015).

Con respecto al método Tikhonov, este involucra la aplicación de conocimiento blando y duro a la calibración (Woessner et al., 2015) y puede tener dos condiciones: “valor preferido” o, “diferencia preferida”, que en pyEMU se denotan como “zero_order_Tikhonov” y “first_order_pearson_Tikhonov”, respectivamente. Entre estos dos, el valor preferido es el más fácil y menos intensivo computacionalmente de implementar (Fienen et al., 2018). Para este modelo se escogió la condición de “valor preferido” o “zero_order_Tikhonov” en pyEMU. Posteriormente se ejecuta el código para iniciar el proceso de la calibración del modelo. El código completo en Python de la calibración de este modelo se encuentra disponible en el repositorio de GitHub realizado en Jupyter Notebook como mf6PESTPP.ipynb (Sánchez & Argüello, 2021).

3.4 Análisis de Sensibilidad

La matriz Jacobiana creada por PEST++ en el instante antes de iniciar la calibración (iteración 0) y después de la calibración (iteración 20), es analizada para determinar el parámetro que más influye en el modelo hidrogeológico. Esta matriz Jacobiana registra la sensibilidad de las observaciones con respecto a cada conjunto de parámetros HK (conductividad hidráulica horizontal) y VK (conductividad hidráulica vertical). Para encontrar el parámetro con mayor influencia se optó por calcular el promedio del valor absoluto en cada capa de los valores de sensibilidades dados por el modelo antes y después de la calibración.

Como se menciona anteriormente, PEST++ en ambas iteraciones dadas al programa crea un archivo .jcb binario que corresponde a la matriz Jacobiana, la cual se leyó por medio de pyEMU y se exportó en formato .csv para iniciar el tratamiento de datos en Excel. La matriz Jacobiana (también llamada matriz de sensibilidad) está conformada en filas que corresponden a cada una de

las 33 observaciones y en columnas que corresponden a cada punto piloto que fue añadido como parámetro del modelo en pyEMU. Por lo tanto, para Gravoso y Finos se tiene una matriz de tamaño 33x37 y para Órganos una matriz de tamaño 33x48 tanto para HK como VK.

Como resultado, la matriz Jacobiana está compuesta por los valores de sensibilidad para las observaciones del modelo completo, es decir, incluye todas las capas y parámetros en una única matriz, por lo que para realizar este análisis fue separada por parámetros (HK y VK), y posteriormente por las cuatro capas del modelo correspondientes. De esta manera fue organizada tanto para la matriz previa a la calibración como para después de la calibración.

En total, resultaron 16 matrices a las cuales se halló el promedio de sensibilidades en valor absoluto y se determinó el parámetro dominante para cada uno de los miembros que pertenecen al modelo. El parámetro que más influya por cada capa en el modelo se encuentra como aquél cuya sensibilidad sea la mayor en cada capa del modelo. Es decir, se comparan las sensibilidades promedio obtenidas para HK y VK en cada capa y el mayor valor de este resultado se considera como el parámetro con mayor influencia en determinada capa.

3.5 Montaje 3D del Modelo: ParaView

Para la visualización tridimensional del modelo se extrae la información necesaria que se busca plasmar en ParaView del modelo construido, proceso que se puede realizar en Python a través de FloPy, que en este caso facilitará la creación de los archivos de salida que serán utilizados para la visualización 3D del modelo en ParaView como archivos en formato VTK (Visualization Toolkit) para que puedan ser leídos por el programa.

Inicialmente se carga el modelo de aguas subterráneas para poder exportar tanto matrices como paquetes. En este caso, del modelo se extrae la información de los paquetes DIS, NPF, RIV y CHD en formato VTK. De manera similar, se exportan los paquetes restantes; NPF, RIV, CHD y las cargas hidráulicas a partir del resultado de la simulación del modelo hidrogeológico en MODFLOW 6 especificando en este último el valor que no representa datos que normalmente, en el archivo .hds es igual 1e30.

ParaView tiene opciones de representación en sus propiedades avanzadas que se pueden combinar para visualizar estos archivos como superficies sólidas (solid color), superficies con variación en su coloración de acuerdo con los datos que contiene (surface), puntos (points) que son interpolados en las celdas del modelo, bordes prominentes entre celdas (wireframe), celdas (cell) que son celdas sencillas con los datos brutos guardados por el modelo, entre otros.

El parámetro 'point_scalars' en la programación fue activada para todas las exportaciones realizadas pues permite generar valores en los vértices de las celdas suavizando la superficie o elevaciones. Habiendo creado los archivos de salida en formato .vtk se pueden abrir en ParaView para el montaje del modelo. La versión que se utilizó de este software es 5.9.0.

Una vez añadidos estos insumos se mostrarán en pantalla como superficie sólida sin ninguna configuración para su visualización como se muestra en la Figura 16, que corresponde al paquete DIS:

Figura 16

Archivos de entrada cargados en ParaView sin modificar



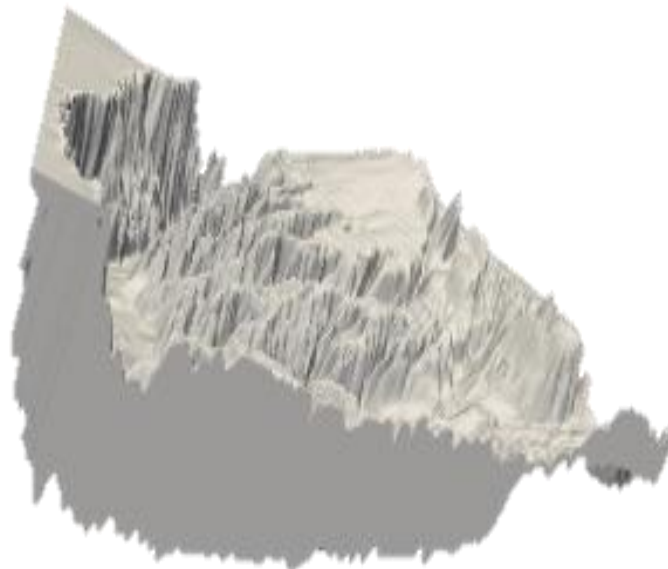
Para mejorar la visualización y detalle del modelo en su profundidad, al parámetro ‘transforming’ del panel de propiedades avanzadas se fue aumentado al asignar un valor de 10 a la escala en el eje z, los cambios realizados se observan en las siguientes Figuras 17 que representa en planta el montaje tridimensional del modelo hidrogeológico modificando la escala en el eje z, y la Figura 18 que muestra la profundidad aumentada del modelo en ParaView:

Figura 17

Vista en planta del modelo en 3D con escala aumentada en el eje z

**Figura 18**

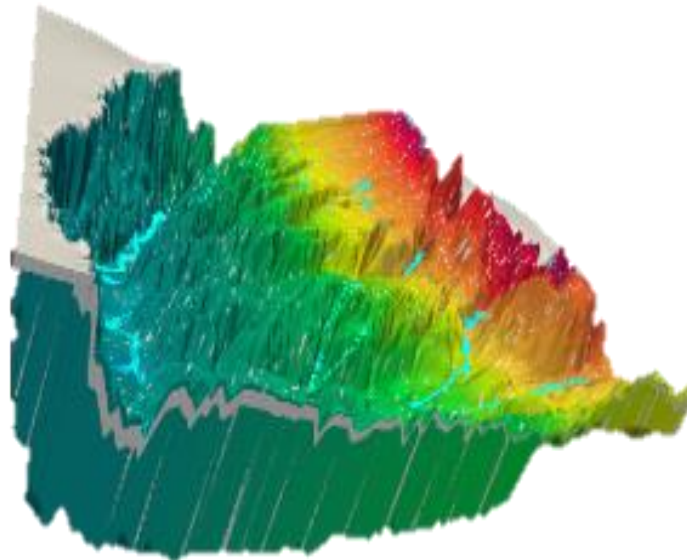
Profundidad del modelo en 3D con escala aumentada en el eje z



Para los paquetes CHD y RIV se asignó ‘solid color/points’; paquete DIS, idomain/surface; carga hidráulica, ‘cell head/surface’ y para el paquete NPF se seleccionó ‘k (conductividad horizontal)/surface’ y ‘k33 (conductividad vertical)/surface’. En la siguiente imagen (Figura 19) se muestra el paquete NPF, RIV y CHD con estas propiedades mencionadas. El color en blanco corresponde a la conductividad hidráulica como ‘solid color’:

Figura 19

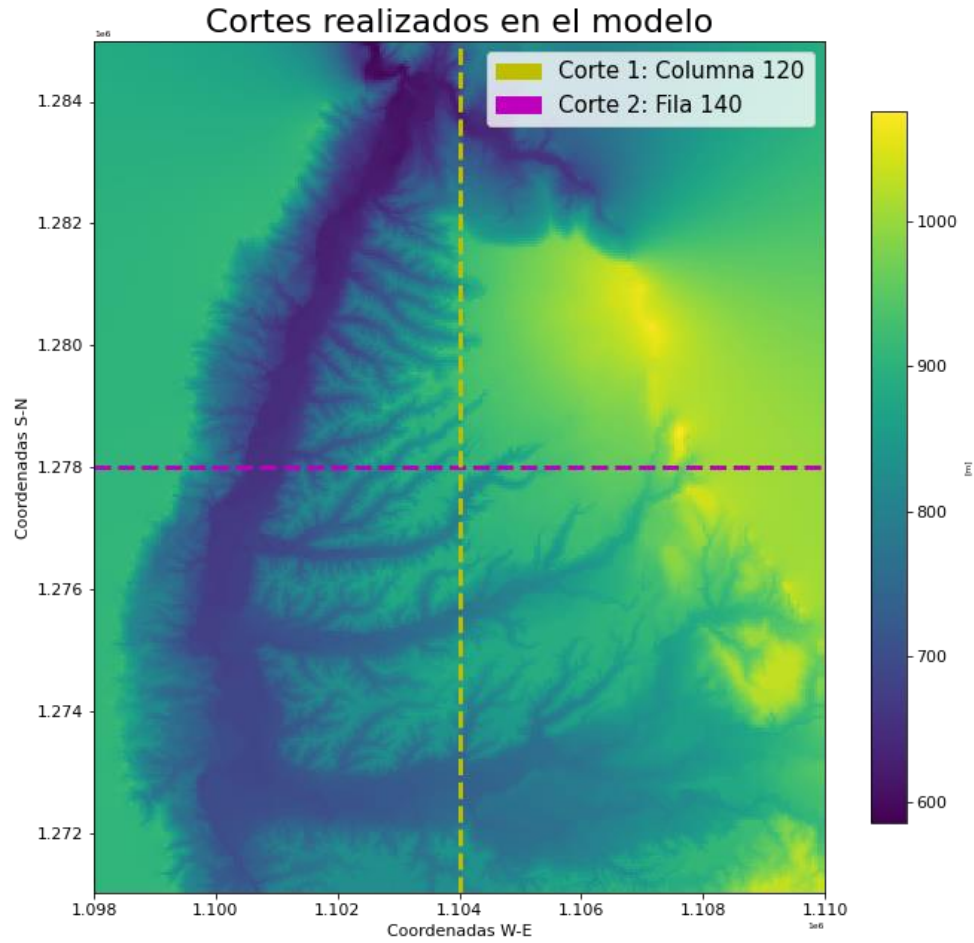
Carga hidráulica simulada, paquetes RIV y NPF en 3D



Un corte paralelo al eje x y eje y, fueron realizados al modelo en ParaView a la mitad de cada uno de estos ejes, y tres cortes transversales al eje z. Las líneas de corte 1 (paralelo al eje y) y corte 2 (paralelo al eje x) se muestran en la siguiente Figura 20 punteadas en color amarillo y magenta respectivamente sobre la superficie del modelo:

Figura 20

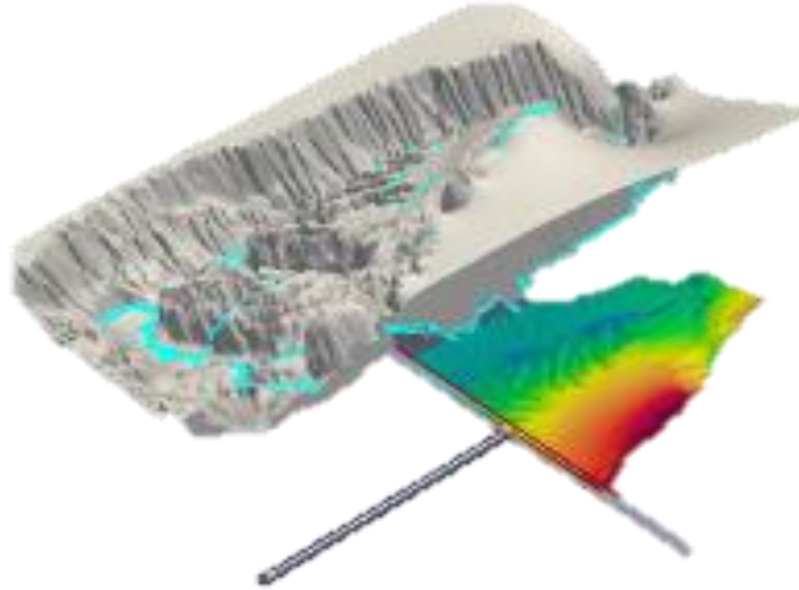
Cortes realizados en el montaje 3D del modelo hidrogeológico



Para estos cortes realizados en el software ParaView se elige la mitad izquierda del corte 1 en el modelo y la mitad superior del modelo para el corte 2. Una muestra de cómo fue realizado el corte 2 paralelo al eje x se muestra en la Figura 21 para la carga hidráulica simulada (mapa de calor) por MODFLOW 6, sin modificar la escala en el eje z:

Figura 21

Corte 2 realizado a la carga hidráulica simulada



Como se muestra en la Figura 21 de abajo hacia arriba, se observa el corte 2 realizado al modelo este último presentado como color sólido en ParaView, paralelo al eje horizontal y perpendicular en la mitad del eje vertical, siendo así el corte resultante el que pertenece a la mitad superior mostrado como mapa de calor que corresponde a las coordenadas norte desde 1278000 hasta 1285000 del modelo. Con respecto al corte 1 resultante corresponde a las coordenadas este desde 1098000 hasta 1104000. Estos cortes se muestran en los resultados del montaje 3D del modelo en ParaView.

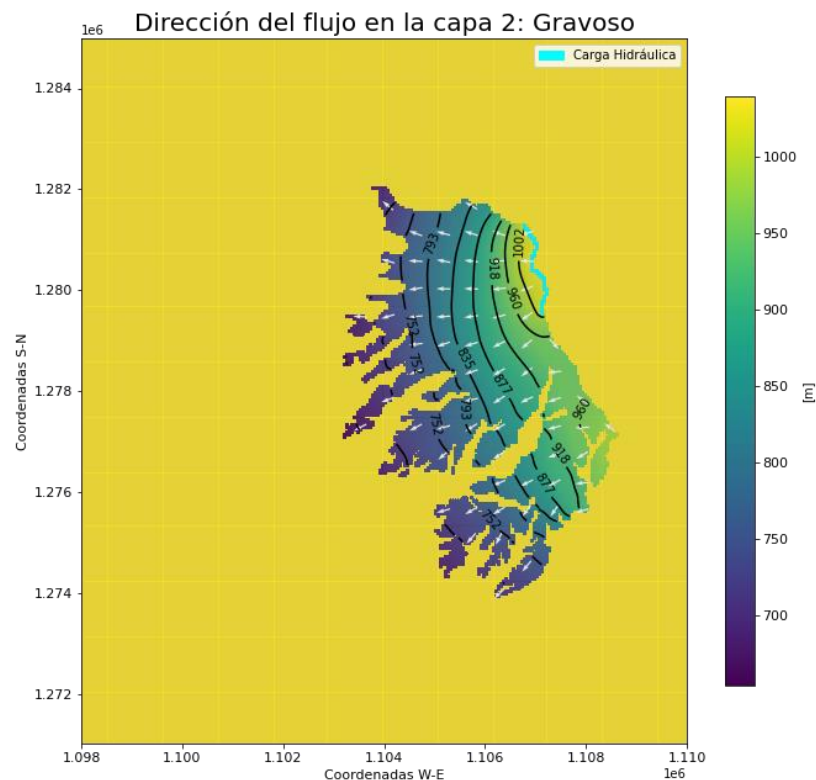
4 Resultados

4.1 Construcción del Modelo Numérico en MODFLOW 6

MODFLOW 6 realiza simulaciones a partir de los datos suministrados obteniendo un balance hídrico con un valor total de caudal de entrada igual a 10.5534 [m³/s] y caudal de salida igual a 10.5542 [m³/s] dando un porcentaje de discrepancia igual a 0.01%. Los valores simulados de carga hidráulica (también llamada H) en metros son mostrados en mapa de calor en la siguiente Figura 22 junto a las isopiezas y dirección del flujo en el dominio del miembro Gravoso:

Figura 22

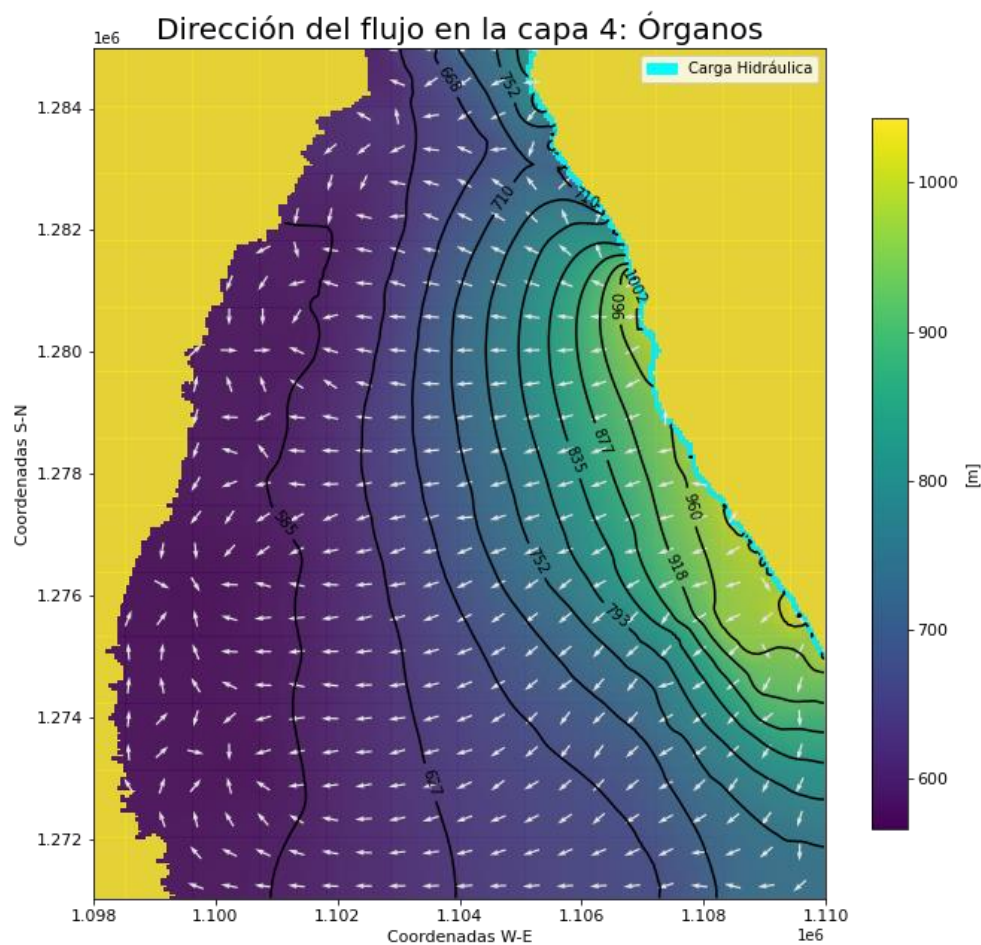
Resultados del flujo subterráneo en la capa 2, antes de la calibración



De igual manera, la carga hidráulica simulada en metros, isopiezas y dirección del flujo, resultado de la construcción del modelo a través de FloPy para el miembro Órganos se muestra en la siguiente Figura 23:

Figura 23

Resultados del flujo subterráneo en la capa 4, antes de la calibración



Como se observa en las figuras anteriores, la variación de las cargas hidráulicas simuladas disminuyen progresivamente en dirección oriente a occidente partiendo desde el borde oriental del

dominio donde se ubicaron las cargas hidráulicas proporcionadas en los datos de entrada suministrados (Antolínez, 2014). El Apéndice E incluye la carga hidráulica simulada por el modelo y la dirección del flujo en las cuatro capas del modelo hidrogeológico.

En los resultados de la simulación se obtuvo un valor de carga hidráulica máxima igual a 1043.4 [m] y una mínima igual a 460.0 [m], en donde este valor mínimo de carga hidráulica estaría ubicado en una zona cercana donde el escurrimiento de agua llegaría principalmente: en el río de Oro, el cual se encuentra junto al borde occidental del dominio del modelo. Por último, de los resultados del modelo también se observa que la dirección del flujo perpendicular a las isopiezas representado en la Figura 22 y Figura 23 soporta lo anteriormente mencionado al describir una trayectoria dirigida hacia el río de Oro, lo que podría sugerir que el flujo está siguiendo la topografía del terreno.

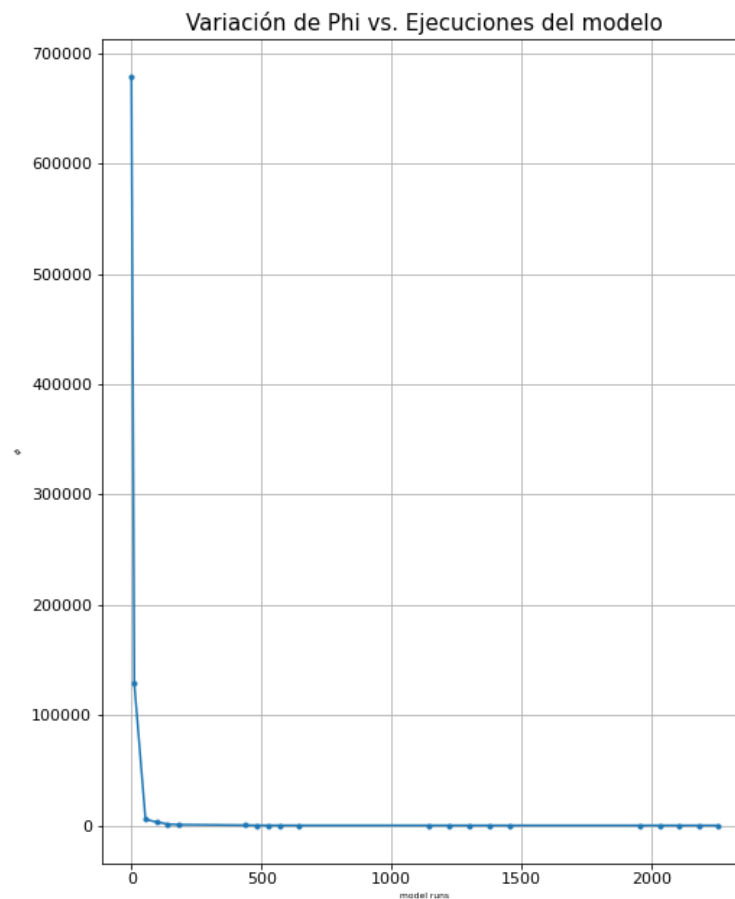
4.2 Calibración

Al final de la calibración, después de 10, 20 y 30 iteraciones, se obtuvo promedios de residuales iguales a 0.0391, 0.0227 y 0.0879 respectivamente, por lo que se consideró como el mejor ajuste para el análisis de resultados el residual promedio más pequeño obtenido, que en este caso corresponde a la calibración con 20 iteraciones. Al realizar la iteración 0 en el proceso de calibración, se obtuvo el valor inicial de función objetivo o también llamado phi, cuyo resultado fue igual a 679485. Considerando lo anterior, la calibración del modelo arrojó como resultado un valor de Phi igual a 11.7575 que equivale a cerca del 0.00173% del Phi anterior, es decir, se logró disminuir un 99.998% de su valor inicial. La variación de la función objetivo Phi con respecto al

número de ejecuciones del modelo hidrogeológico realizadas en el proceso de calibración se muestra gráficamente en la siguiente Figura 24:

Figura 24

Variación de Phi en función de las ejecuciones del modelo

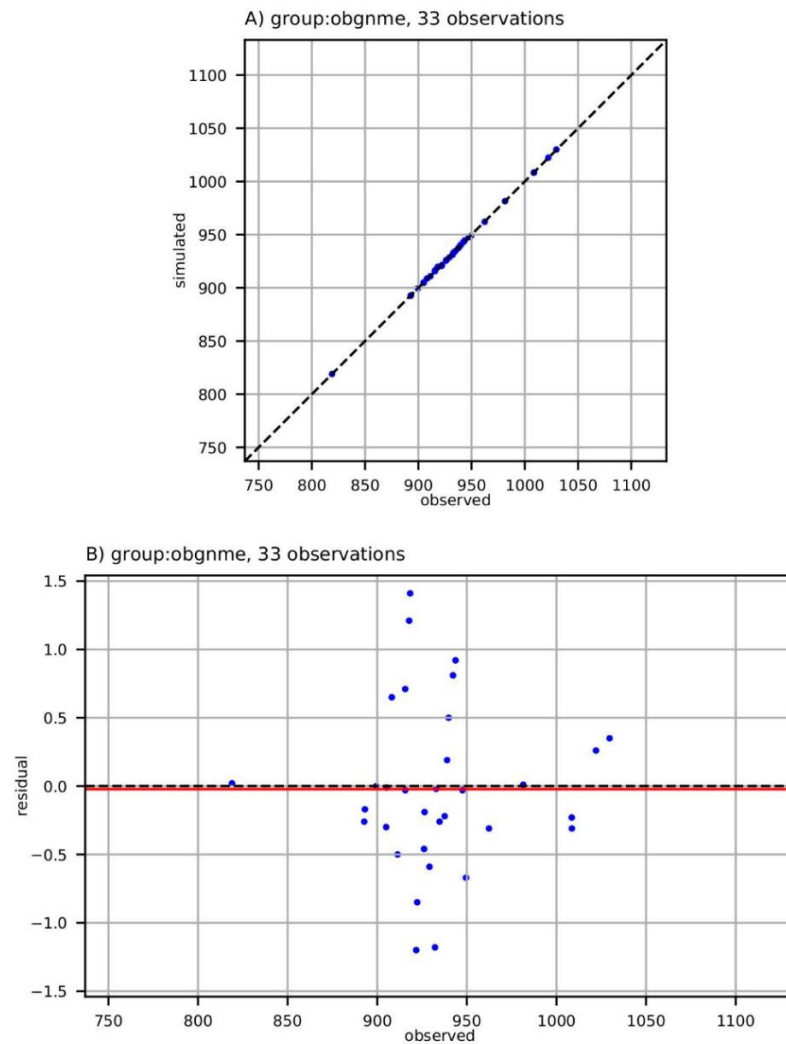


En la figura anterior, el eje horizontal corresponde al número de ejecuciones del modelo hasta la iteración 20 cuyo total fue de 2255, un proceso que fue finalizado en 7 horas en un equipo de cómputo con 12 procesadores y 6 núcleos. En el Apéndice F se adjunta la evolución del valor de Phi para las 20 iteraciones de la calibración y el porcentaje de variación con respecto a su valor

inicial. La similitud entre carga hidráulica Simulada vs. Observada se muestra en la Figura 25 a) donde la nube de puntos indica un buen ajuste al alinearse a la diagonal de la gráfica 1:1.

Figura 25

Representación gráfica de los resultados obtenidos en la calibración del modelo



Nota: a) corresponde a los valores Simulados vs. Observados y b) corresponde a los Residuales obtenidos vs. Observaciones.

Los residuales, que son la diferencia entre los observado y simulado, obtenidos de estos resultados se grafican en la anterior Figura 25 b), donde se encuentran pequeñas variaciones entre las observaciones tomadas en campo y las simuladas, con una nube de puntos que redondea el eje de cero ubicándose gran parte de ellos entre -1 y 1. En esta misma Figura también se observa hacia los extremos del eje y un residual máximo igual a 1.20 y como valor mínimo un residual igual a -1.41. En promedio el residual obtenido en la calibración es igual a 0.023 como se observa en la Tabla 2, que simplifica los resultados de la calibración estadísticamente de los residuales obtenidos a partir de las observaciones simuladas por el modelo calibrado:

Tabla 2

Estadísticas de los residuales obtenidos por el modelo calibrado en PEST++

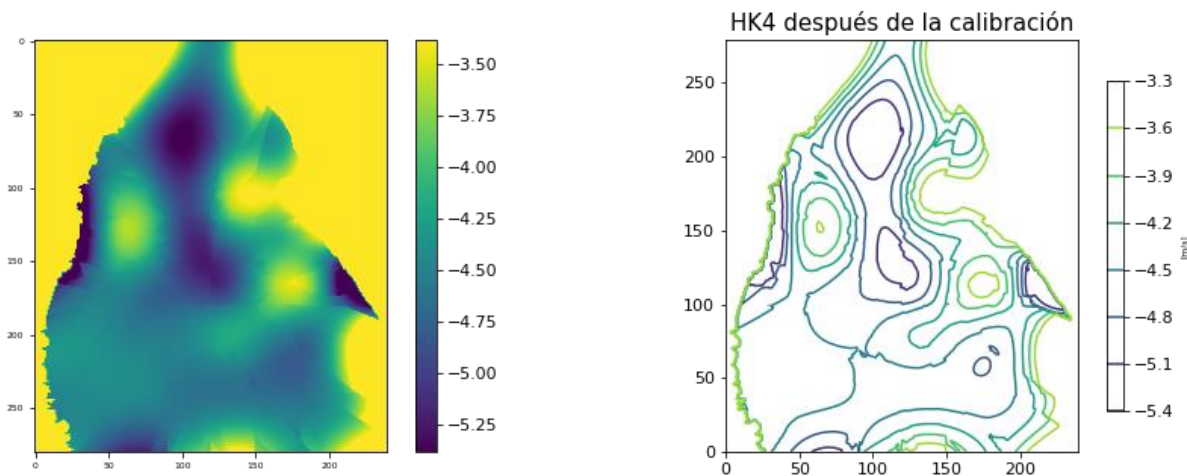
Estadísticas de Residuales	
Media Residual	0.023
Desv. Estándar Residual	0.606
Suma de Cuadrados	11.757
Media Absoluta	0.449
Residual Mínimo	-1.410
Residual Máximo	1.200
Rango	210.690
Desv. Estándar./Rango	0.00287

Los 33 puntos de observación identificados en campo se muestran en el Apéndice G y los valores medidos, simulados y residuales obtenidos en cada uno de los 33 puntos de observación que condujeron al resultado obtenido en la Tabla 2 se muestran en el Apéndice H.

El parámetro de conductividad hidráulica después de la calibración se grafica en la Figura 26, donde se observa la variación de la conductividad horizontal transformada al logaritmo en base 10 en [m/s] a lo largo del dominio de la capa Órganos (HK4):

Figura 26

Conductividad hidráulica horizontal después de la calibración en la capa 4



Los valores de conductividad hidráulica obtenidos después de la calibración respetan los límites establecidos en pyEMU descrito en el capítulo 3.2. De igual manera para las demás capas del modelo tanto para conductividad hidráulica horizontal como conductividad hidráulica vertical se obtuvieron resultados de la conductividad hidráulica calibrada dentro de los límites, como en Órganos y la representación gráfica de estos resultados se encuentran en el Apéndice I para la conductividad horizontal (HK) y en el Apéndice J para la conductividad vertical (VK).

Finalmente, las isopiezas, carga hidráulica simulada (mapa de calor) y dirección del flujo para el dominio de la capa 2 y capa 4 después de la calibración (Figura 27 y Figura 28) son más espaciadas, por lo que la carga hidráulica disminuye de oriente a occidente más gradualmente que previo a la calibración, el Apéndice K incluye las capas restantes del modelo:

Figura 27

Resultados del flujo subterráneo en la capa 2, después de la calibración

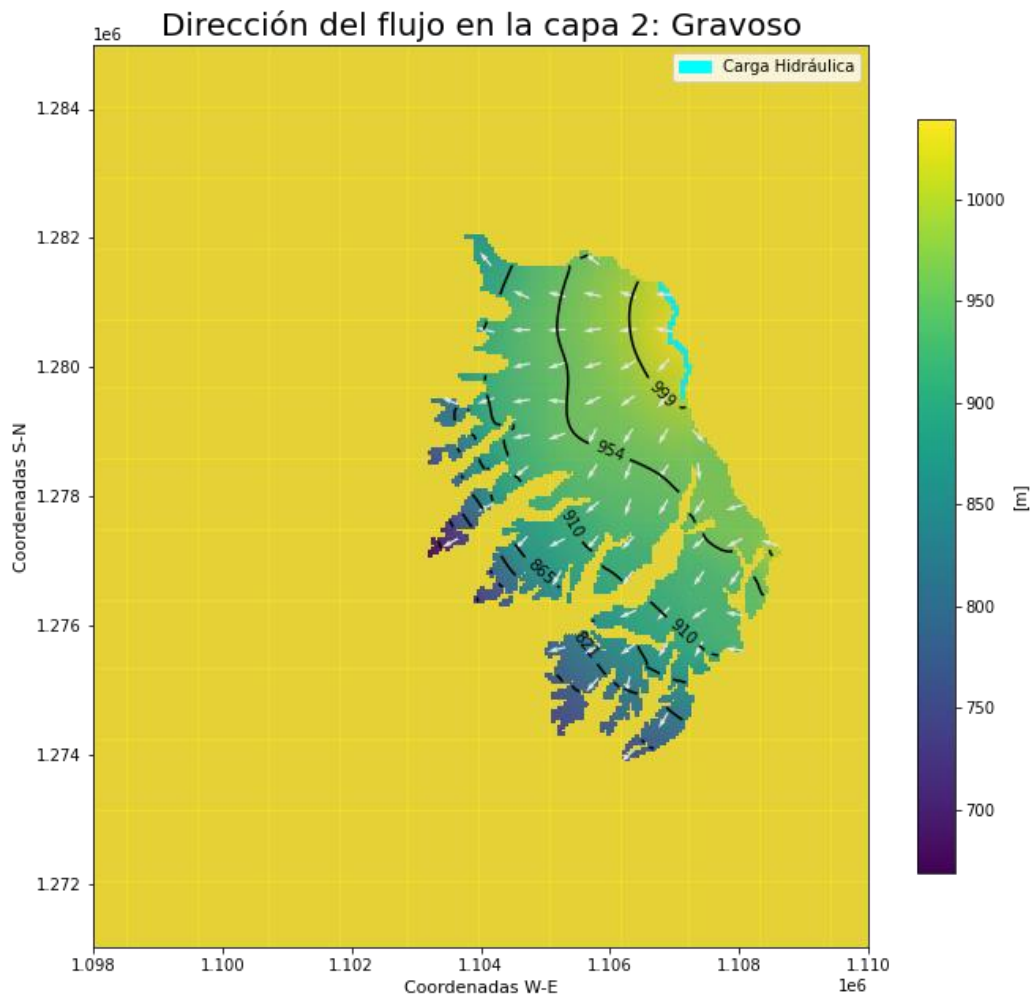
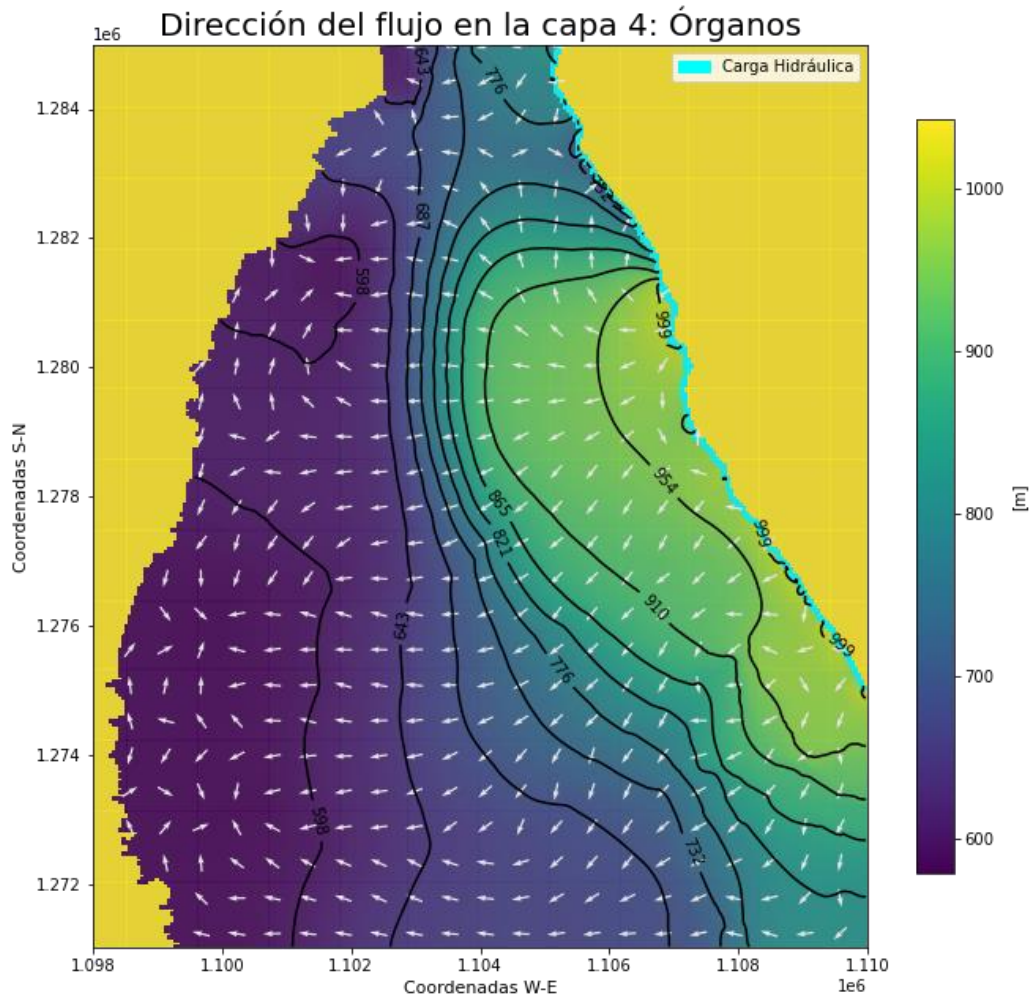


Figura 28

Resultados del flujo subterráneo en la capa 4, después de la calibración



4.3 Análisis de Sensibilidad

Tras el proceso de calibración del modelo se determinó el parámetro con mayor influencia en las cuatro capas del modelo al calcular la sensibilidad promedio obtenida de la matriz Jacobiana antes y después de la calibración obteniendo el mayor valor de sensibilidad entre la conductividad

hidráulica horizontal y vertical, esto es para tener una noción de cuánto podrían variar las observaciones con respecto a los parámetros suministrados al modelo al inicio y al final del ajuste. A continuación, se simplifican estos resultados para el análisis de la Jacobiana inicial (iteración 0) y Jacobiana final (iteración 20) en la siguiente Tabla 3:

Tabla 3

Sensibilidad promedio y parámetro de mayor influencia en las capas del modelo

Parámetro con mayor influencia			Parámetro con mayor influencia		
JCB inicial			JCB final		
Capa	Promedio máximo	Parámetro	Capa	Promedio máximo	Parámetro
1	13.7442	HK	1	11.2753	HK
2	4.3685	HK	2	3.5912	HK
3	1.2092	VK	3	0.1774	VK
4	5.7808	HK	4	2.9097	HK

De la tabla mostrada anteriormente, se observa que la conductividad hidráulica horizontal es la más importante en el comportamiento hidráulico del acuífero, el cual se encuentra presente en las capas Limos Rojos, Gravoso y Órganos, siendo Finos el único miembro con la conductividad hidráulica vertical como el parámetro más influyente antes y después de la calibración del modelo. Las sensibilidades promedio después de la calibración para cada punto piloto de conductividad hidráulica horizontal para las capas Gravoso y Órganos son representados

gráficamente (Figura 29 y Figura 30) para observar el comportamiento de cada uno a lo largo de su extensión en el dominio, excluyendo Limos Rojos pues es un parámetro que no influye en gran parte el modelo al considerarse constante en este caso, como se menciona anteriormente en el capítulo 3.2, y Finos que tiene la conductividad hidráulica vertical como su parámetro de mayor influencia:

Figura 29

Sensibilidades promedio de los puntos piloto en la capa 2

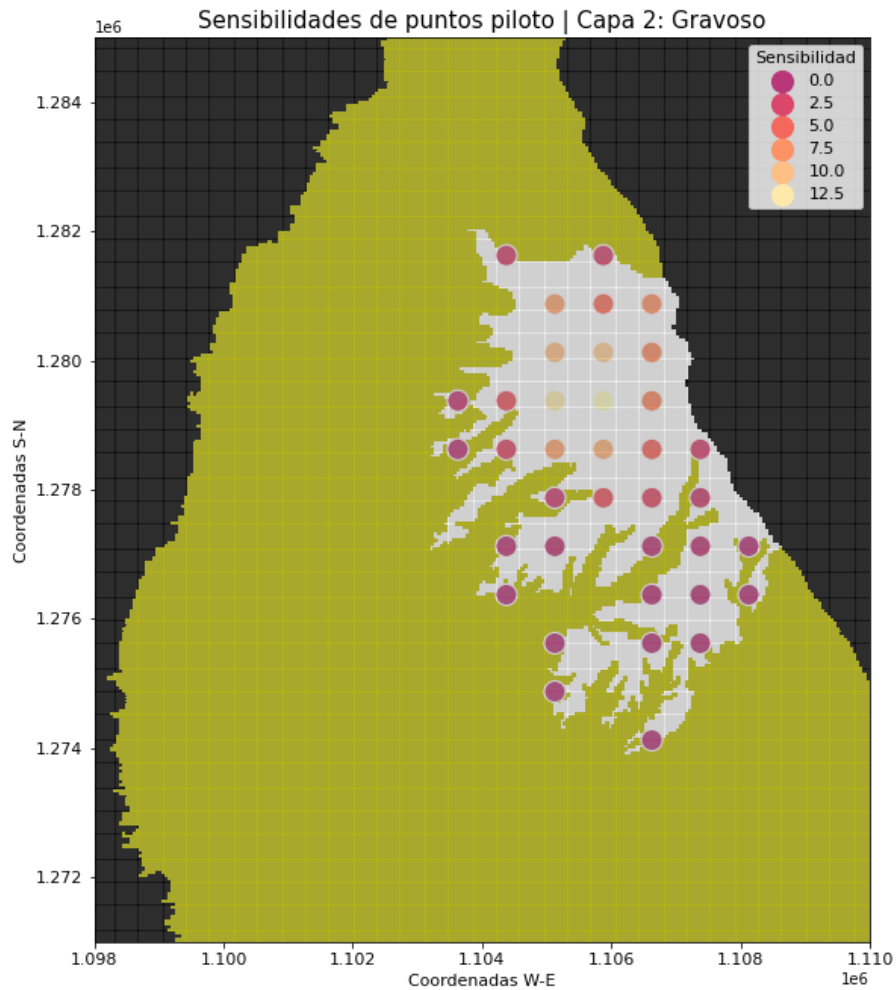
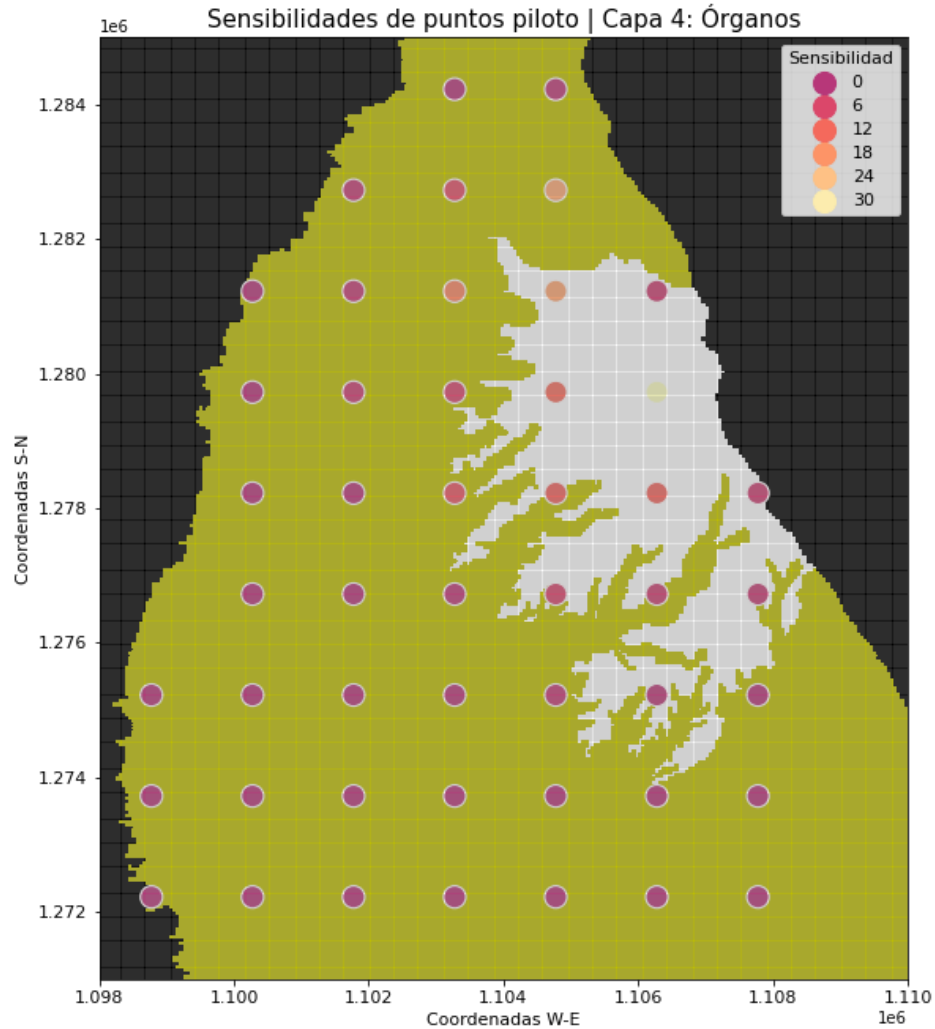


Figura 30

Sensibilidades promedio de los puntos piloto en la capa 4



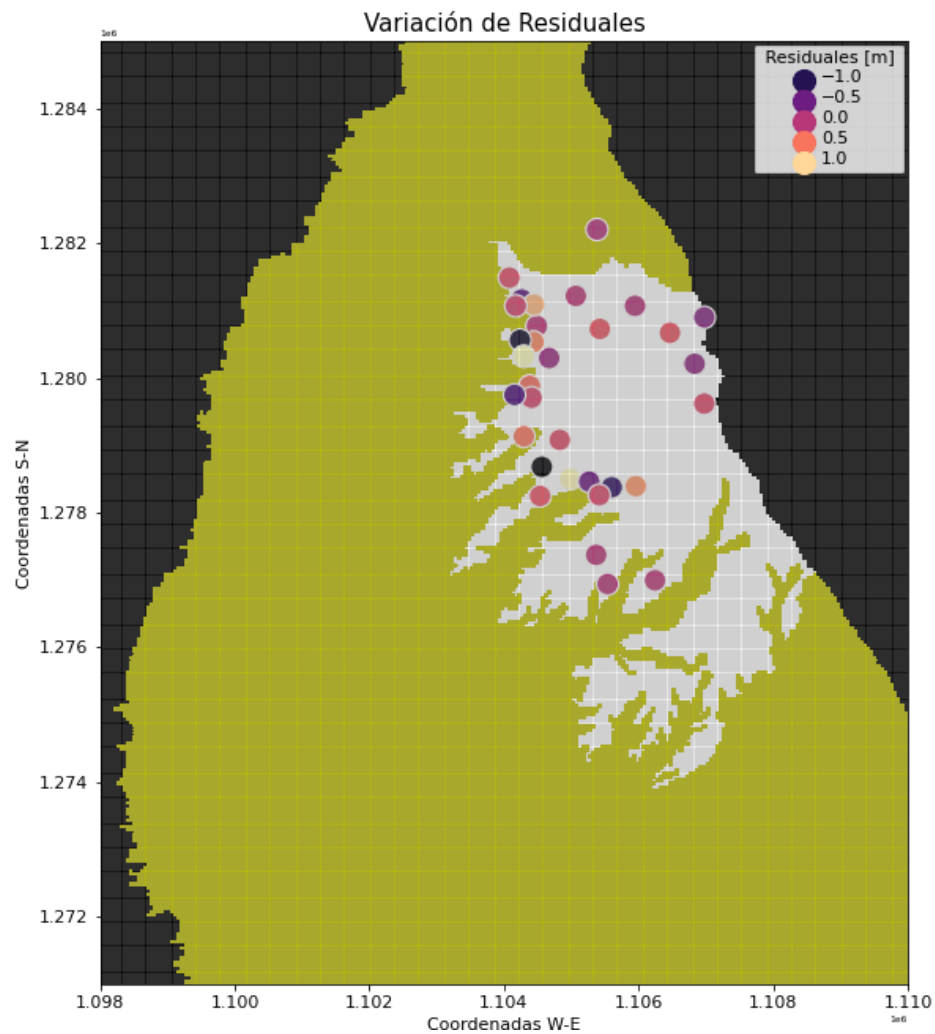
Como se observa en la Figura 29 y Figura 30 los puntos piloto presentan variaciones en sus sensibilidades con valores más grandes a medida que se acercan al miembro Gravoso, donde se encuentran la mayoría de las observaciones mostradas en la Figura 14.

Los resultados también permitieron graficar la variación a lo largo del dominio de los residuales en cada punto de observación (Figura 31), en donde las observaciones cercanas a la

carga hidráulica constante asignada en el borde oriental en la construcción del modelo, el residual suele aproximarse más a cero:

Figura 31

Residuales obtenidos para cada observación

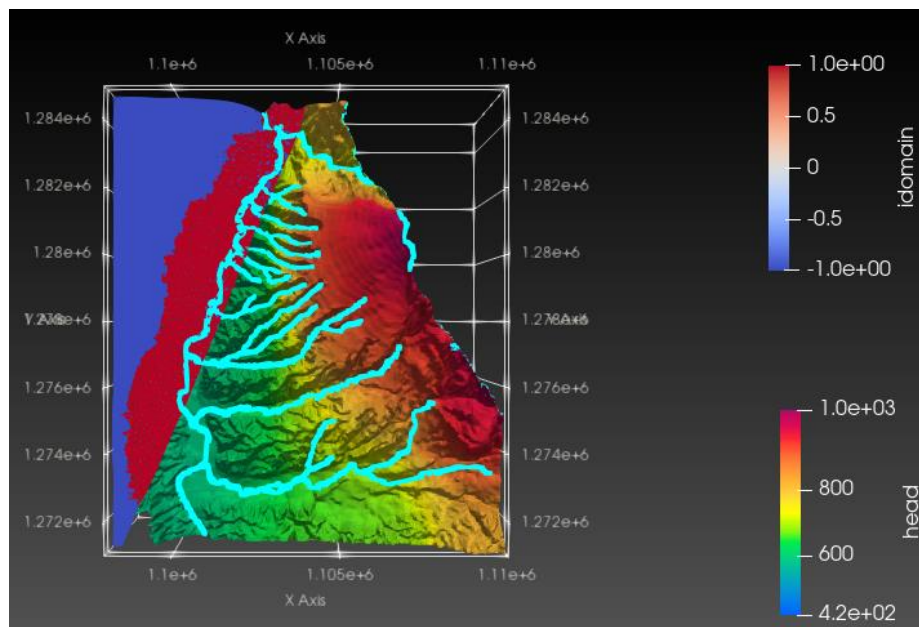


4.4 Montaje 3D del Modelo: ParaView

El resultado del montaje final de la visualización del modelo hidrogeológico tridimensional calibrado se muestra en la siguiente vista en planta de la Figura 32, que contiene las condiciones de frontera, carga hidráulica simulada dominio, paquetes RIV y CHD del modelo calibrado:

Figura 32

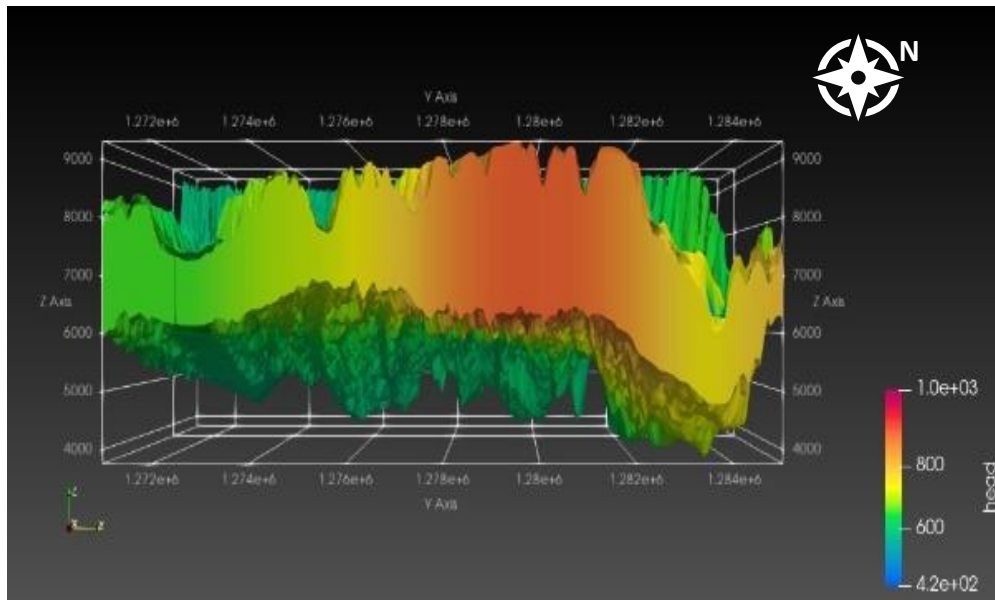
Vista en planta en 3D del modelo calibrado en ParaView



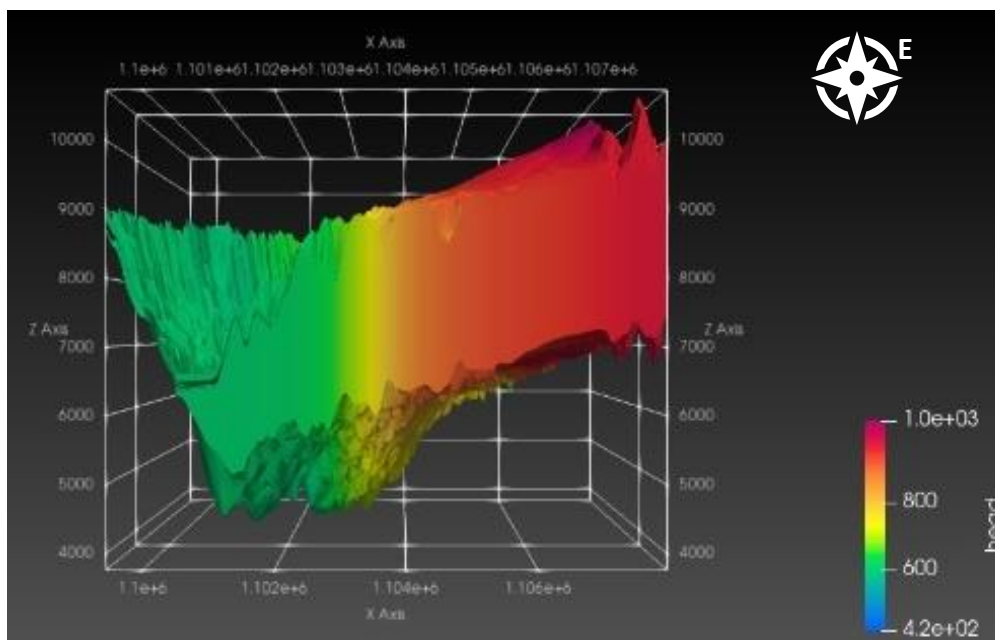
Los cortes 1 y 2 descritos en el capítulo 3.4 realizados en el software ParaView son mostrados en las siguientes Figuras 33 y 34 que consisten en cortes paralelos al eje y y eje x respectivamente a la mitad de cada eje:

Figura 33

Corte 1 en la carga hidráulica simulada del modelo calibrado en 3D

**Figura 34**

Corte 2 en la carga hidráulica simulada del modelo calibrado en 3D



En los cortes anteriores se puede observar que la carga hidráulica calibrada varía gradualmente de acuerdo con la topografía del basamento de los acuíferos, como se muestra en la Figura 34, cuya carga hidráulica disminuye de oriente a occidente al igual que la topografía del modelo. Lo anterior también permite corroborar la dirección del flujo principal mostrado en las Figuras 22 y 23 del capítulo 4.1 y Figuras 27 y 28 del capítulo 4.2 en donde gran parte del flujo subterráneo se dirige hacia el río de Oro siguiendo la topografía y otra parte más hacia el norte se dirige al río Suratá y al sur el flujo llega al río Frío como se observa en la Figura 33 en donde tanto a la derecha (norte) como izquierda (sur) del gráfico se presenta una baja en su topografía lo que representaría el río Suratá y río Frío respectivamente. Por último, la conductividad vertical y conductividad horizontal con tres cortes transversales al eje z están representadas en las siguientes Figuras 35 y 36:

Figura 35

Corte transversal al eje z para HK del modelo calibrado en 3D

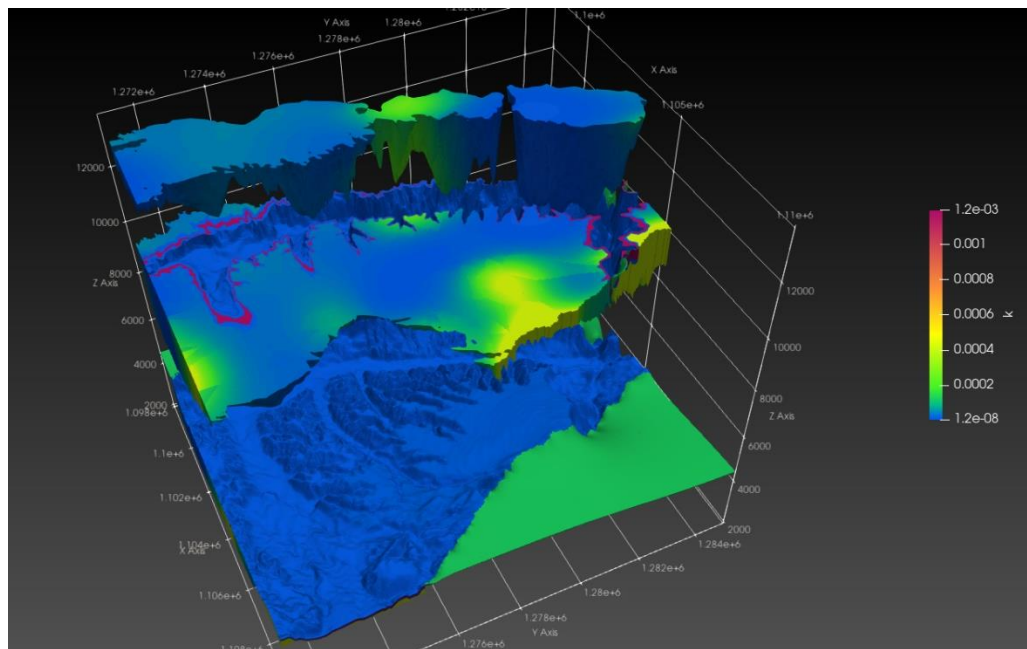
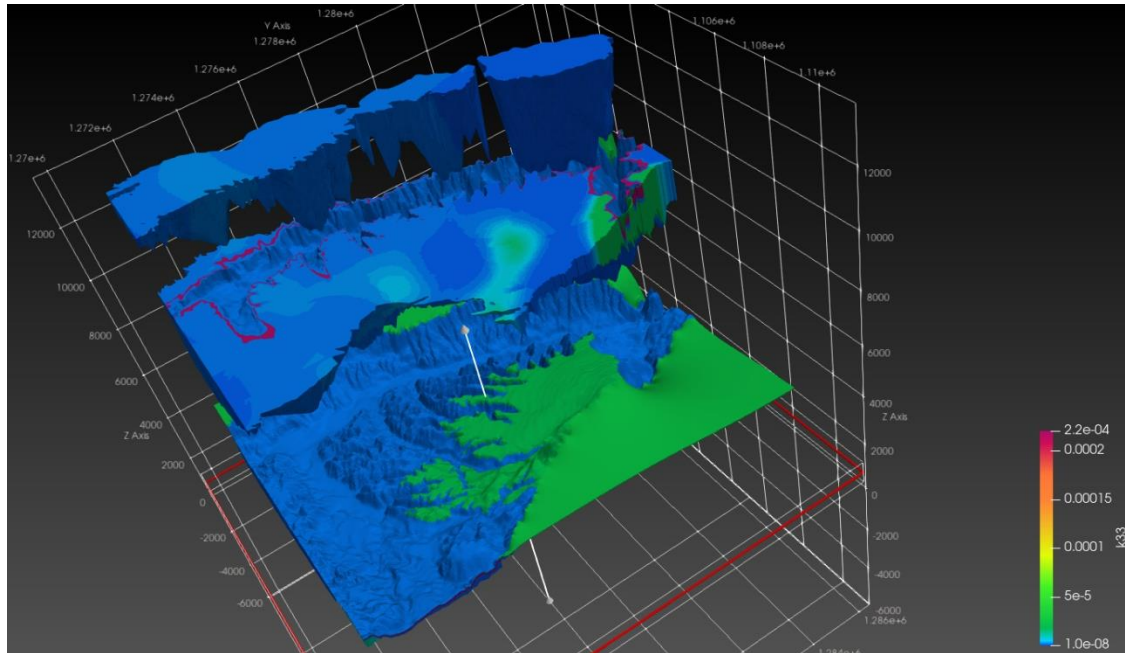


Figura 36

Corte transversal al eje z para VK del modelo calibrado en 3D



Estos cortes fueron realizados a la mitad de la profundidad para mejor visualización de la variación de la conductividad calibrada y ordenados de mayor extensión a menor extensión de abajo hacia arriba, siendo el de mayor extensión la superficie del modelo y los siguientes arriba de él, los cortes realizados a la conductividad horizontal y vertical a la mitad del espesor total del modelo hidrogeológico calibrado respectivamente. En los Apéndices L a N se muestran vistas adicionales del montaje del modelo incluyendo condiciones de frontera, contorno de carga hidráulica y malla del dominio.

5 Discusión y Conclusiones

- Se realizó la reconstrucción del modelo hidrogeológico a través de FloPy y MODFLOW 6, presentando resultados aceptables con una discrepancia igual a 0.01%. Esta baja discrepancia obtenida con un bajo costo computacional en los resultados es producto de la simplificación del modelo al ser asumido como confinado debido a las limitaciones en recursos computacionales para realizar la calibración de este en condiciones más cercanas a la realidad. De igual manera, FloPy demuestra ser una herramienta versátil para el modelamiento de aguas subterráneas en Python pues el montaje y ejecución del modelo pudo desarrollarse por completo principalmente usando esta librería.

- El espaciamiento en las isopiezas identificado en la Figura 27 y Figura 28, se debe a un aumento de la conductividad hidráulica especialmente en donde las isopiezas están más separadas, pues si se compara la Figura 26 con la Figura 28 se puede observar que en Órganos la conductividad hidráulica presenta valores más altos que se encuentran sombreados en color amarillo hacia el oriente de su dominio y otra parte en tonalidades verde claro y amarillo hacia el sur y occidente que coincide justamente con las separaciones más amplias de las isopiezas mostradas en la Figura 28. De igual manera, las zonas sombreadas en morado representan conductividades hidráulicas horizontales más bajas e isopiezas más juntas, lo que explica la razón del comportamiento menos abrupto de la carga hidráulica en el modelo calibrado, comparado con la carga hidráulica del modelo antes de la calibración.

- La calibración presenta un ajuste bastante bueno al acercarse a la diagonal de la gráfica mostrada en la Figura 18, sin embargo, esto puede ser debido a que es un modelo altamente parametrizado, con suficientes parámetros para lograr un ajuste muy bueno (overfitting), sin tener necesariamente parámetros cercanos a la realidad, sin embargo, dado que se usó regularización de Tikhonov este efecto se amortigua, sin descartar que puedan existir sesgos en la calibración producto de una regularización incorrecta.

- La calibración del modelo hidrogeológico a través de PEST++ y pyEMU demuestra un comportamiento aceptable con los datos iniciales suministrados pues logra obtener valores residuales cercanos a cero, y una variación de conductividad hidráulica que respeta los límites asignados en la configuración de PEST++, pues para todas las capas del modelo se obtuvieron valores de conductividad hidráulica que se movieron entre los bordes de los límites establecidos en la asignación de puntos piloto por medio de pyEMU (ult_ubound/ult_lbound), a excepción de Limos Rojos el cual obtuvo un valor cercano a los valores iniciales del modelo. La poca variación de Limos Rojos en estos resultados estaría relacionada al hecho de que es una capa que no participa demasiado en el acuífero real, por lo tanto, el modelo presenta poca sensibilidad a su valor dejándolo cercano a su valor inicial.

- De las estadísticas obtenidas de la calibración en Python el residual máximo y la media absoluta disminuyeron alrededor de un 14% con respecto al resultado de la calibración manual realizada por Antolínez (2014). La media absoluta y el residual máximo disminuyeron 13.58% y 15.49% respectivamente y, por último, el promedio del residual de las observaciones con respecto a la calibración manual se reduce un 92.67%, lo que indica que el modelo

calibrado en Python presenta una mejora significativa en sus resultados frente a la calibración manual y, por lo tanto, se acepta la calibración del modelo en Python a través de pyEMU y PEST++.

- La curva de variación de Phi vs. Ejecuciones del modelo demuestra una disminución rápida y significativa con respecto a su valor inicial al obtenerse un valor de Phi igual a 11.7575 equivalente a un 0.00173% del valor inicial. Además, su representación gráfica manifiesta a grandes rasgos un trayecto relativamente suavizado, que es lo que normalmente se espera al utilizar los métodos Tikhonov y descomposición de valores singulares (SVD).

- La dirección del flujo, en general, no presentan mayores variaciones antes y después de la calibración en todas las capas pues estas continúan indicando su curso hacia principalmente, el río Suratá que se encuentra al norte y río de Oro al occidente, siendo este último el río al que se descarga gran parte del agua subterránea, pues la dirección de oriente a occidente de las líneas es la más predominante debido a que las condiciones de frontera, las cuales no fueron modificadas, y son las que condicionan este comportamiento.

- En el proceso de la calibración es importante mencionar que no hay respuesta cierta con relación a cuántas iteraciones deben realizarse para la calibración de un modelo de aguas subterráneas, pues esto varía de acuerdo con las condiciones iniciales y de frontera del sistema, así como también los parámetros, observaciones e incluso extensión del modelo. Pues de tener menos parámetros a calibrar y ser de una extensión menor, por ejemplo, podría requerir menos iteraciones. Al final, la decisión de cuál es el mejor ajuste obtenido es decisión del modelador.

- La sensibilidad obtenida a partir de la matriz Jacobiana del modelo dio como resultado valores de sensibilidad similares antes y después de la calibración, especialmente en Limos Rojos, lo que podría indicar que esto ocurre como consecuencia de que el modelo está linealizado al estar confinado el flujo en el modelo numérico.

- En las sensibilidades se encontró que para las capas Limos Rojos, Gravoso y Órganos el parámetro que más influye es la conductividad hidráulica horizontal y, para la capa Finos el parámetro que más influye es la conductividad hidráulica vertical. Esto es debido a que el miembro Finos actúa menos como un acuífero, y en vez de eso, actúa como basamento para Gravoso separando el acuífero superficial del acuífero profundo. Esto mismo también se plantea en la construcción del modelo hidrogeológico conceptual construido anteriormente (Antolínez, 2014) para la zona de estudio.

- La visualización del modelo hidrogeológico en 3D fue posible realizarlo satisfactoriamente incorporando la librería de FloPy en Python y ParaView, teniendo como resultado buenos gráficos a través de este programa como lo harían otros software comerciales, lo cual es una ventaja como software libre.

- En base a lo obtenido se demuestra que a través de la metodología de esta investigación se puede optimizar la calibración de este modelo hidrogeológico descrito, dando mayor confianza en sus resultados al conceder mayor precisión así como también facilitar su posible implementación y mejoramiento a corto y largo plazo en estudios que puedan ser relevantes para la ingeniería dentro de la zona en estudio, siendo utilizada como una

herramienta que pueda aportar conocimiento científico y apoyar la toma de decisiones para la gestión adecuada de las aguas subterráneas aliviando posibles impactos que puedan ocurrir por efectos externos sobre las mismas.

6 Recomendaciones

- Se recomienda una revisar y corroborar el modelo geológico y los ráster DEM correspondientes, pues se corrigieron algunos defectos porque MODFLOW 6 genera errores al detectar inconsistencias entre las celdas de cada capa en vacíos o con espesores negativos.
- Es recomendable calibrar las condiciones de frontera para dar mayor flexibilidad a las entradas del modelo con otros tipos de parámetros en las condiciones de frontera.
- Se recomienda realizar calibraciones con más parámetros además de conductividad hidráulica; como recarga, conductancia o almacenamiento en caso de contar con recursos tecnológicos suficientes que puedan manejar una mayor complejidad del sistema.
- Se recomienda realizar el modelamiento con capas desconfinadas y la calibración en estado transitorio ya que es lo que más se acerca a la realidad del sistema natural, pues el presente proyecto tuvo limitaciones con relación a los recursos tecnológicos para desarrollar el modelo bajo esos lineamientos. La exigencia computacional que requiere el proceso de calibración es alta por lo que se requiere un equipo de cómputo de alto rendimiento y buena

refrigeración, especialmente para modelos que incluyan más parámetros y enfoques más cercanos a la realidad que pueden tener problemas de convergencia y estabilidad.

- Con relación a las sensibilidades encontradas en los puntos piloto, se observaron puntos menos sensibles que coinciden con la falta de observaciones, por lo que se sugiere el monitoreo e identificación de nuevos puntos de observación que permitan la mejora de identificación de estos parámetros.

- Se recomienda implementar pozos de bombeo en el modelo numérico para representar el estrés al que se encuentra expuesto el flujo subterráneo en el sistema. Asimismo, en la calibración realizada en (Antolínez, 2014) se agregó un pozo que no corresponde a los identificados en campo debido a la inconsistencia de la información encontrada, por lo que se sugiere la actualización de la información de pozos en la zona de estudio.

Referencias Bibliográficas

- Antolínez, W. (2014). Modelo Numérico del Flujo de Agua Subterránea en las Formaciones Acuíferas de Bucaramanga. En *Tesis de Maestría en Ingeniería Civil*. Universidad Industrial de Santander.
- Bakker, M., Post, V., Langevin, C. D., Hughes, J. D., White, J., Leaf, A. T., Paulinski, S. R., Larsen, J. D., Toews, M. W., Morway, E. D., Bellino, J. C., Starn, J., & Fienen, M. N. (2021, febrero 18). *FloPy v3.3.4 — release candidate: U.S. Geological Survey Software Release*. <http://dx.doi.org/10.5066/F7BK19FH>
- Bakker, M., Post, V., Langevin, C. D., Hughes, J. D., White, J., Starn, J., & Fienen, M. N. (2016). Scripting MODFLOW Model Development Using Python and FloPy. *Groundwater*, 54(5), 733–739. <https://doi.org/10.1111/gwat.12413>
- Cohen, A. J. B., & Cherry, J. A. (2020). Conceptual and Visual Understanding of Hydraulic Head and Groundwater Flow. En *The Groundwater Project*. gw-project.org
- Doherty, J. (2020a). *PEST | KATACLIMA: Pilot Points* [Video]. YouTube. <https://www.kataclima.com/pest/pest-videos/>
- Doherty, J. (2020b). *PEST | KATACLIMA: Singular Value Decomposition* [Video]. YouTube. <https://www.kataclima.com/pest/pest-videos/>
- Doherty, J. (2020c). *PEST | KATACLIMA: Tikhonov Regularization* [Video]. YouTube. <https://www.kataclima.com/pest/pest-videos/>
- Doherty, J. (2020d). *PEST | KATACLIMA: What is PEST?* [Video]. YouTube. <https://www.kataclima.com/pest/pest-videos/>
- Doherty, J., & Hunt, R. (2010). Approaches to highly parameterized inversion: a guide to using

- PEST for groundwater-model calibration. *U. S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2010-5169*, 70. <http://pubs.usgs.gov/sir/2010/5169/>
- Fienen, M., White, J., & Hunt, R. (2018). *mnfienen/GW1876: Intro to Regularization*. Jupyter Notebook.
- https://github.com/mnfienen/GW1876/blob/fy19/activities/intro_to_regularization/intro_to_regularization.ipynb
- Geoscience Australia. (s/f). *What is Groundwater?* | *Geoscience Australia*. Recuperado el 18 de abril de 2021, de <https://www.ga.gov.au/scientific-topics/water/groundwater/basics/what-is-groundwater>
- Hughes, J. D., Langevin, C. D., & Banta, E. . (2017). Documentation for the MODFLOW 6 Framework. *USGS: Techniques and Methods 6-A57*, 42.
- Langevin, C. D., Hughes, J. D., Banta, E. R., Provost, A. M., Niswonger, R. G., & Panday, S. (2020). *MODFLOW 6 Modular Hydrologic Model version 6.2.1 release candidate: U.S. Geological Survey Software Release*. <https://doi.org/10.5066/F76Q1VQV>
- Lin, Y. P., Chen, Y. W., Chang, L. C., Yeh, M. S., Huang, G. H., & Petway, J. R. (2017). Groundwater simulations and uncertainty analysis using MODFLOW and geostatistical approach with conditioning multi-aquifer spatial covariance. *Water (Switzerland)*, 9(3), 1–17. <https://doi.org/10.3390/w9030164>
- Minambiente. (s/f). *Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible: Manejo de Acuíferos | Diagnóstico de las Aguas Subterráneas*. Recuperado el 5 de mayo de 2021, de <https://www.minambiente.gov.co/index.php/component/content/article/540-plantilla-gestion-integral-del-recurso-hidrico-26>
- NGWA. (s/f). *Groundwater | Groundwater fundamentals*. NGWA: The Groundwater Association.

Recuperado el 23 de mayo de 2021, de <https://www.ngwa.org/what-is-groundwater/About-groundwater>

Ordóñez, J. . (2011). Cartilla Técnica: Aguas Subterráneas - Acuíferos. *Sociedad Geografica de Lima*, 2–44.

ParaView Developers. (s/f). *ParaView*. Recuperado el 23 de mayo de 2021, de <https://www.paraview.org/>

ParaView Documentation. (2020). *1. Introduction to ParaView — ParaView Documentation 5.8.1 documentation.* User's Guide. <https://docs.paraview.org/en/latest/UsersGuide/introduction.html>

PEST++ Development Team. (2020). *PEST++ Manual Version 5.0.0.* <https://github.com/usgs/pestpp/tree/develop/documentation>

Rushton, K. (2003). *Groundwater Hydrology: Conceptual and Computational Models* - K. R. Rushton - Google Libros. John Wiley & Sons Ltd. <https://books.google.com.co/books?id=71SVmDIi8dYC&printsec=frontcover>

Salako, A., & Adepelumi, A. (2018). Aquifer, Classification and Characterization. En *Aquifers - Matrix and Fluids*. InTech. <https://doi.org/10.5772/intechopen.72692>

Sánchez, Ó., & Argüello, L. (2021, febrero 23). *Lau397/CalibrationMF6: Construcción y calibración de un modelo de aguas subterráneas*. Repositorio de GitHub. <https://github.com/Lau397/CalibrationMF6>

U.S. Geological Survey. (s/f). *Groundwater Flow and the Water Cycle*. Recuperado el 18 de abril de 2021, de <https://www.usgs.gov/special-topic/water-science-school/science/groundwater-flow-and-water-cycle>

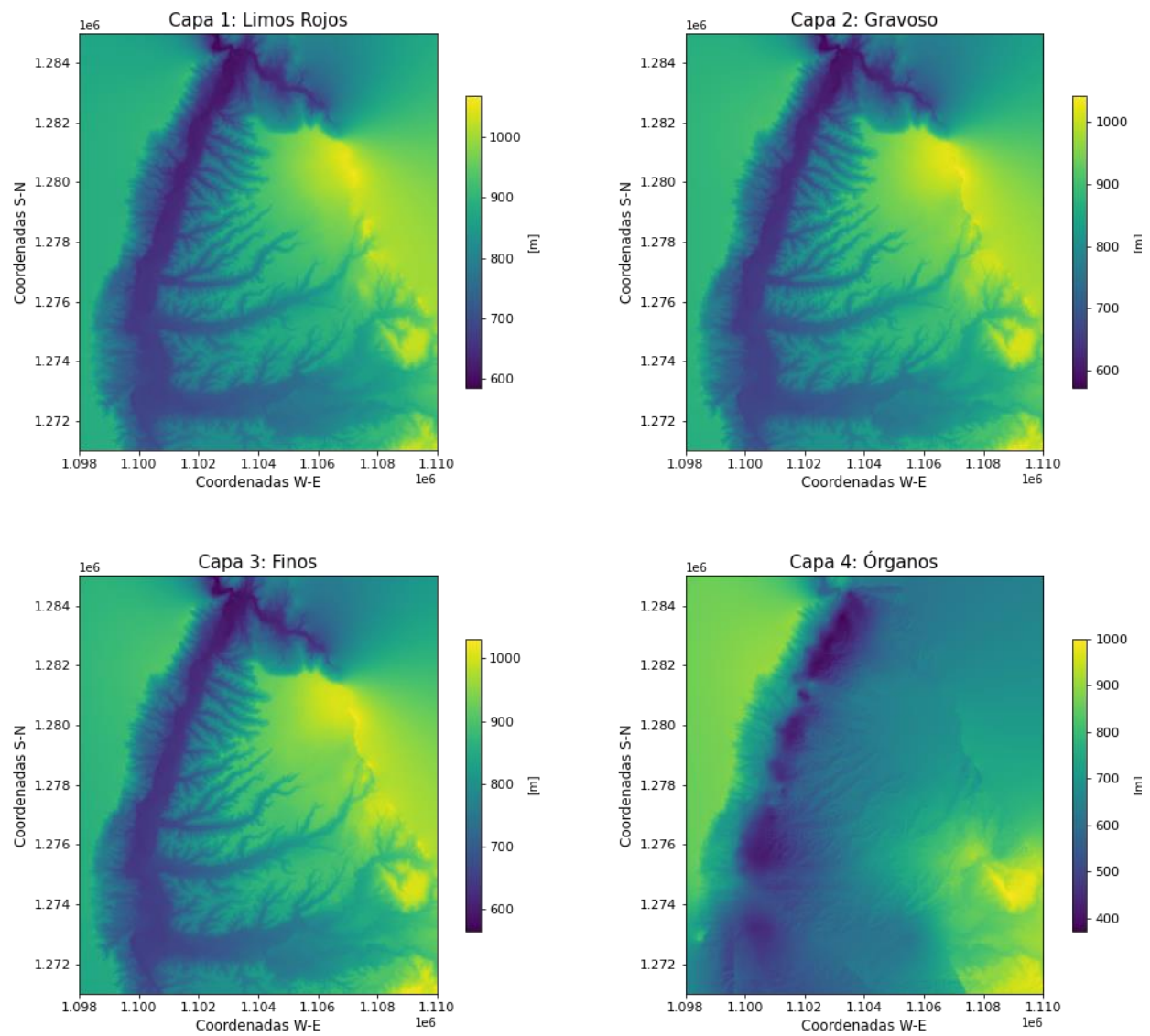
U.S. Geological Survey. (2018). MODFLOW 6 – Description of Input and Output. *MODFLOW 6*

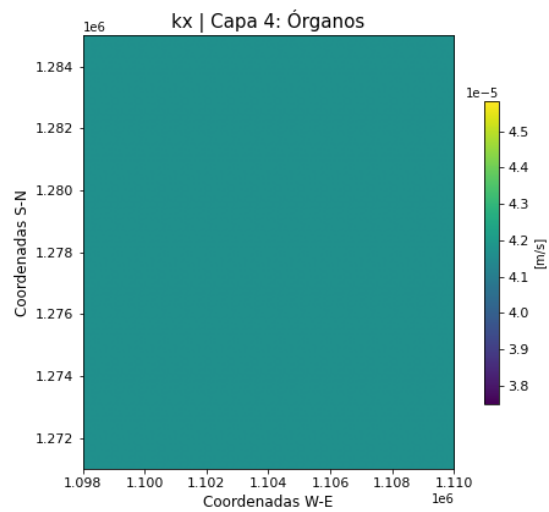
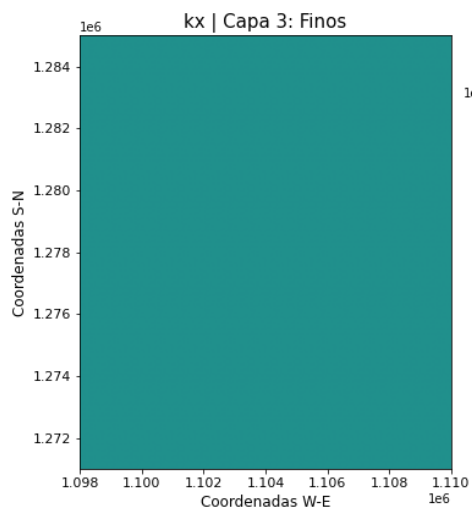
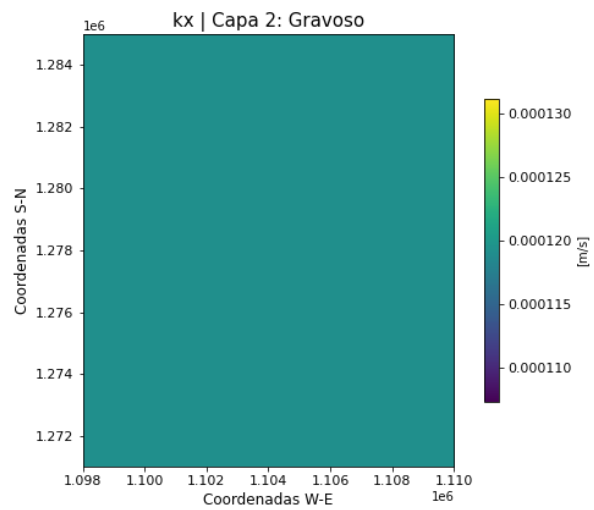
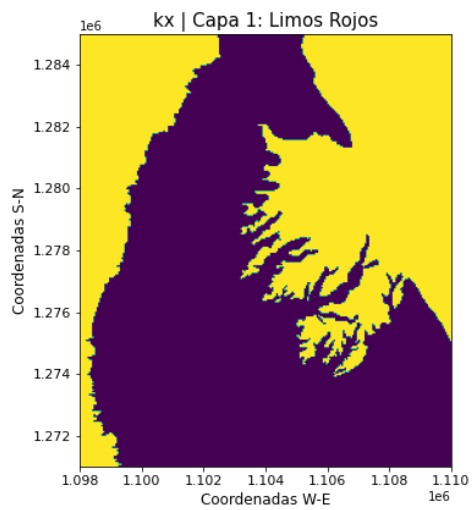
- Documentation*, 200 p. <https://water.usgs.gov/ogw/modflow/mf6io.pdf>
- UNESCO/WHO/UNEP. (1992). *Water Quality Assessments-A Guide to Use of Biota, Sediments and Water in Environmental Monitoring-Second Edition*. https://www.who.int/water_sanitation_health/resourcesquality/wqabegin.pdf
- UNESCO. (2019). *Mejorar el manejo sustentable de las aguas subterráneas*. <https://es.unesco.org/themes/garantizar-suministro-agua/hidrologia/agua-subterranea/manejo-sustentable>
- Warmerdam, F., Rouault, E., & et al. (2021). *GDAL — GDAL Documentation*. <https://gdal.org/gdal.pdf>
- White, J., Fienen, M. N., & Doherty, J. E. (2016). A Python framework for environmental model uncertainty analysis. *Environmental Modelling and Software*, 85, 217–228. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2016.08.017>
- White, J., Hunt, R., Fienen, M., & Doherty, J. (2020). *Approaches to Highly Parameterized Inversion: PEST++ Version 5, a Software Suite for Parameter Estimation, Uncertainty Analysis, Management Optimization and Sensitivity Analysis: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 7C26*. <https://doi.org/10.3133/tm7C26>
- Woessner, W., Hunt, R., & Anderson, M. (2015). Applied groundwater modeling — Simulation of flow and advective transport. En *ELSEVIER*. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(92\)90251-p](https://doi.org/10.1016/0022-1694(92)90251-p)
- Woessner, W., & Poeter, E. (2021). Hydrogeologic Properties of Earth Materials and Principles of Groundwater Flow. En *Groundwater*. <https://doi.org/10.1111/gwat.13085>
- Zhou, H., Gómez-Hernández, J. J., & Li, L. (2014). Inverse methods in hydrogeology: Evolution and recent trends. *Advances in Water Resources*, 63, 22–37.

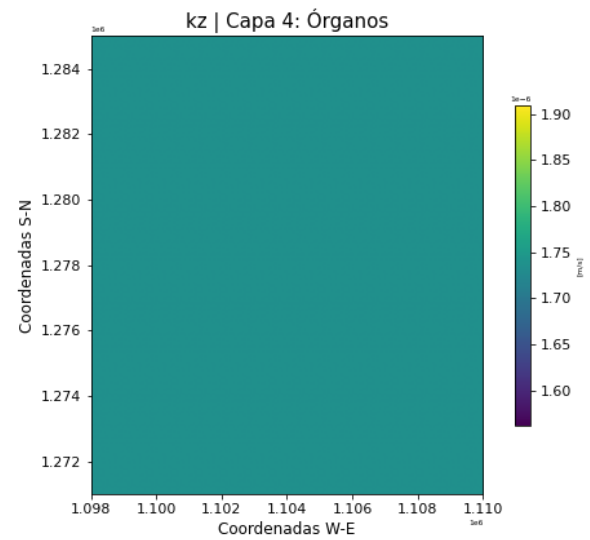
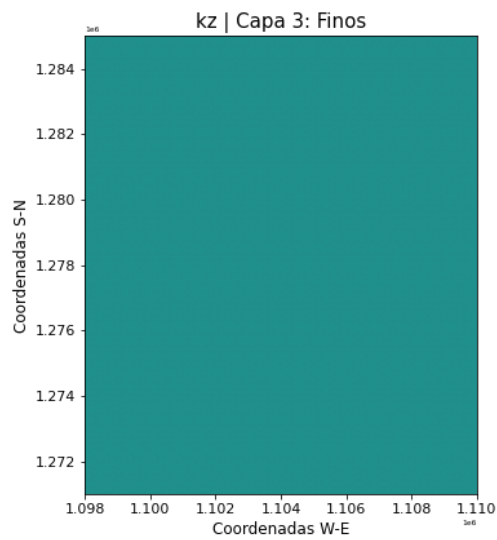
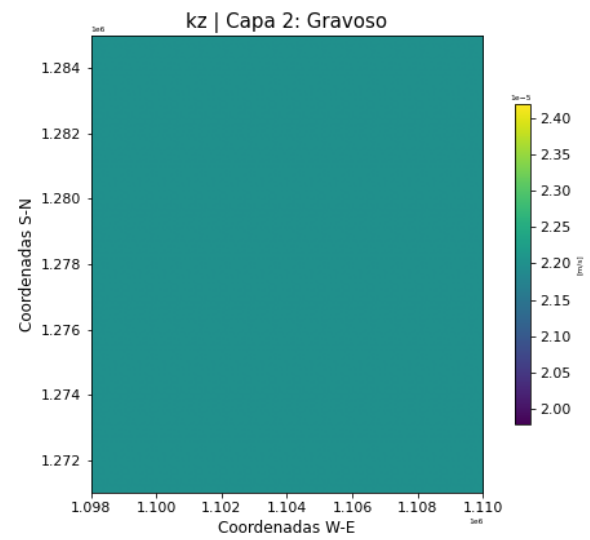
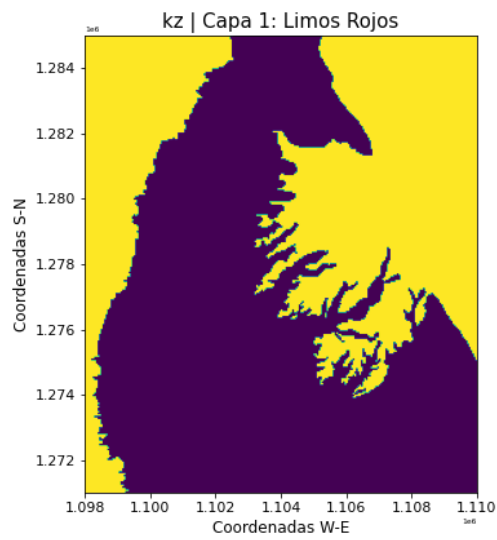
<https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.10.014>

Apéndices

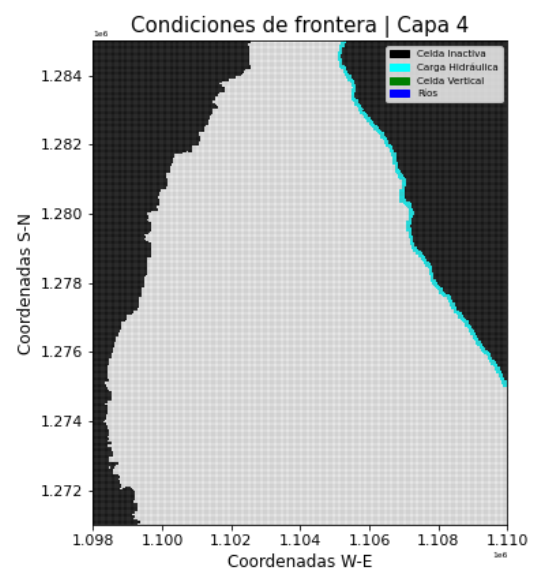
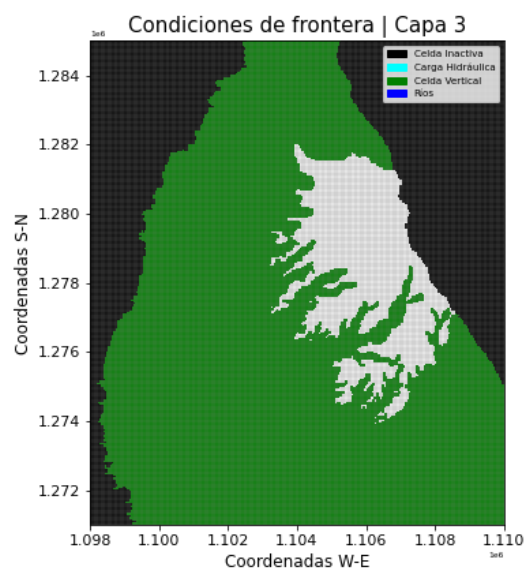
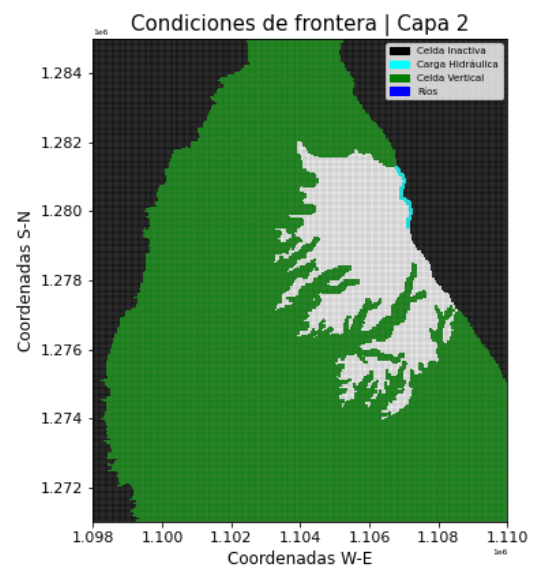
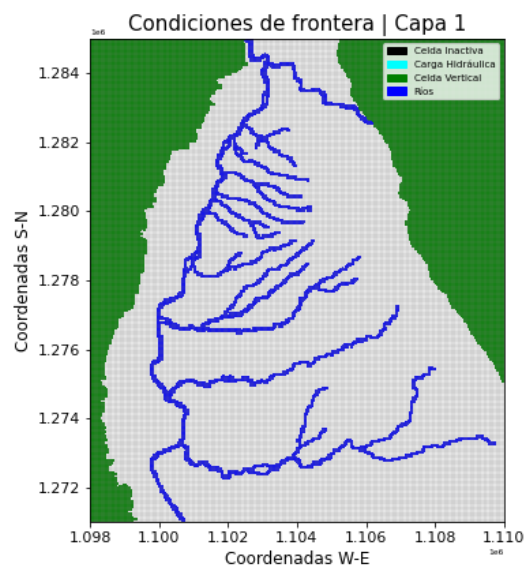
Apéndice A. Fondo de las capas del modelo hidrogeológico

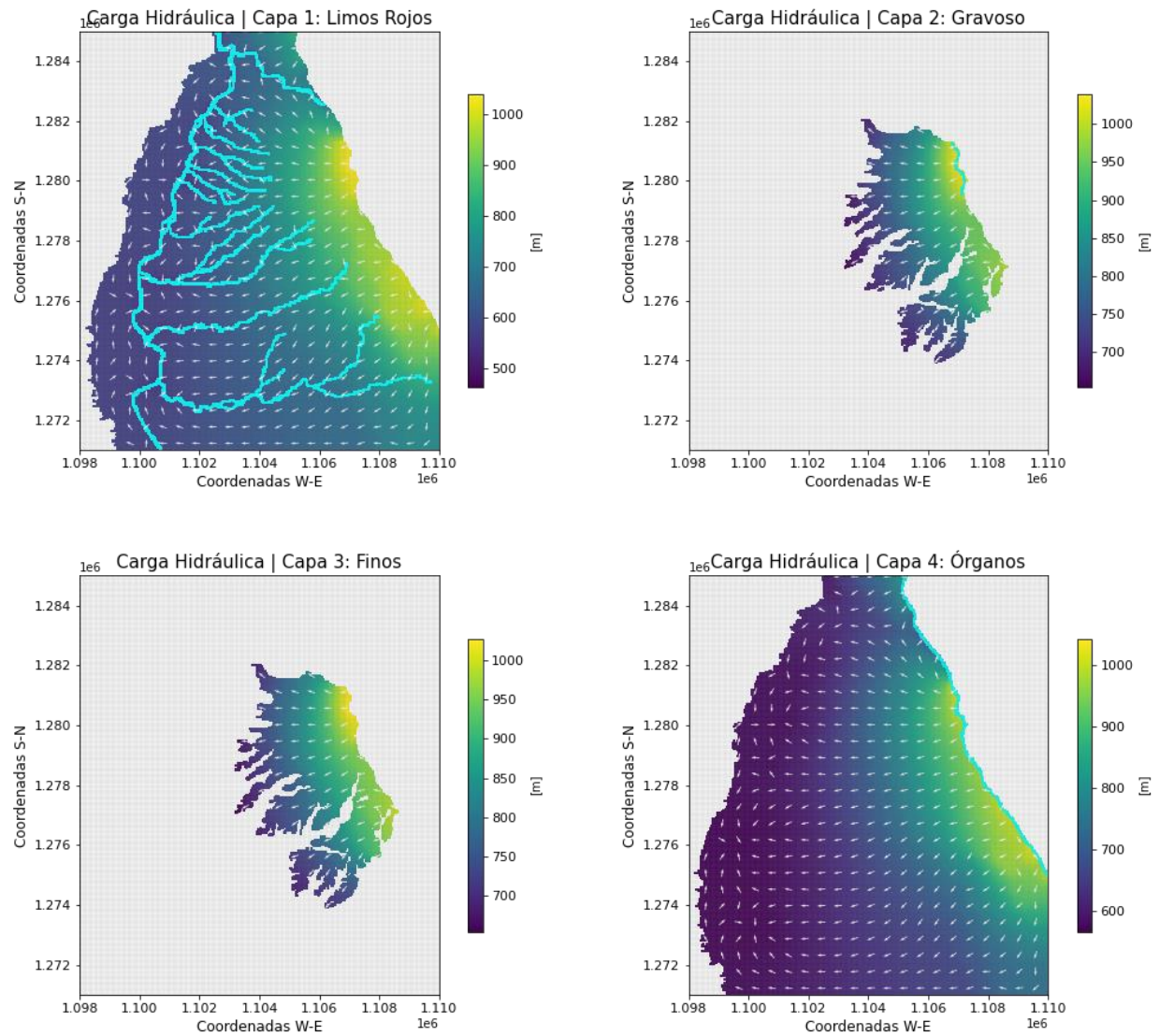


Apéndice B. Conductividad hidráulica horizontal del modelo sin calibrar

Apéndice C. Conductividad hidráulica vertical del modelo sin calibrar

Apéndice D. Condiciones de frontera y dominio del modelo hidrogeológico

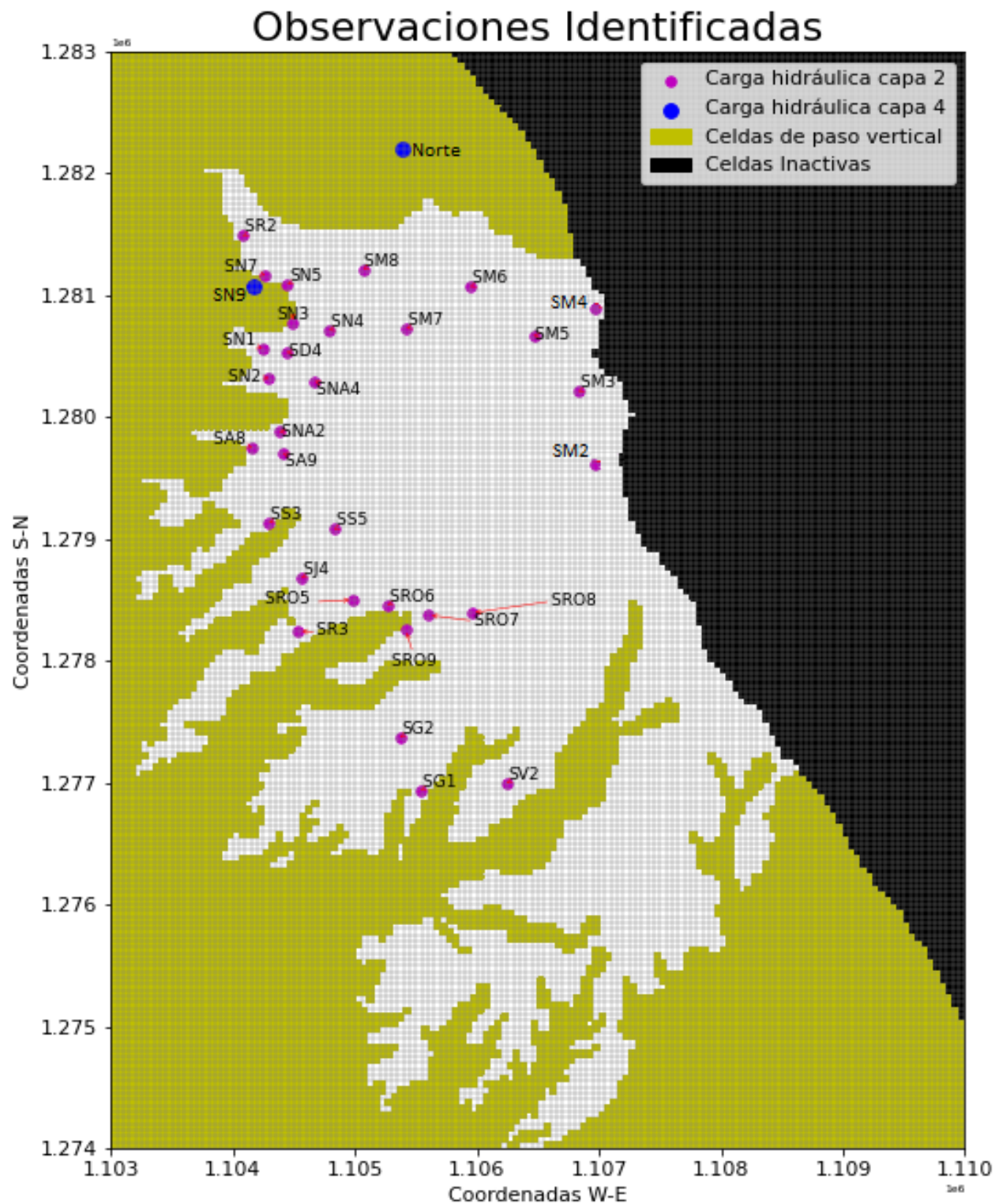


Apéndice E. Carga hidráulica y dirección de flujo del modelo sin calibrar

Apéndice F. Variación de Phi con respecto al valor inicial

Iteración	Phi	%
		Variación
0	679485	100
1	129071	18.99542
2	5410.18	0.79622
3	3078.42	0.45305
4	1148.78	0.16907
5	715.271	0.10527
6	189.121	0.02783
7	68.7618	0.01012
8	47.5359	0.00700
9	45.1952	0.00665
10	8.5624	0.00126
11	36.1441	0.00532
12	27.5215	0.00405
13	23.795	0.00350
14	20.8356	0.00307
15	18.4273	0.00271
16	16.9362	0.00249
17	14.1297	0.00208
18	13.1868	0.00194
19	12.3342	0.00182
20	11.7575	0.00173

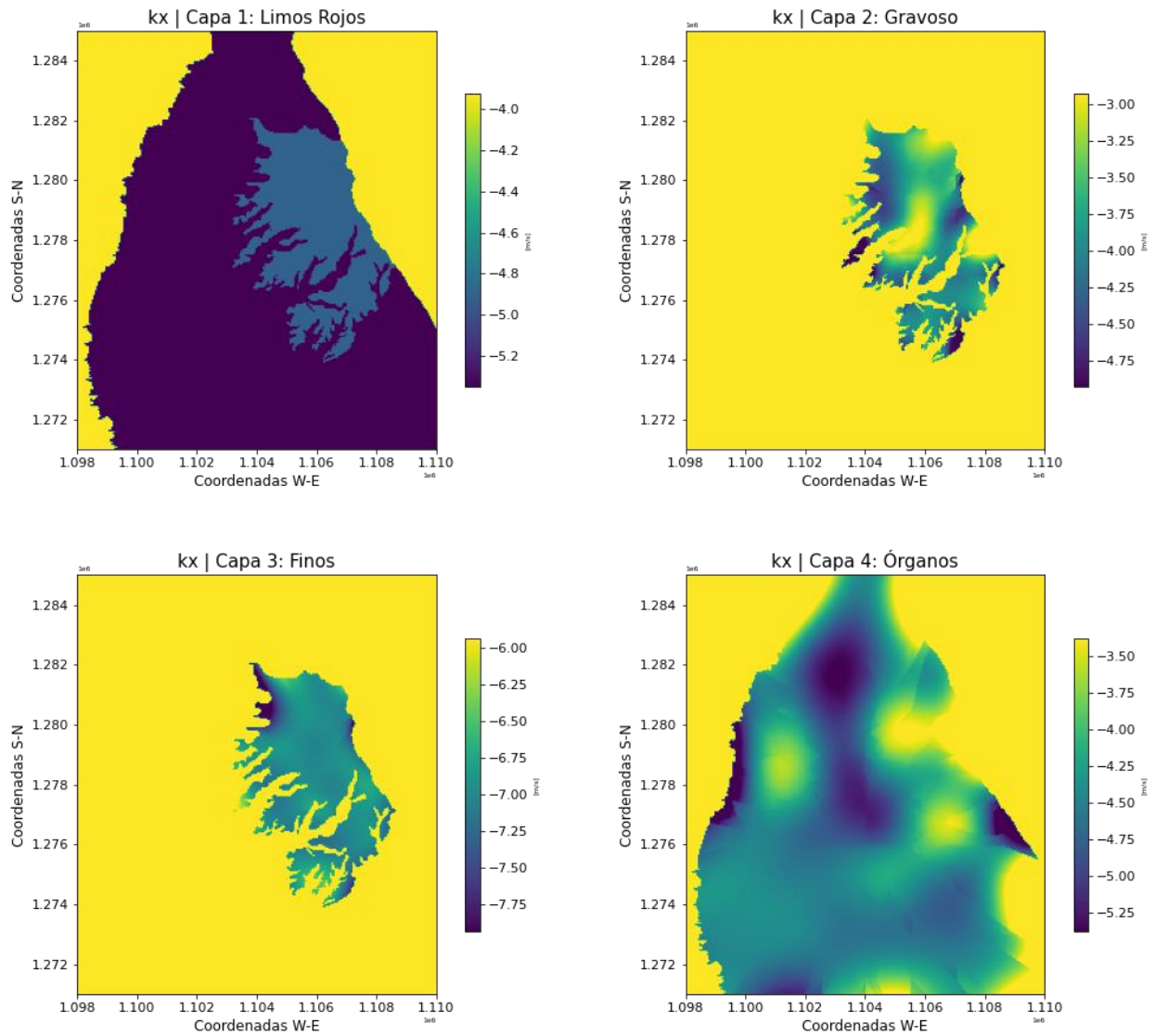
Apéndice G. Observaciones identificadas en la capa 2 y capa 4



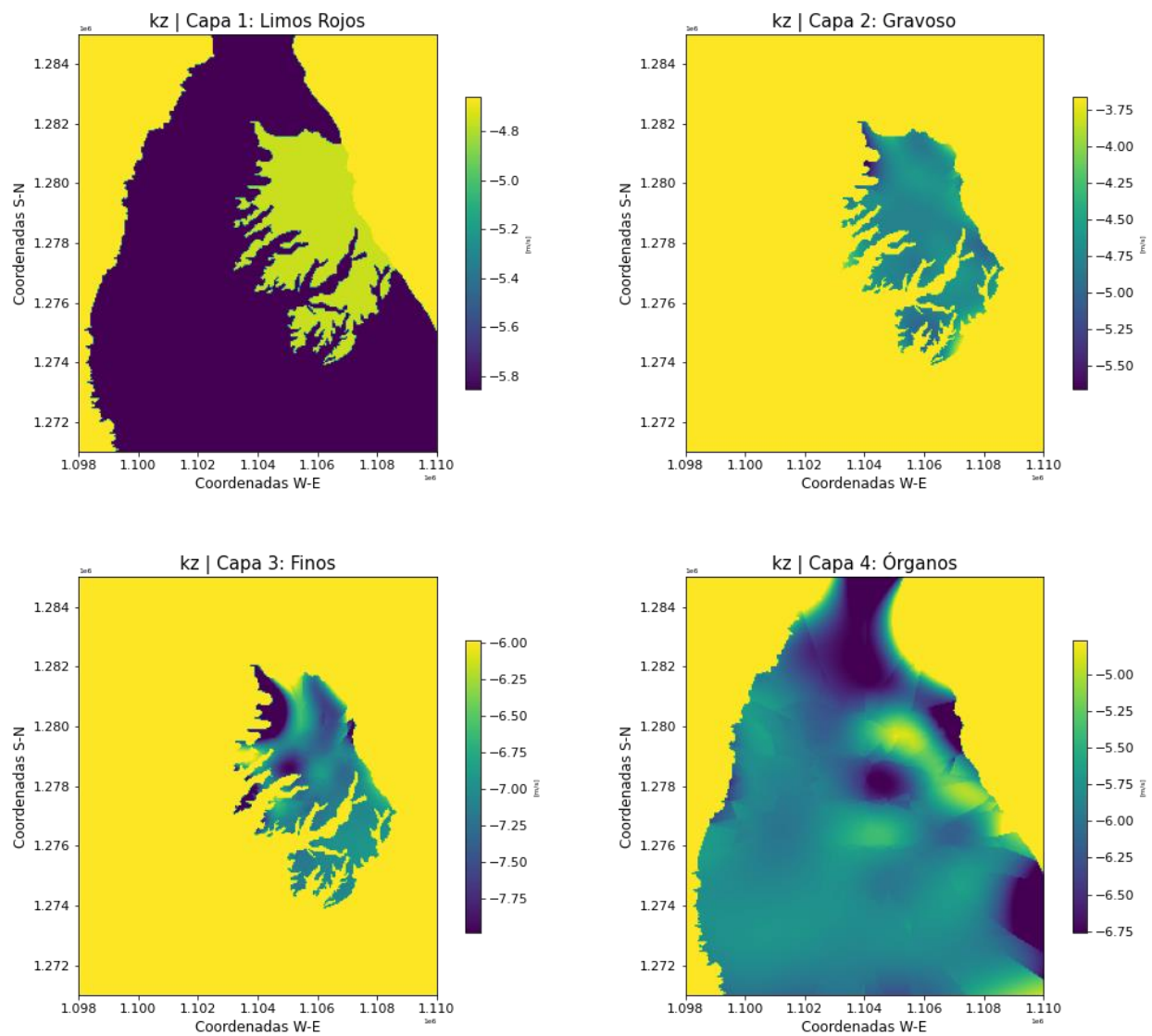
Apéndice H. Residuales obtenidos en los puntos de observación de H

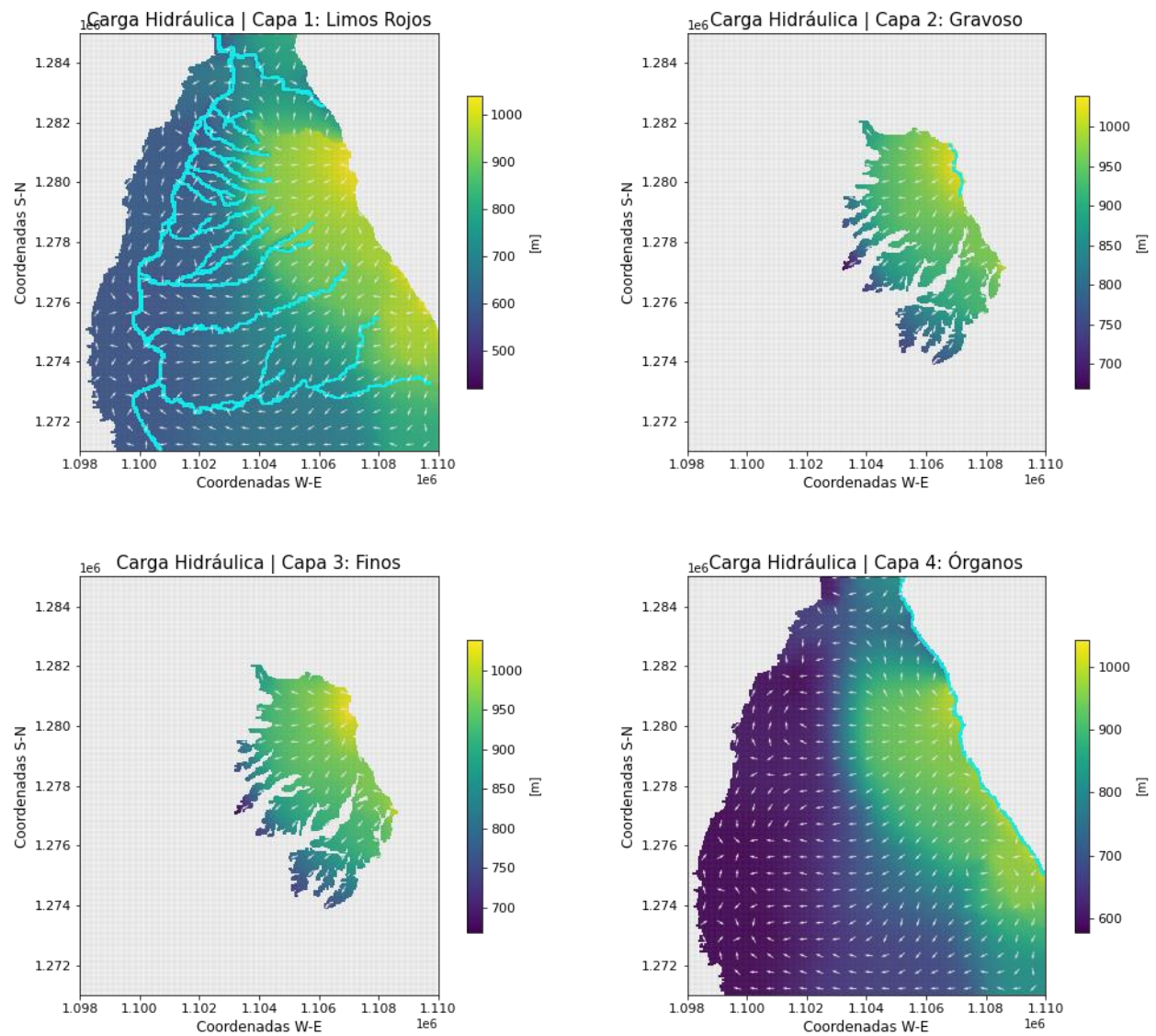
Punto	Este	Norte	Medido	Simulado	Residual
SM-2	1106974	1279619	1008.53	1008.3	0.230
SM-3	1106831	1280210	1022.04	1022.3	-0.260
SM-5	1106464	1280670	1008.61	1008.3	0.310
SRO-8	1105957	1278394	949.52	948.85	0.670
SM-7	1105422	1280727	962.34	962.03	0.310
SM-6	1105945	1281070	981.49	981.5	-0.010
SM-8	1105066	1281217	947.57	947.54	0.030
SR-3	1104535	1278247	904.98	904.68	0.300
SN-7	1104262	1281163	908.12	908.77	-0.650
SN-3	1104488	1280770	932.91	932.89	0.020
SN-4	1104788	1080712	942.28	943.09	-0.810
SNA-4	1104670	1280295	938.97	939.16	-0.190
SD-4	1104439	1280533	929.16	928.57	0.590
SN-1	1104237	1280563	917.82	919.03	-1.210
SN-2	1104292	1280322	921.75	920.55	1.200
SNA-2	1104382	1279883	926.12	925.66	0.460
SA-9	1104409	1279706	926.39	926.2	0.190
SA-8	1104155	1279748	915.61	916.32	-0.710
SS-3	1104295	1279133	911.36	910.86	0.500
SJ-4	1104561	1278680	918.37	919.78	-1.410
SS-5	1104827	1279080	934.78	934.52	0.260
SRO-5	1104983	1278502	932.23	931.05	1.180
SRO-6	1105265	1278461	939.85	940.35	-0.500
SR-7	1105600	1278377	943.69	944.61	-0.920
SRO-9	1105414	1278259	937.63	937.41	0.220
SG-2	1105368	1277373	905.09	905.08	0.010
SG-1	1105538	1276941	899.47	899.47	0.000
SV-2	1106242	1276996	915.64	915.61	0.030
SN-5	1104446	1281090	922.29	921.44	0.850
SR-2	1104079	1281488	892.73	892.47	0.260
SM-4	1106975	1280899	1029.65	1030	-0.350
Norte	1105381	1282203	818.96	818.98	-0.020
SN-9	1104174	1281069	893.12	892.95	0.170

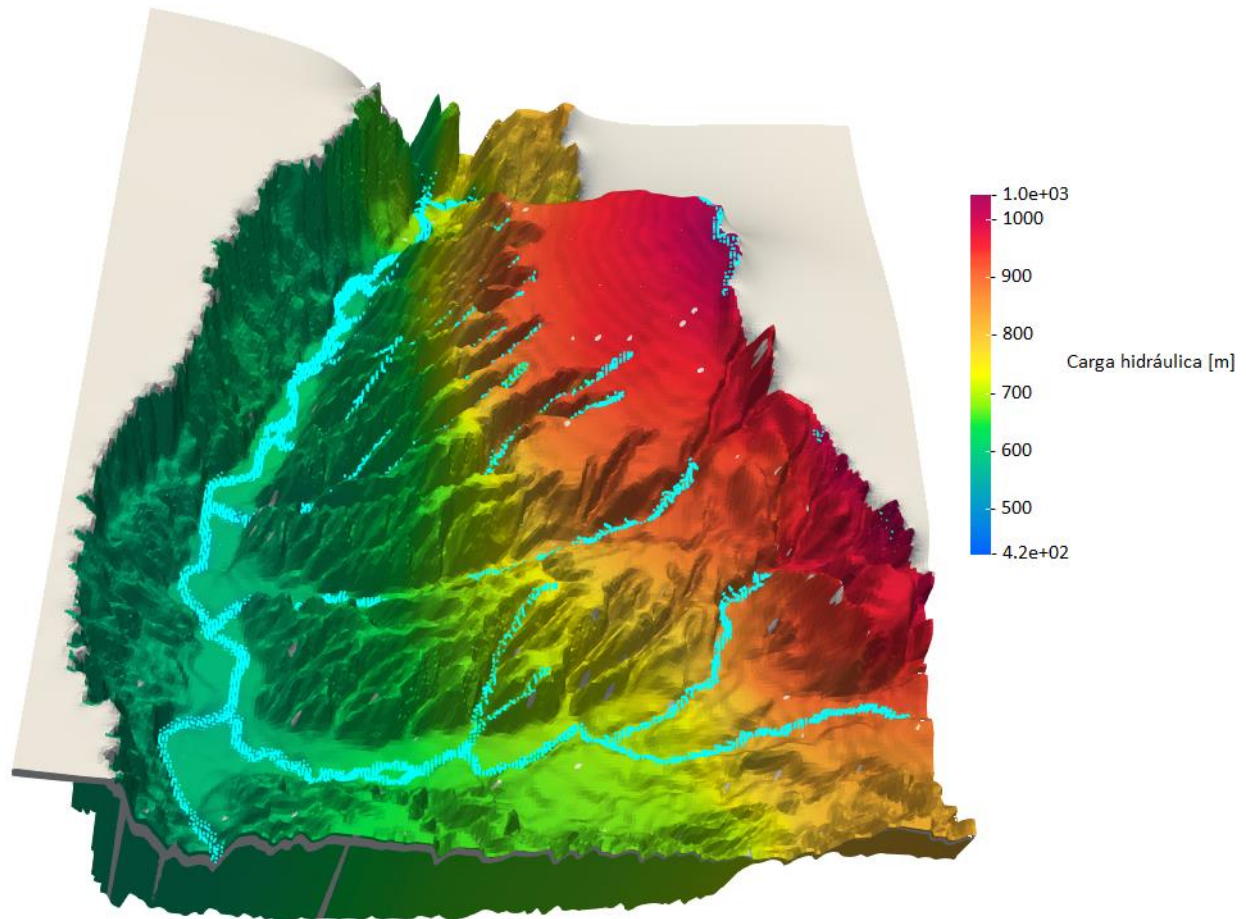
Apéndice I. Conductividad hidráulica horizontal del modelo calibrado

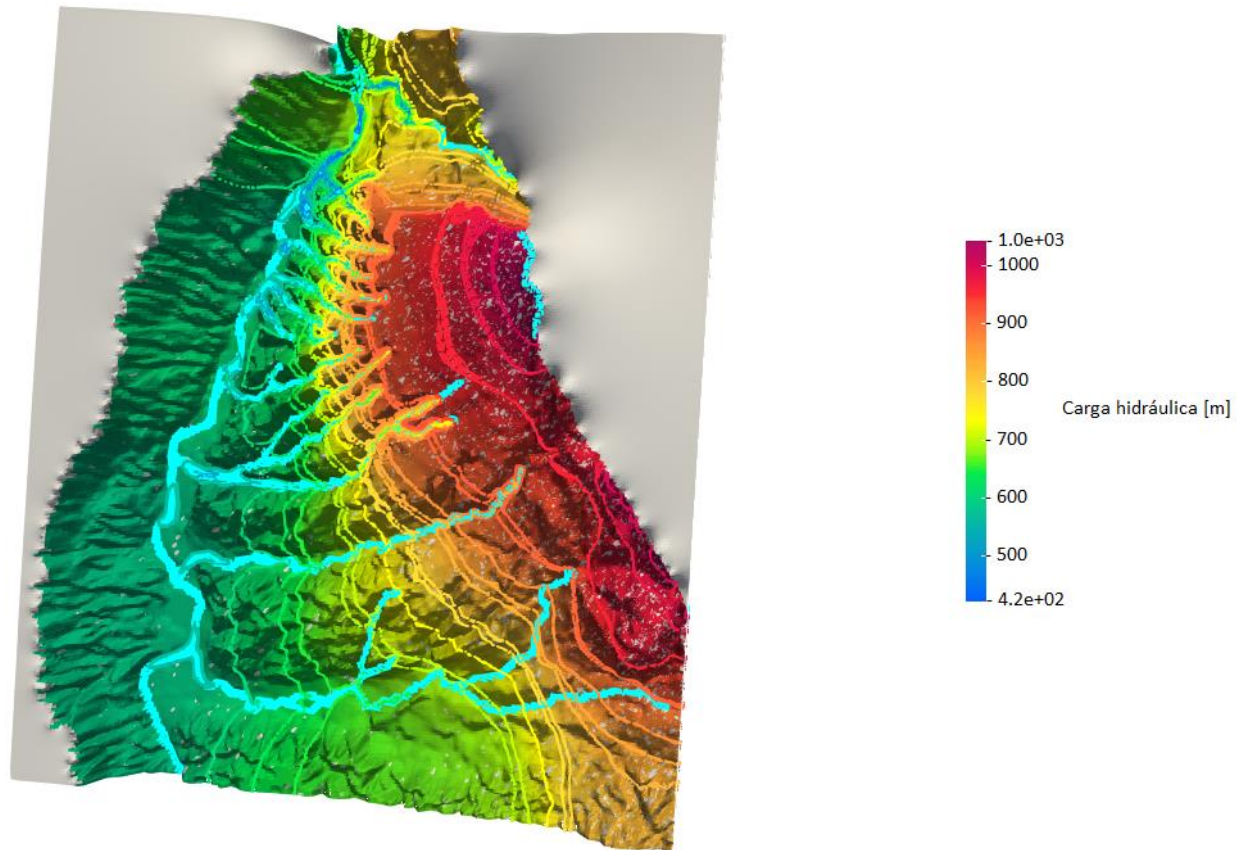


Apéndice J. Conductividad hidráulica vertical del modelo calibrado



Apéndice K. Carga hidráulica y dirección de flujo del modelo calibrado

Apéndice L Condiciones de frontera y H del modelo calibrado en ParaView

Apéndice M. Líneas de contorno de H del modelo calibrado en ParaView

Apéndice N. Contorno de H y malla del dominio del modelo calibrado en ParaView