

Estimación automática de parámetros de flujo no saturado mediante ensayos de infiltración

D. Zhenxue y J. Samper

E. T. S. Ingenieros de Caminos, Universidad de la Coruña, Campus de Elviña s/n, 15192 La Coruña.; samper@iccp.udc.es

RESUMEN. Se presenta una metodología de estimación automática de parámetros de flujo no saturado basada en la minimización de una función de mínimos cuadrados generalizados que permite estimar los parámetros de la curva de retención y de la permeabilidad relativa. La aplicación de esta metodología a ensayos de infiltración en laboratorio sobre columnas de bentonita permite concluir que la ecuación de Irmay (1954) para la permeabilidad relativa de un medio no saturado proporciona mejores resultados que las formulaciones propuestas por van Genuchten (1980).

ABSTRACT. A generalized least-squares methodology of automatic estimation of unsaturated flow parameters is presented. The methodology allows the estimation of the parameters of the retention curve as well as those of the relative permeability function. Its application to infiltration experiments performed on columns of compacted bentonite allows us to conclude that Irmay (1954) function for relative permeability provides better results than the curves proposed by van Genuchten (1980).

1.- Introducción.

Con el desarrollo de potentes y eficientes códigos para la simulación del flujo a través de medios parcialmente saturados se ha comenzado a abordar el problema de la estimación de los parámetros y curvas características de suelos no saturados. Son numerosos los trabajos que abordan la solución del problema inverso para la estimación de estos parámetros a partir de ensayos de infiltración en condiciones transitorias (Kool et al., 1985; Parker et al., 1985; Kool y Parker, 1988; Russo, 1988; Yeh y Harvey, 1990; Russo et al., 1991; Kabala y Milly, 1991; Zayani et al., 1991; Eching et al., 1994). Simunek y van Genuchten (1996) abordan la estimación de parámetros hidráulicos de suelos a partir de infiltrómetros de disco. Inoue et al. (1998) presentan la aplicación de métodos de campo de extracción de agua en suelos para la estimación de parámetros de flujo no saturado. Pan y Wu (1998) utilizan un método "annealing-simplex" para la optimización global basado en la analogía con el proceso físico de templado por

enfriamiento de metales. Otros autores resuelven el problema inverso del flujo y transporte de solutos a través de medios no saturados (Mishra y Parker, 1989; Sun y Yeh, 1990a,b; Galarza, 1993).

En este trabajo se presenta una metodología basada en la solución del problema inverso del flujo no saturado que permite estimar los parámetros de la curva de retención así como los de la curva de permeabilidad relativa. La metodología ha sido aplicada a varios tipos de curvas de permeabilidad relativa: la de Irmay (1954) y las tres propuestas por van Genuchten (1980) con el fin de determinar la curva más apropiada para la bentonita que se desea utilizar como material de sellado de un almacenamiento de residuos radiactivos de alta actividad (ENRESA, 1998).

2.- Formulación matemática del flujo no saturado.

La ecuación del flujo no saturado se obtiene a partir del principio de conservación de masa y la ley de Darcy (Bear, 1972):

$$\nabla (K_r K \nabla h) + w = \left(\phi \frac{\partial S_w}{\partial \psi} + S_w S_s \right) \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1)$$

donde h es el nivel piezométrico que contiene el término de succión, ψ , y la elevación Z , es decir, $h = \psi + Z$. La conductividad hidráulica se suele expresar como el producto de la conductividad saturada, K_s , y la conductividad relativa, K_r . S_w es el grado de saturación, definido como la relación entre el contenido volumétrico de humedad, θ , y la porosidad, ϕ , es decir, $S_w = \theta / \phi$. El grado de saturación depende de la succión a través de la curva de retención. Una de las expresiones más utilizadas es la propuesta por van Genuchten (1980):

$$S_w(\psi) = S_r + (1 - S_r) [1 + (-\alpha\psi)^n]^{-m} \quad (2)$$

donde S_r es el grado de saturación residual, m , n y $\alpha(1/L^{-1})$ son constantes que se determinan mediante el ajuste a datos experimentales de succión y contenido de

humedad.

Suponiendo que la resistencia al flujo es proporcional al área interfacial entre el sólido y el líquido y para una disposición cúbica de granos esféricos, Irmay (1954) propuso la siguiente expresión para la conductividad relativa

$$K_r(S_e) = S_e^{n_i} \quad (3)$$

donde n_i es un parámetro a estimar y cuyo valor oscila en torno a 3 y S_e es la saturación efectiva, definida como

$$S_e = \frac{S_w - S_r}{1 - S_r} \quad (4)$$

en la que S_r es el grado de saturación residual. Otras expresiones de la permeabilidad relativa son las proporcionadas por van Genuchten (1980). Combinando (2) con formulaciones de K_r como la de Mualem y Burdine, van Genuchten desarrolló una familia de funciones para la permeabilidad relativa que dependen de dos parámetros m y n , relacionados entre sí a través de la siguiente expresión

$$k = m - 1 + n^{-1}$$

donde k es un entero. Para $k=0$, es decir, para $m=1 - n^{-1}$, se obtiene la expresión más conocida y utilizada de la permeabilidad relativa de van Genuchten (modelo vG-M0)

$$K_r(\psi) = \sqrt{S_e} [1 - (1 - S_e^{1/m})^m]^2 \quad (5)$$

Para $k=1$, es decir, $m=2 - n^{-1}$, se obtiene la siguiente expresión,

$$K_r(S_e) = \sqrt{S_e} [1 - m(1 - S_e^{1/m})^{m-1} + (m-1)(1 - S_e^{1/m})^m]^2 \quad (6)$$

A partir del modelo de Burdine (1953), van Genuchten también propuso la siguiente expresión

$$K_r(S_e) = S_e^2 [1 - (1 - S_e^{1/m})^m] \quad (7)$$

que corresponde al caso $m=1-2/n$, $n=2(1-m)^{-1}$.

La ecuación de flujo (1) con sus correspondientes condiciones iniciales y de contorno pueden ser discretizadas con el método de los elementos finitos. El sistema de ecuaciones resultante es altamente no lineal pudiendo resolverse con el método iterativo de Newton-Raphson utilizando una versión del código CORE-LE (Samper et al., 1998) que permite estimar automáticamente los parámetros de flujo y transporte en condiciones de flujo no saturado (código INV-CORE-LE V0.0a).

3.- Formulación del problema inverso.

Sea p el vector ($p_1, p_2, p_3, \dots, p_m$) de los parámetros que se desean estimar. Uno de los métodos más utilizados para la estimación de parámetros es el basado en la minimización de un criterio de mínimos cuadrados generalizados, $E(p)$

$$E(p) = \sum_{i=1}^{NE} W_i E_i(p) = \sum_{i=1}^{NE} W_i \sum_{l=1}^{L_i} w_l [f(p)_l - F_l]^2 \quad (8)$$

que se compone de varios términos o tipos de datos, NE , cada uno de los cuales recibe un coeficiente de ponderación W_i . Para la interpretación de los ensayos de infiltración que se describe en este trabajo se dispone de dos tipos de datos: volumen infiltrado acumulado y contenido final de humedad ($NE=2$). Cada dato experimental tiene su propio peso, w_l que depende de su precisión (habitualmente este peso se suele tomar igual a la unidad), $f(p)_l$ es el valor calculado de la función (volumen infiltrado o contenido de humedad) por el modelo numérico y F_l es el valor medido, siendo L_i el número de datos de la i -ésima variable (que pueden ser espacio-temporales).

Existen diversos métodos para encontrar los valores óptimos de los pesos $W^*=(W_1, W_2)$. Carrera y Neuman (1986) y Sun (1994) proponen un método iterativo en el que en cada iteración se calculan los pesos mediante la siguiente expresión

$$W_i = \frac{1}{\frac{E_i(p)}{L_i}} \quad (i = 1, 2) \quad (9)$$

La minimización de la función objetivo se realiza con el método de búsqueda en la línea basado en la sección áurea que sólo requiere evaluar la función objetivo. La principal ventaja de este método es que es fácil de implementar (requiere poca programación) y se puede detener en cualquier iteración en función de la precisión deseada. Cuando se estiman dos o más parámetros, se repite la búsqueda en la línea para cada parámetro siguiendo un proceso cíclico durante el cual se actualizan los valores de los pesos (W_1, W_2). El proceso iterativo se detiene cuando la variación en los valores de los parámetros es menor que el nivel de precisión deseado o cuando la variación relativa de la función objetivo es menor que un cierto criterio de convergencia.

4.- Estimación de curvas características.

CIEMAT (Villar, 1999) ha realizado una serie de ensayos de laboratorio para la caracterización termo-hidro-mecánica de la bentonita de referencia para las barreras de ingeniería de un almacenamiento de residuos radiactivos. Para la determinación de la permeabilidad relativa se realizaron varios ensayos de infiltración. Los ensayos consisten en saturar por una cara una muestra de arcilla compactada y

confinada en una celda estanca, mientras se registra el volumen de agua infiltrado en función del tiempo. Al final del ensayo se extrae la muestra y se secciona para determinar la humedad en función de la distancia al punto de hidratación. En los ensayos SAT1, SAT2, SAT3 y SAT4 se utilizan celdas de acero de 5 cm de diámetro interno y 2.5 cm de altura. La muestra se confina entre dos piedras porosas y se hidrata por la parte superior a una presión de 10 bar. La Tabla 1 muestra las características de los ensayos.

Tabla 1. Principales características de los ensayos de infiltración.

Ensayo	SAT1	SAT2	SAT3	SAT4
ρ_d (g/cm ³)	1,65	1,65	1,70	1,70
Humedad inicial w(%)	14,2	14,2	13,9	14,1
Duración (días)	29	15	10	10
Volumen infiltrado (cm ³)	10,52	10,14	8,38	8,30
Humedad final w (%)	29,14	25,8	24,3	23,98

Con el fin de estimar la permeabilidad relativa de la bentonita (al líquido) se realizó la interpretación numérica de los ensayos de infiltración realizados por CIEMAT (Villar, 1999). Se probaron las expresiones de Irmay (1954) y van Genuchten. A efectos de la comparación, se utiliza la siguiente notación: Irmay (para el modelo de Irmay), modelo vG-M0 (Ecuación 5), modelo vG-M1 (Ecuación 6) y modelo vG-B0 (Ecuación 7). Con el modelo de Irmay se estiman los siguientes cinco parámetros: K_s , m , α , n_i , y ϕ (suponiendo en este caso que $n=1/(1-m)$). Con el método de van Genuchten sólo se estiman cuatro parámetros: K_s , m , α y ϕ . La Tabla 2 muestra los valores previos de cada parámetro obtenidos a partir de ENRESA (1998) y CIEMAT (Villar, 1999).

Tabla 2. Información previa sobre los parámetros (*: valores para el modelo vG-M1)

Parámetros	K_s (m/d)	m	n_i	α (m ⁻¹)	ϕ
Límite superior	7.20E-9	0.95/1.95*	5.5	3.0E-3	0.45
Límite inferior	2.50E-9	0.20/1.20*	2.0	1.0E-3	0.35
Valor inicial	4.85E-9	0.35/1.35*	3.0	1.3E-3	0.41
Error de tolerancia	2.0E-12	1.0E-3	1.0E-3	1.0E-6	0.001

En los ensayos se midieron los volúmenes infiltrados y el contenido final de humedad. Los resultados obtenidos para los ensayos SAT1, SAT2, SAT3 y SAT4 se resumen en las Tablas 3, 4, 5 y 6. En todos los casos se utilizó una saturación irreductible igual a 0. En general los ajustes de las curvas de infiltración son excelentes con todos los modelos y especialmente con el modelo de Irmay (Figura 1). El ajuste de los contenidos de humedad finales es también excelente (Figura 2), excepto para el primer dato de humedad (el situado cerca del borde de entrada de agua). Este dato de humedad es mayor que la porosidad inicial. Este hecho es debido al hinchamiento de la bentonita. Puesto que este efecto no se tiene en cuenta en el modelo, a

este dato se le asignó un peso muy bajo durante el proceso de estimación.

Tabla 3. Resultados de la estimación de parámetros en el ensayo de infiltración SAT1

Parámetros	K_s (m/d)	m	n_i	α (m ⁻¹)	ϕ	δ_{inf}^2	δ_{con}^2
Irmay	4.41E-9	0.361	2.84	1.393E-3	0.430	4.38E-8	1.95E-3
VG-M0	4.47E-9	0.936		1.328E-3	0.439	8.16E-7	1.21E-3
VG-M1	4.42E-9	1.930		1.230E-3	0.439	8.16E-7	1.21E-3
VG-B0	5.48E-9	0.586		1.365E-3	0.432	7.89E-8	1.75E-3

(δ_{inf}^2 and δ_{con}^2 son las varianzas de los errores de estimación de los datos de entrada de agua (inf) y de contenidos finales de humedad (con)).

Tabla 4. Resultados de la estimación de parámetros en el ensayo de infiltración SAT2

Parámetros	K_s (m/d)	m	n_i	α (m ⁻¹)	ϕ	δ_{inf}^2	δ_{con}^2
Irmay	5.30E-9	0.307	3.48	1.320E-3	0.439	6.57E-8	6.47E-4
VG-M0	5.99E-9	0.811		1.005E-3	0.439	7.08E-8	9.44E-4
VG-M1	6.62E-9	1.836		1.003E-3	0.439	9.04E-8	9.44E-4
VG-B0	5.99E-9	0.589		1.007E-3	0.439	8.14E-8	9.44E-4

Tabla 5. Resultados de la estimación de parámetros en el ensayo de infiltración SAT3

Parameters	K_s (m/d)	m	n_i	α (m ⁻¹)	ϕ	δ_{inf}^2	δ_{con}^2
Irmay	5.07E-9	0.251	2.79	1.194E-3	0.418	2.85E-8	1.30E-4
VG-M0	7.20E-9	0.905	/	1.005E-3	0.420	1.07E-7	6.83E-4
VG-M1	7.19E-9	1.921	/	1.005E-3	0.420	1.69E-7	6.83E-4
VG-B0	7.20E-9	0.805	/	1.005E-3	0.419	1.10E-7	6.82E-4

Tabla 6. Resultados de la estimación de parámetros en el ensayo de infiltración SAT4

Parámetros	K_s (m/d)	m	n_i	α (m ⁻¹)	ϕ	δ_{inf}^2	δ_{con}^2
Irmay	4.89E-9	0.217	2.54	1.446E-3	0.416	8.66E-8	3.33E-4
VG-M0	7.20E-9	0.908	/	1.008E-3	0.415	2.05E-7	7.30E-4
VG-M1	7.20E-9	1.924	/	1.005E-3	0.419	2.35E-7	9.49E-4
VG-B0	7.20E-9	0.814	/	1.005E-3	0.416	2.05E-7	7.52E-4

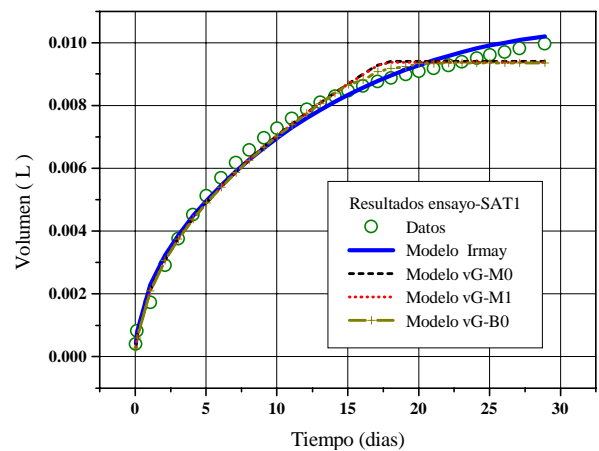


Fig. 1. Ajustes de los volúmenes infiltrados para el ensayo SAT1.

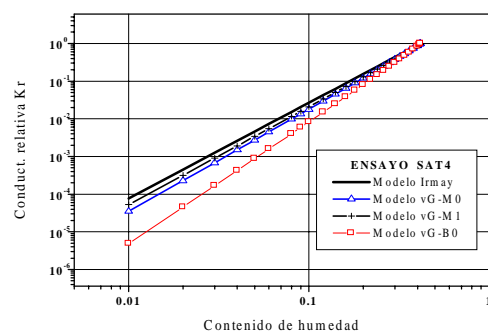
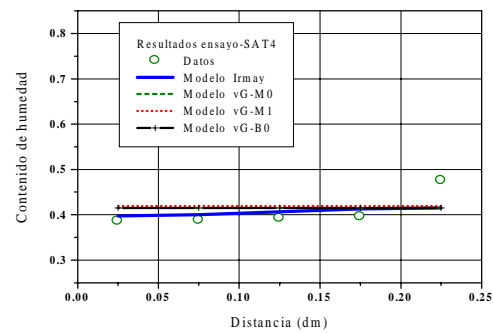
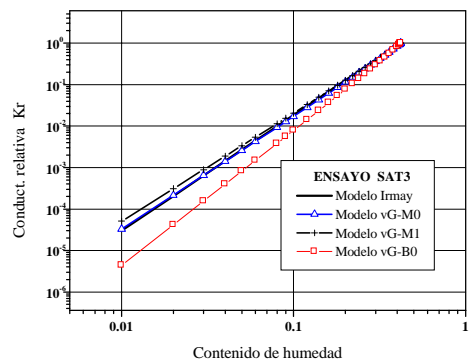
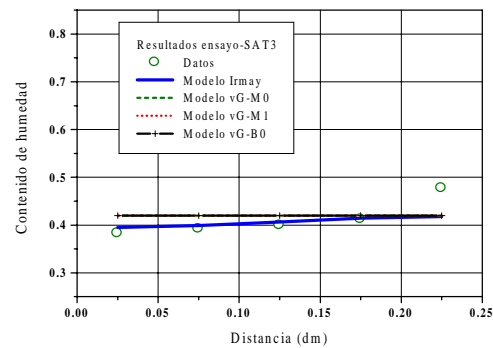
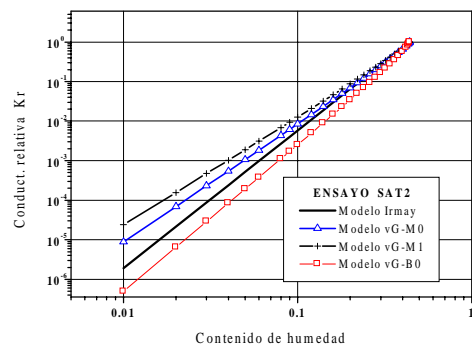
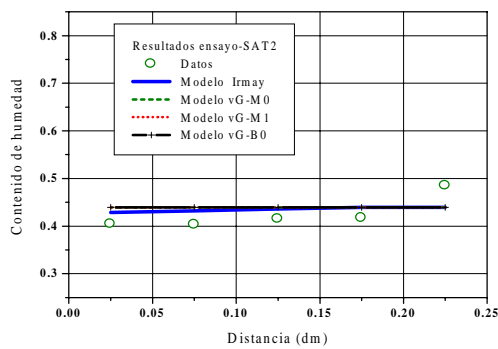
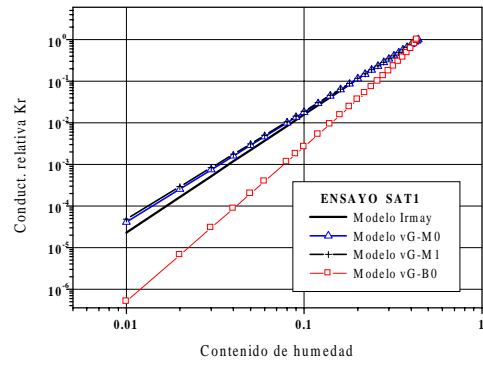
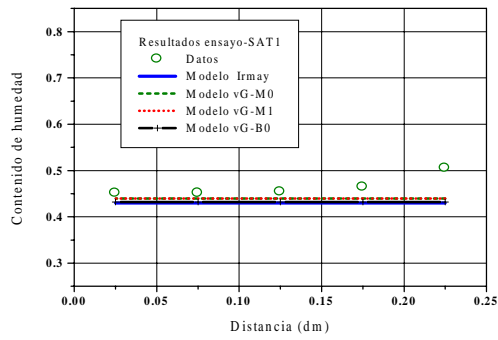


Fig. 2. Ajustes del contenido final de humedad de los ensayos SAT1, SAT2, SAT3 y SAT4. El agua entra por el extremo de la derecha.

Fig. 3. Curvas de permeabilidad relativa estimadas para cada uno de los ensayos (SAT1, SAT2, SAT3 y SAT4) con diferentes modelos

Los resultados del ajuste automático de los cuatro ensayos de infiltración ponen de manifiesto que:

- 1) El modelo de Irmay conduce a los mejores ajustes de las curvas de volúmenes infiltrados.
- 2) Con la excepción del ensayo SAT1, el modelo de Irmay también proporciona el mejor ajuste a los datos de humedades finales.
- 3) Los exponentes del modelo de Irmay oscilan entre 2.54 y 3.48, es decir en torno al valor habitualmente utilizado de 3.
- 4) Los valores de la conductividad hidráulica saturada estimados con el modelo de Irmay muestran una variabilidad menor que la de los valores deducidos con los modelos de van Genuchten (Figura 3).
- 5) Las curvas de retención obtenidas con el modelo de Irmay son las más coherentes con las medidas de succión-humedad (Figura 4).

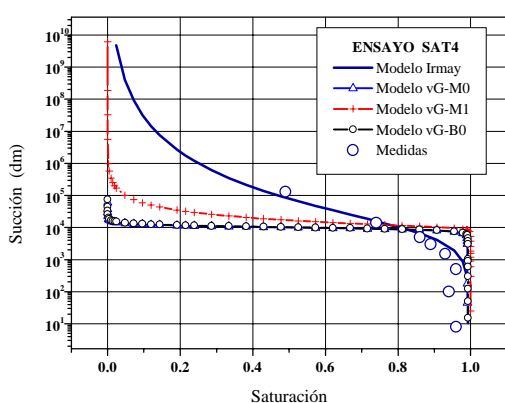


Fig. 4. Curvas de retención estimadas a partir del ensayo SAT4. Los símbolos representan los valores medidos por CIEMAT (1998)

5.- Conclusiones.

Se ha presentado una metodología para la estimación automática de los siguientes parámetros de flujo no saturado: porosidad, conductividad hidráulica saturada, parámetros de la curva de retención de van Genuchten y el exponente de la ecuación de Irmay para la permeabilidad relativa. La aplicación de esta metodología a la interpretación de ensayos de infiltración en columnas de laboratorio de bentonita compactada ha permitido comparar la idoneidad de las diferentes expresiones de la curva de permeabilidad relativa (la de Irmay y tres de las expresiones propuestas por van Genuchten). Los resultados de la interpretación numérica de los ensayos indican que la curva de Irmay es la más adecuada para bentonitas compactadas. No sólo conduce a los mejores ajustes del volumen infiltrado y de la humedad final, sino que además proporciona una curva de retención más coherente con los datos experimentales de succión-humedad. Se puede por tanto concluir que la función de permeabilidad relativa de Irmay, con un exponente que oscila en torno a 3, es más

apropiada que las funciones propuestas por van Genuchten.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido realizado en el marco de Proyectos financiados por ENRESA a través de un Convenio con la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia y la Universidad de La Coruña (Proyectos Interactivo, código: 703336, y FEBEX, código: 703231). Queremos agradecer al CIEMAT por las facilidades prestadas en la obtención de los datos de los ensayos realizados en sus instalaciones, especialmente a M. V. Villar. El Proyecto FEBEX ha sido financiado por la Comisión Europea a través del proyecto FI4W-CT95-0008 del Programa de Fisión Nuclear. Otras partes del trabajo han sido financiadas por la CICYT a través del Proyecto HID98-282 del Programa Nacional de Recursos Hídricos.

Referencias.

- Bear, J. 1972. *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, New York.
- Burdine, N.T. 1953. Relative permeability calculation from size distribution data. *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 198: 71-78.
- Carrera, J. y Neuman, S.P. 1986. Estimation of aquifer parameters under steady-state and transient condition: 1. Background and Statistical framework. *Water Resour. Res.*, 22: 199-210.
- Eching, S.O., Hopmans, J.W. y Wallender, W.W. 1994. Estimation of in situ unsaturated soil hydraulic functions from scaled cumulative drainage data. *Water Resour. Res.*, 30: 2387-2394.
- ENRESA. 1998. FEBEX, Full-scale engineered barriers experiment in crystalline host rock, Pre-operational Stage Summary Report, *Publicación Técnica 1/98*.
- Galarza, G.A. 1993. Calibración automática de parámetros en problemas no lineales de flujo y transporte, *Tesis Doctoral no publicada*, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona.
- Inoue, M., Simunek, J., Hopmans, J.W. y Clausnitzer, V. 1998. In situ estimation of soil hydraulic functions using a multistep soil-water extraction technique. *Water Resour. Res.*, 34: 1035-1055.
- Irmay, S. 1954. On the hydraulic conductivity of saturated soils. *Trans. Amer. Geophys. Union* 35: 463-468.
- Kabala, Z.J. y Milly, P.C.D. 1991. Sensitivity analysis of infiltration, exfiltration, and drainage in unsaturated Miller-Similar porous media. *Water Resour. Res.*, 27: 2655-2666.
- Kool, J. B., Parker, J. C. y van Genuchten, M. Th. 1985. Determining soil hydraulic properties from one-step outflow experiments by parameter estimation, 1. Theory and numerical studies. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 49: 1348-1354.
- Kool, J. B. y Parker, J. C. 1988. Analysis of inverse problem for transient unsaturated flow. *Water Resour. Res.*, 24: 817-830.
- Mishra, S. y Parker, S.C. 1989. Parameter estimation for coupled unsaturated flow and transport. *Water Resour. Res.*, 25: 385-396.
- Pan, L. y Wu, L. 1998. A hybrid global optimization method for inverse estimation of hydraulic parameters: Annealing-simplex method. *Water Resour. Res.*, 34: 2261-2269.
- Parker, J. C., Kool, J. B. y van Genuchten, M. Th. 1985. Determining soil hydraulic properties from one-step outflow experiments by parameter estimation, II. Experimental studies. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 49: 1354-1359.
- Russo, D. 1988. Determining soil hydraulic properties by parameter estimation: On the selection of a model for the hydraulic properties. *Water Resour. Res.*, 24: 453-459.
- Russo, D., Bresler, E., Shani, U. y Parker, J.C. 1991. Analysis of infiltration events in relation to determining soil hydraulic properties by inverse problem methodology. *Water Resour. Res.*, 27: 1361-1373.
- Samper, F.J., Juncosa, R., Delgado, J. y Montenegro, L. 1998. *CORE-LE-2D: Users Manual*, Universidad de La Coruña, 207 pp.
- Simunek, J. y van Genuchten, M.T. 1996. Estimating unsaturated soil hydraulic properties from tension disc infiltrometer data by numerical inversion. *Water Resour. Res.*, 32: 2683-2696.
- Sun, N-Z. y Yeh, W. W.-G. 1990a. Coupled Inverse Problems in Groundwater Modeling, 1 Sensitivity Analysis and Parameter Identification. *Water Resour. Res.*, 26: 2507-2525.
- Sun, N-Z. y Yeh, W. W.-G. 1990b. Coupled Inverse Problems in Groundwater Modeling, 2. Identifiability and Experimental Design.

- Water Resour. Res.*, 26: 2527-2540.
- Sun, N-Z. 1994. *Inverse Problems in Groundwater Modeling*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- van Genuchten, M. Th. 1980. A closed-form for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44: 892-898.
- Villar, M.V. 1999. Ensayos THM para el Proyecto FEBEX. Versión 0. Informe CIEMAT/DIAE/54111/9/99. Informe FEBEX 70-IMA-L-0-66. Madrid, 115 pp.
- Yeh, T.-C. J. y Harvey, D. J. 1990. Effective unsaturated hydraulic conductivity of layered sands. *Water Resour. Res.*, 26: 1271-1279.
- Zayani, K., Tarhouni, J., Vachaud, G. and Kutilek, M. 1991. An inverse method for estimating soil core water characteristics. *J. Hydrol.*, 122: 1-13.