

# Uma Formulação Alternativa do Método Iterativo de Gradiente Hidráulico no Procedimento de Calibração dos Parâmetros Hidrodinâmicos do Sistema Aqüífero

**Hans Dieter Max Schuster**

*Departamento de Mineração e Geologia - Universidade Federal de Campina Grande – Campina Grande – PB*

*Tel./Fax: (83) 310 1169 - didischuster@yahoo.de*

**Hélio Darlan Barros Araújo**

*Datamine Latin America – Belo Horizonte – MG*

*Tel/Fax (31) 3225 6855 - hda@datamine.com.br*

*Recebido: 12/05/03 - revisado: 28/01/04 - aceito: 28/05/04*

## **RESUMO**

O Método Iterativo de Gradiente Hidráulico (MIGH) é um método inverso indireto para a estimativa dos parâmetros hidrodinâmicos, principalmente para a transmissividade ou condutividade hidráulica, na modelagem das águas subterrâneas de um sistema aqüífero. Este método utiliza como função objetiva a diferença dos gradientes hidráulicos observados e calculados no domínio do modelo a ser minimizada. Este processo de otimização resulta também em uma minimização simultânea da diferença das cargas hidráulicas observadas e calculadas no sistema aqüífero, no qual se define a função objetiva convencional utilizada no método dos mínimos quadrados. As características principais do MIGH são o seu conceito hidrogeológico consentâneo com a lei de Darcy e sua independência espacial. Esta propriedade transforma o procedimento da otimização multidimensional em múltiplos procedimentos unidimensionais, ou seja, uma redução significante no tempo computacional, além de desviar os problemas de convergência e o mau posicionamento do sistema linear a ser resolvido. Neste trabalho é apresentada uma formulação alternativa do método iterativo de gradiente hidráulico (MIGHA). O resultado da performance numérica do MIGHA mostra no caso hipotético simulado que a minimização dos residuais dos gradientes hidráulicos no domínio total de aqüífero resulta também em uma minimização simultânea dos residuais das respectivas cargas hidráulicas e, demonstra assim, que o método iterativo de gradiente hidráulico alternativo é um método rápido, eficaz e prático que pode ser utilizado na estimativa dos parâmetros hidrodinâmicos em casos reais complexos no modelamento numérico.

**Palavras-chave:** condutividade hidráulica; sistema aqüífero.

## **INTRODUÇÃO**

A estimativa de parâmetros (*parameter estimation*), também conhecida como problema inverso, é uma etapa muito importante na modelagem de um sistema aqüífero e consome o maior tempo no procedimento na simulação numérica.

Numerosos estudos científicos foram publicados sobre o desenvolvimento e viabilidade prática da técnica do modelo inverso. Vários artigos resumem os diferentes métodos de estimativa de parâmetros hidrodinâmicos (Yeh (1986), Carrera & Neuman (1986), e McLaughlin & Townley (1996)).

A abordagem geral da estimativa dos parâmetros hidrodinâmicos é feita através da definição de uma função objetiva que minimiza a diferença entre as cargas hidráulicas observadas e calculadas ( $h_i^{\text{obs}}$  e  $h_i^{\text{calc}}$ ). O critério clássico da técnica inversa dos mínimos quadrados é a minimização da função objetiva da forma:

$$F_{\text{obj}} = \sum_{i=1}^N (h_i^{\text{obs}} - h_i^{\text{calc}})^2 \quad (1)$$

onde  $F_{\text{obj}}$  é a função objetiva,  $i$  o índice de observação e  $N$  o número total de cargas hidráulicas observadas. A equação 1 apresenta um problema típico de otimização multidimensional. Vários programas computacionais são atualmente disponíveis na modelagem matemática para a calibração do fluxo e do transporte, tais como o PEST (Doherty, 1994), o UCODE (Poeter & Hill, 1998), entre outros. Estes programas são baseados na minimização da equação 1 por meio da técnica dos mínimos quadrados (*least squares method*).

Uma outra abordagem menos utilizada é a análise da rede de fluxo (*flow net*) ou do tubo de corrente (*streamtube*), primeiramente apresentada por Stallman (1956) e posteriormente melhor desenvolvida por Nelson (1969, 1961, 1968) e Emsellem & Marsily (1971). Esta análise é baseada na construção de um mapa potenciométrico com as res-

pectivas linhas ortogonais de corrente. Este método não utiliza o princípio da minimização e, portanto, é chamado de método inverso direto (*direct inverse method*).

Recentemente, foi publicado um método de estimativa dos parâmetros hidrodinâmicos que é formulado como uma minimização de uma função objetiva das diferenças dos gradientes hidráulicos observados (interpolados) e calculados (simulados) ( $\nabla h^{\text{obs}}$  e  $\nabla h^{\text{calc}}$ ) através de um processo iterativo começando com um parâmetro inicial arbitrário que será ajustado a cada novo ciclo de iteração (Guo & Zhang, 1994, Guo & Zhang, 2000). Neste método o critério de otimização é a minimização de uma função objetiva do tipo:

$$F_{\text{obj}} = \int_R (\nabla h^{\text{calc}} - \nabla h^{\text{obs}})^2 \cdot dx dy \quad (2)$$

onde  $\nabla h$  é o gradiente hidráulico e  $R$  o domínio de fluxo. Este tipo de estimativa pertence à categoria dos métodos inversos indiretos de calibração (*indirect inverse method*) e é referido neste trabalho como Método Iterativo de Gradiente Hidráulico (MIGH) ou Calibração da Direção do Fluxo (*flow-direction calibration*). Para concedidas condições de contorno do respectivo modelo, a minimização das diferenças de gradientes hidráulicos é equivalente à minimização das diferenças das cargas hidráulicas. Antes do início do processo iterativo para a determinação da transmissividade (ou condutividade hidráulica), na etapa de calibração do modelamento com o MIGH, a taxa de recarga e evapotranspiração estimada deve ser atribuída à cada célula.

## FORMULAÇÃO TEÓRICA

A derivada da função objetiva no método tradicional de otimização das diferenças das cargas hidráulicas (Eq. 1) através da técnica dos mínimos quadrados é dada pela seguinte expressão (Kinzelbach, 1986):

$$\frac{\partial F_{\text{obj}}}{\partial T_j} = -2 \sum_{i=1}^M \left[ (h_i^{\text{obs}} - h_i^{\text{calc}}) \cdot \frac{\partial h_i^{\text{calc}}}{\partial T_j} \right] = 0 \quad (3)$$

onde  $j$  é o índice da zona com seu respectivo valor da transmissividade média  $T_j$ ,  $i$  o índice de observação e  $M$  o número total de cargas hidráulicas observadas.

No método do gradiente hidráulico, MIGH, a derivada parcial da função objetiva (Eq. 2) com respeito à transmissividade  $T$  é dada pela expressão:

$$\frac{\partial F_{\text{obj}}}{\partial T_j} = -\frac{2}{T_j} \int_r (\nabla h_j^{\text{calc}} - \nabla h_j^{\text{obs}}) \cdot \nabla h_j^{\text{calc}} dx dy = 0 \quad (4)$$

onde  $\nabla h_j$  é o gradiente hidráulico na célula  $j$  e,  $r$  é um pequeno sub-domínio do domínio  $R$  de modelo com a sua transmissividade média  $T_j$  (Guo & Zhang, 2000).

Guo e Zhang (2000) deduziram a equação (4) tanto através do método do estado adjunto (*adjoint state method*) como pelo método de cálculo variacional com restrições (*constrained calculus of variation*).

O método iterativo de gradiente hidráulico alternativo, MIGH, utiliza a equação 4, transformando a mesma numa equação equivalente, expressa em diferenças finitas do tamanho da cada célula  $j$ :

$$\frac{\partial F_{\text{obj}}}{\partial T_j} = -\frac{2}{T_j} \sum_j^N (\nabla h_j^{\text{calc}} - \nabla h_j^{\text{obs}}) \cdot \nabla h_j^{\text{calc}} \Delta x_j \Delta y_j = 0 \quad (5)$$

onde  $N$  é o número das células e das respectivas cargas hidráulicas interpoladas (observadas) e  $\Delta x, \Delta y$  são as dimensões da cada célula  $j$ . Nota-se que  $M \ll N$ .

Uma importante implicação da equação 4 e 5 em relação à equação 3 é a sua independência espacial. A derivada da equação 4 e 5 é somente uma função da transmissividade local (ou condutividade hidráulica local) e do gradiente hidráulico local. Por isso, o problema da otimização multidimensional pode ser resolvido através de múltiplos procedimentos simultâneos de otimização unidimensional. Como citado por Yeh (1986), o problema inverso é normalmente formulado como um problema de otimização multidimensional devido à dependência espacial inerente da carga hidráulica em relação ao parâmetro hidrodinâmico. O efeito desta dependência resulta no aumento exponencial do tempo de computação com o aumento dos parâmetros a serem ajustados. Portanto, o método de gradiente hidráulico é muito mais simples que os métodos inversos tradicionais e o número dos parâmetros a serem ajustados podem ser ilimitados.

Por esta razão, o MIGH pode ser aplicado em estudos muito complexos enquanto a técnica inversa tradicional enfrenta bastantes dificuldades devido ao problema de convergência e mau posicionamento do sistema linear (*ill posed problem*).

## PROCEDIMENTO NUMÉRICO

O procedimento numérico do MIGH (Goa & Zhang, 2000) é um processo iterativo que começa com uma estimativa inicial arbitrária do parâmetro hidrodinâmico, ou seja, um valor inicial da transmissividade (ou condutividade hidráulica). Após cada iteração na simulação o valor do parâmetro hidrodinâmico atribuído a cada célula da malha do domínio do modelo será ajustado pelo procedimento de método de descida profunda (*deepest descent method*):

$$T_j^{i+1} = T_j^i - \lambda \cdot \left( \frac{\partial F_{\text{obs}}}{\partial T_j} \right)^i \quad (6)$$

onde  $\lambda$  é o fator de comprimento de passo (*step length*),  $\partial F / \partial T_j$  é a derivada parcial da função objetiva com relação à transmissividade da célula  $j$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) e  $i$  o índice da iteração. Para assegurar que os valores hidrogeológicos sejam plausíveis durante o procedimento de otimização, são introduzidas as seguintes restrições:

$$T_j^{\min} < T_j < T_j^{\max} \quad (7)$$

definindo assim o limite mínimo e máximo do valor de transmissividade a ser ajustado em cada célula  $j$ .

## PROCEDIMENTO ALTERNATIVO

O método iterativo de gradiente hidráulico alternativo (MIGHA) foi desenvolvido para um projeto de consultoria (Schuster, 2002), sem ter tido conhecimento da publicação de Goa e Zhang (2000). O objetivo foi o abandono da calibração tradicional dos mínimos quadrados apresentada pela equação 1, que fornecia muitas vezes resultados insatisfatórios quando o zoneamento do campo de distribuição da condutividade hidráulica não era conhecido. O MIGHA se difere do MIGH apenas por substituição da equação 6 pela expressão da equação 8:

$$T_j^{i+1} = T_j^i \cdot \frac{|\nabla h_j^{i \text{ calc}}|}{|\nabla h_j^{i \text{ obs}}|} \quad (8)$$

onde  $|\nabla h_j^{i \text{ calc}}|$  é o módulo do gradiente hidráulico calculado e  $|\nabla h_j^{i \text{ obs}}|$  é o módulo do gradiente calculado da célula  $j$  no ciclo  $i$ . Em cada ciclo de iteração  $i$  será calculado o ângulo  $\varphi$  formado pelos vetores do gradiente hidráulico observado e calculado em cada célula  $j$  da forma que:

$$\cos \varphi_j = \frac{\nabla h_j^{\text{obs}} \cdot \nabla h_j^{\text{calc}}}{|\nabla h_j^{\text{obs}}| \cdot |\nabla h_j^{\text{calc}}|} \quad (9)$$

A estratégia de otimização é que os ângulos de  $\varphi_i > 60^\circ$  não são considerados no respectivo ciclo de iteração até que as transmissividades calculadas nas células vizinhas induzam a este ângulo (maior que  $60^\circ$ ) diminuir-se nos subsequentes ciclos de iteração.

O critério de convergência no procedimento de otimização é a minimização do somatório dos ângulos  $\varphi$  de modo que:

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j = \text{Mínimo} \quad (10)$$

O programa deste procedimento numérico segue o fluxograma (Fig. 1) e é escrito na linguagem MATLAB®, no qual são calculados no início da calibração o mapa do gradiente hidráulico interpolado (observado),  $\nabla h^{\text{obs}}$ , e o mapa do gradiente hidráulico calculado,  $\nabla h^{\text{calc}}$ , após cada iteração  $i$  do cálculo das cargas hidráulicas através do processador PMWIN (Chiang & Kinzelbach, 2000) baseado no programa MODFLOW (McDonald & Harbaugh, 1988).

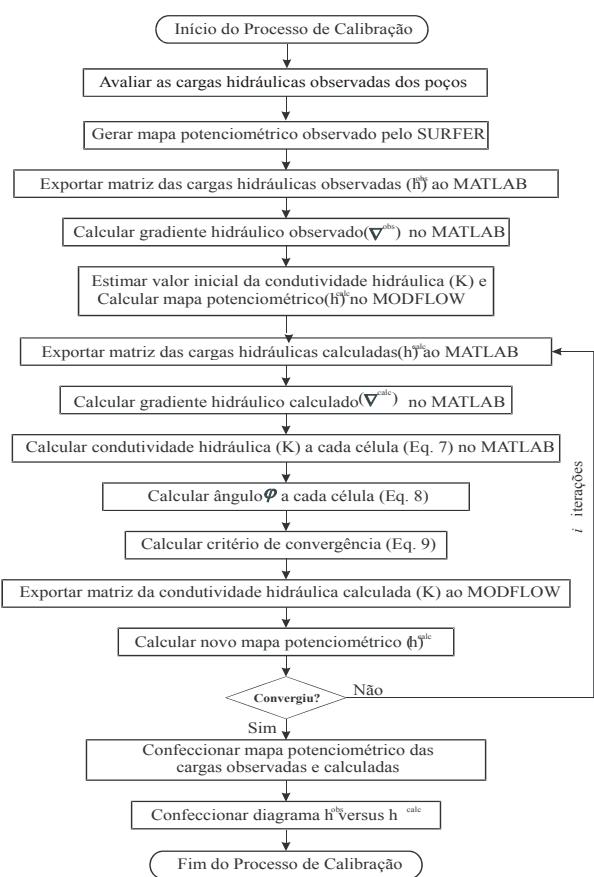


Figura 1 - Fluxograma do Procedimento Alternativo

O procedimento iterativo termina quando a raiz do erro quadrático médio (RMSEH - *root mean square error of heads* - Eq. 11) alcance um valor predefinido e/ou quando o valor de critério de convergência (Eq. 10) não diminui mais e atinge um valor estável. Isto, geralmente, ocorre após 10 a 15 ciclos de iteração. Sobretudo, é também implantada neste processo do MIGHA uma técnica de suavização (*smoothing technique*) do parâmetro ajustado, de modo que o valor do parâmetro ajustado na célula referencial não

seja significantemente maior ou menor que o respectivo valor médio das células vizinhas. Esta suavização garante uma certa homogeneidade da transmissividade em certas zonas e evita, assim, uma hiperparametrização do modelo aquífero.

## CASO DE ESTUDO HIPOTÉTICO

O modelamento estacionário de um caso de estudo hipotético (Fig. 2) demonstra a eficiência do MIGHA aplicada em um aquífero aluvial não-confinado, isotrópico e heterogêneo constituído por 04 zonas de condutividade hidráulica diferentes ( $K_1 = 1 \cdot 10^{-3}$  [m/s],  $K_2 = 5 \cdot 10^{-3}$  [m/s],  $K_3 = 5 \cdot 10^{-4}$  [m/s] e  $K_4 = 1 \cdot 10^{-4}$  [m/s]). A sua porosidade efetiva é de 0,1. O domínio é discretizado em 42 células na direção  $x$  e 27 células na direção  $y$  com respectivas dimensões constantes de  $\Delta x = \Delta y = 100$  [m]. O número total de células na malha discretizada é 1134, onde apenas  $N = 761$  células são ativas.

As condições de contorno do domínio do modelo são bem variáveis. Na parte Norte encontra-se um rio com uma condutividade hidráulica do leito de  $K_{\text{Rio}} = 1,3 \cdot 10^{-7}$  [m/s] que define uma condição de contorno do tipo fluxo dependendo da carga hidráulica; a fronteira montanhosa que se encontra na entrada Oeste é definida por uma condição de fluxo subterrâneo de  $Q = 0,012$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] distribuído sobre as 30 células do respectivo contorno, ou seja,  $Q = 4 \cdot 10^{-3}$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] por célula. O contorno na área Sul é uma fronteira impermeável, portanto, um contorno do tipo fluxo nulo, e o contorno na saída Leste é um contorno do tipo carga hidráulica especificada com  $h = 23$  [m]. A espessura do aquífero aluvial, constituída pelo material não-consolidado, varia entre 26 [m] no Sul e 23 [m] no Norte. Dois poços estão bombeando com as respectivas taxas de  $W_1 = 0,02$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] e  $W_2 = 0,015$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ]. Uma recarga média anual de  $R = 5 \cdot 10^9$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] é distribuída uniformemente no domínio do modelo. São instalados 22 poços de observação e, junto com os dois poços de bombeamento, o número de observações dos níveis d'água é  $M = 24$  (CHIANG et al, 1998). A partir destas medições foi possível confeccionar um mapa potenciométrico através da interpolação de krigagem (*kriging*) com o programa SURFER® (vide as isolinhas potenciométricas pretas na figura 4), que foi utilizado para gerar o mapa do gradiente hidráulico observado ( $\nabla h_{\text{obs}}$ ) com o programa MATLAB®.

## RESULTADO E DISCUSSÃO

O procedimento de calibração começou com uma distribuição uniforme de campo inicial da condutividade hidráulica com um valor arbitrário, mas racional ( $K_{\text{overall}} = 1 \cdot 10^{-3}$  [m/s]). Foram realizados 20 ciclos de iteração seguindo o fluxograma de calibração (Fig. 1), embora após poucos ciclos, a concordância entre o mapa potenciométrico

interpolado e calculado já fora alcançada sem dificuldade. O campo final de distribuição da condutividade hidráulica não-suavizada após a calibração completa é apresentado na figura 3. Como resultado, destacam-se claramente as 04 zonas das condutividades hidráulicas como são vistas na figura 2, mas com a diferença, que cada zona não é mais homogênea, mas reflete um certo intervalo no valor da condutividade hidráulica.

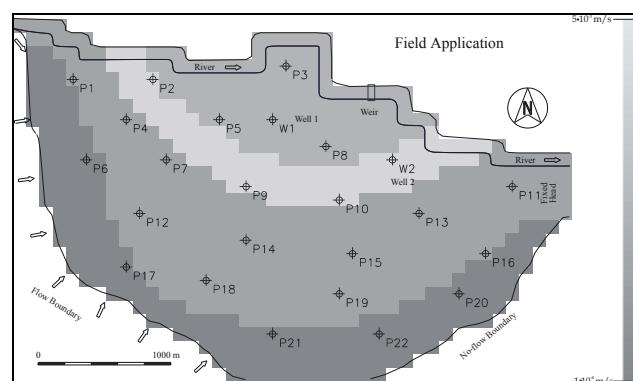


Figura 2 - Zoneamento do domínio de modelo hipotético (Chiang et al, 1998)

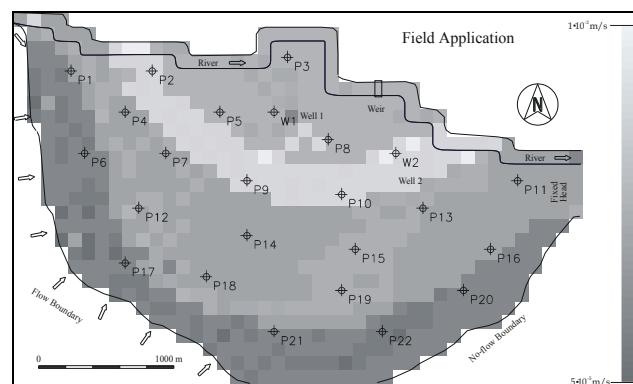


Figura 3 - Distribuição da condutividade hidráulica não-suavizada depois do processo de calibração.

O programa PMWIN® calculou um mapa potenciométrico final (vide as isolinhas potenciométricas cinzas na figura 4) com base na distribuição da condutividade hidráulica calibrada apresentada na figura 3. Os dois mapas potenciométricos interpolado (observado) e calibrado (calculado) são sobrepostos na figura 4 e mostram uma concordância muito boa.

O efeito colateral da calibração com MIGHA foi a minimização simultânea das diferenças das cargas hidráulicas observadas e calculadas nos 24 poços de observação pelo mesmo procedimento, como se pode confirmar na figura 5 (*scatter diagram*).

A raiz do erro quadrático médio (*root mean square error of head*) definido como:

$$\text{RMSEH} = \left[ \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (h_{\text{obs}} - h_{\text{calc}})_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

e tomado sobre os 24 poços de observação resultou em um valor de 0,321 [m] no início da calibração e terminou com um valor de 0,027 [m].

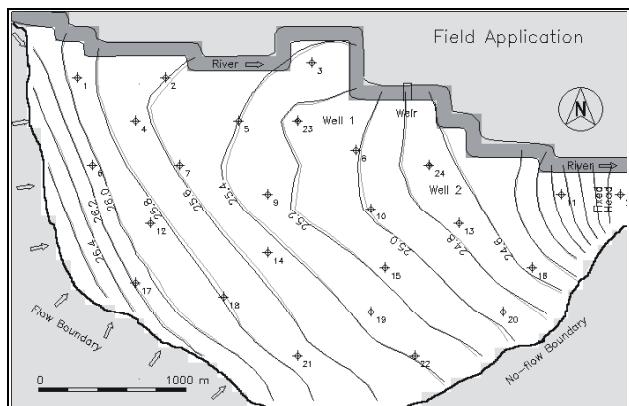


Figura 4 - Distribuição das cargas observadas (linhas pretas) e ajustadas (linhas cinzas).

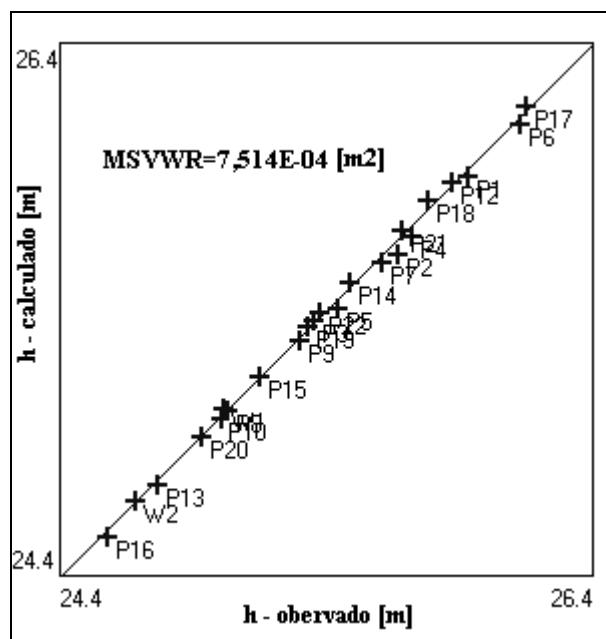


Figura 5 - Comparação das cargas hidráulicas em 24 poços de observação.

Para fins de comparação, foi realizada também a mesma calibração através do bem-conhecido programa de estimativa dos parâmetros PEST (Doherty, 1984), que se

baseia na minimização da função objetiva da equação 1 utilizando os 24 poços de observação. O procedimento de minimização com PEST terminou após 08 ciclos de otimização com o valor de RMSEH de 0,012 [m]. Este valor ótimo resultou apenas por causa do zoneamento predefinido do campo de condutividade hidráulica da respectiva área de modelamento (Fig. 2).

Outras tentativas de calibração realizadas pelo PEST na mesma área de modelamento baseando-se em um zoneamento diferente e não-definido, como é no caso de um aquífero aluvial, terminaram com valores de RMSEH menos favoráveis e os procedimentos de calibração, as vezes, não conseguiram convergir. O outro critério deste caso hipotético foi o cálculo do erro médio percentual relativo (*mean relative percent error of K*) entre a condutividade hidráulica observada e calibrada, a qual é definido pela seguinte expressão:

$$\text{MRPEK} = \left[ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \frac{K_{\text{calib}} - K_{\text{true}}}{K_{\text{true}}} \right) \times 100\% \right]_i^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

onde  $K_{\text{calib}}$  é a condutividade hidráulica calibrada,  $K_{\text{true}}$  é a condutividade hidráulica verdadeira (Fig. 2) e  $N = 761$  é tanto o número dos parâmetros na MIGHA quanto o número das células da área discretizada.

No início da calibração, o valor de MRPEK foi muito alto em torno de 2500%. Durante o processo de calibração o MRPEK reduziu-se sucessivamente até que alcançou um valor final de cerca de 15%.

## CONCLUSÃO

Em contraposição à técnica tradicional da calibração executada pelos programas de estimativa de parâmetros como PEST e UCODE, que se baseiam na minimização das cargas hidráulicas medidas nos diversos poços de observação, o método iterativo do gradiente hidráulico alternativo (MIGHA) utiliza a minimização de um campo de gradiente hidráulico interpolado na base dos respectivos poços de observação. Este campo do gradiente hidráulico ou campo de fluxo define um campo vetorial, que inclui informação tanto sobre a direção quanto sobre a magnitude do fluxo dada pela lei de Darcy.

Sabe-se que um campo vetorial, como é o campo de gradiente hidráulico com as respectivas direções e grandezas de fluxo, oferece mais informações hidrogeológicas do que um campo escalar como é o campo potencial hidráulico definido pelos níveis d'água medidos nos poços de observação (Ruskauff & Rumbaugh 1996).

Naturalmente, existe também a mesma incerteza na validade dos valores de condutividade hidráulica após uma calibração realizada pelo método iterativo do gradien-

te hidráulico alternativo (MIGHA), devido à incerteza na interpretação do mapa potenciométrico interpolado a partir do número limitado dos poços de observação, os quais são muitas vezes ainda mal distribuídos no domínio de estudo e são medidos com certa imprecisão de medição. Uma fórmula da sensibilidade é deduzida pelos autores Guo e Zhang (2000), que define a incerteza da transmissividade por causa da incerteza no campo potenciométrico interpolado de forma que:

$$\frac{\Delta T}{T} \cong \frac{\Delta(\nabla h)}{\nabla h} \quad (13)$$

onde  $\Delta$  é considerado o respectivo erro tanto no valor do gradiente hidráulico,  $\nabla h$ , como no valor da transmissividade,  $T$ .

Segundo os autores, a equação 13 indica que o erro percentual no valor estimado da transmissividade é aproximadamente igual ao erro percentual no valor estimado do gradiente hidráulico. Isto significa que, um erro no gradiente hidráulico de 20% a 50%, por exemplo, provoca um erro no parâmetro hidráulico estimado da mesma grandeza. Nota-se que erros que resultam dos testes de bombeamento ultrapassam às vezes a ordem de uma magnitude.

Concluindo, pode-se dizer que o método iterativo de gradiente hidráulico alternativo (MIGHA) oferece várias vantagens, se for comparado diretamente com o método inverso tradicional da otimização automática, tais como PEST entre outros. A otimização através do MIGHA minimiza a diferença dos gradientes hidráulicos observados (interpolados) e calculados (simulados), mas também, minimiza simultaneamente, as diferenças das cargas hidráulicas. Sobretudo, o MIGHA é independente no espaço e permite assim que o problema multidimensional possa ser resolvido por múltiplo processamento unidimensional. Isto reduz a complexidade matemática e aumenta a sua eficiência computacional.

Uma outra vantagem do MIGHA é o seu emprego sem a necessidade de se ter um conhecimento prévio do parâmetro hidrodinâmico a ser ajustado e da sua distribuição inicial em zonas, as quais são essenciais no método inverso tradicional. Esta vantagem evita um problema sério que é o mau posicionamento da solução do sistema linear e que cria, assim, dificuldade de alcançar a convergência no processo da otimização automática. Isto pode ocorrer freqüentemente nos métodos inversos tradicionais.

Como nos outros métodos de calibração, amplamente utilizados na prática (Yeh, 1986), existem as mesmas limitações também no MIGHA. A escolha dos poços de observação para o cálculo do campo do gradiente hidráulico e da direção de fluxo pode ser questionada, especialmente se observar uma flutuação rápida dos níveis d'água

nos poços, como em aquíferos cársticos, e se os mesmos forem, ainda, muito distanciados entre si. Além disso, sabe-se que o gradiente hidráulico pode ser correto, mas a anisotropia do meio fraturado e/ou cárstico pode provocar um desvio significativo na ortogonalidade entre o campo potenciométrico e as suas trajetórias de fluxo subterrâneo, a qual é pressuposta na teoria do MIGHA. Por isto, o MIGHA pode ser utilizado sem grandes restrições apenas nos aquíferos sedimentares, principalmente, nos aquíferos aluviais.

## REFERÊNCIAS

- CARRERA, J. & S. P. NEUMANN. 1986. *Estimation of aquifer parameter under transient and steady state conditions: 2. Uniqueness, stability, and solution algorithms*. Water Resources Research 22, no. 2: 211-227.
- CHIANG, W.-H., W. KINZELBACH & R. RAUSCH. 1998. *Aquifer Simulation Model for Window. Groundwater flow and transport modeling, an integrated program*. Gebrüder Borntraeger, Berlin – Stuttgart, 137 p.
- CHIANG, W.-H. & W. KINZELBACH, 2001. *3D-Groundwater Modeling with PMWIN. A simulation system for modeling groundwater flow and pollution*. Springer, Berlin – Heidelberg – New York, 346 p.
- DOHERTY, J. 1994. *PEST*. Corinda, Australia: Watermark Computing.
- EMSELLEM, Y. & G. de MARSILY. 1971. *An automatic solution for the inverse problem*. Water Resources Research 7, no. 5: 1264-1283.
- GUO, X. & C.-M. ZHANG, 1994. *Use of the physical feature of groundwater system to reduce the mathematic complexity in parameter identification – a practical and efficient automated procedure*. In: Proceedings of the 1994 Groundwater Modeling Conference , Fort Collins, Colorado, 111-118.
- GUO, X. & C.-M. ZHANG, 2000. *Hydraulic gradient comparison method to estimate aquifer hydraulic parameters under steady-state conditions*. Ground Water 38, no. 6: 815-826.
- KINZELBACH, W. 1986. *Groundwater modelling. An introduction with sample programs in BASIC*. Elsevier, Amsterdam – Oxford – New York – Tokyo, 333 p.
- MCDONALD, M. D. & A. W. HARBAUGH, 1988. *A modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model*. USGS Open-File Report 83-875.
- MC LAUGHLIN, D. & L. R. TOWNLEY. 1996. *A reassessment of the groundwater inverse problem*. Water Resources Research 32, no. 5: 1131-1161.
- NELSON, R. W. 1960. *In-place measurement of permeability in heterogeneous media. 1. Theory of a proposed method*. Journal of Geophysical Research 65, no. 6: 1753-1758.
- NELSON, R. W. 1961. *In-place measurement of permeability in heterogeneous media. 2. Experimental and computational considerations*. Journal of Geophysical Research 66, no. 8: 2467-2477.

- NELSON, R. W. 1968. *In-place determination of permeability distribution for heterogeneous porous media through analysis of energy dissipation*. Society of Petroleum Engineers Journal 8, no. 1: 33-42.
- POETER, E. P. & M. C. HILL. 1998. *Documentation of UCODE, a computer code for universal inverse modeling*. USGS WRI 98-4080.
- RUSKAUFF, G. J. & J. O. RUMBAUGH. 1996. *Incorporating groundwater flow direction and gradient into a flow model calibration*. In: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, Golden, Colorado, September, 1996. IAHS Publication 237.
- SCHUSTER, H. D. M. 2002. *Modelagem Matemática do Uso Conjunto das Águas Superficiais e Subterrâneas da Sub-Bacia do Rio das Fémeas-Bahia. - Projeto de Gerenciamento Integrado das Atividades na Bacia do São Francisco - ANA/GEF/PNUMA/OEA*, Salvador-BA, 59 p.
- STALLMAN, R. W. 1956. *Numerical analysis of regional water levels to define aquifer hydrology*. Transactions of the American Geophysical Union 37, no. 4: 451-460.
- YEH, W. W.-G. 1986. *Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: Inverse problem*. Water Resources Research 22, no. 2: 95-108.
- be used for estimation of hydraulic parameters in complex real-world modeling projects.
- Key-words:* hydraulic conductivity; aquifer system.

### ***An Alternative Formulation of the Iterative Hydraulic Gradient Method in the Calibration Procedure of the Hydraulic Parameters of an Aquifer System.***

#### ***ABSTRACT***

The iterative hydraulic gradient method is an indirect inverse method for estimation of hydraulic parameters as aquifer transmissivity or hydraulic conductivity for groundwater flow model. In this method, the inverse problem is defined as an optimization problem with the objective function to minimize differences between interpolated (observed) and simulated (calculated) hydraulic gradients, which results in a simultaneous minimization of differences between observed and simulated hydraulic heads. The key feature of this method is its clear hydrology concept that is consistent with Darcy's law and its spatially independence of optimality conditions. Because of the spatial independence, a multidimensional optimization problem can be solved by many one-dimensional optimizations procedures simultaneously, which reduces substantially the computation time and allow an unlimited number of the estimated parameters while traditional inverse technique encounters difficulty in bypassing the convergence problem in the often ill-posed linear system. In this study an alternative approach of the hydraulic gradient procedure is presented and tested successfully on a heterogeneous hypothetical aquifer system confirming that minimizing gradient residuals in the entire model domain leads to minimizing head residuals too. The simulated example demonstrates that the iterative method of hydraulic gradient is efficient and practical to