OPTIMIZACIÓN AVANZADA DE LA MODELACIÓN DE TRANSPORTE DE SOLUTOS EN REDES DE ALTA COMPLEJIDAD

LUIS FERNANDO SILVA VARGAS

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería, Área Curricular de Ingeniería Civil y Agrícola

Maestría en Ingeniería – Recursos Hidráulicos

Bogotá, Colombia

2016

Optimización avanzada de la modelación de transporte de solutos en redes de alta complejidad

LUIS FERNANDO SILVA VARGAS

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:

Magister en Ingeniería – Recursos Hidráulicos

Director:

Leonardo David Donado Garzón, Ph.D.

Profesor Asociado

Línea de Investigación:

Modelación de fenómenos y amenazas naturales

Grupo de Investigación:

Grupo de Investigación en Ingeniería de los Recursos Hídricos - GIREH

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería, Área Curricular de Ingeniería Civil y Agrícola

Maestría en Ingeniería – Recursos Hidráulicos

Bogotá, Colombia

2016

Para tí y Benja

"Aquella noche me di cuenta de que yo era un cazador de palabras. Para eso había nacido. Esa iba a ser mi manera de estar con los demás después de muerto y así no se iban a morir del todo las personas y las cosas que yo había querido."

Eduardo Galeano

Agradecimientos

En estas palabras manifiesto mi gratitud a todas las personas e instituciones que hicieron posible este trabajo.

En primer lugar a Chatica, por su omnipresencia. A mi Padre, por enseñarme a amar esta profesión. A mi Madre por ser mi primera lectora y editora. A mis hermanos, Álvaro y Catica. A mi Monita y Benja, por ser los motivos de mi vida.

En segundo lugar agradecer al profe Leonardo, por aguantar más de la cuenta siendo el faro y la guía de este trabajo. A todos los Soterrados, en especial a Luis camilo por su programación, a Eduardo por sus consejos en los momentos de penumbras, a los procástinos Antonio, Boris José, Sofi, Alvaro BK, Abvarito y Raulito.

También a mis amigos de siempre: Alejo, por su literatura y sus quejas. Santi, por apoyo incondicional. Al Gordito, que nunca dejar de enseñarme. Andrecito, por su lucidez.

Finalmente, a la Universidad Nacional de Colombia, por otorgarme la beca de asistente docente para financiar mis estudios y al Grupo de Investigación en Recursos Hidráulicos.

Resumen

En esta investigación se solucionó el problema inverso de flujo y transporte en un medio geológico de baja permeabilidad, usando como modelo conceptual las redes de fracturas discretas (DFN por sus siglas en inglés). Se realizó en un macizo fracturado real ubicado en el centro de España, donde se contaba con una adecuada caracterización geológica, datos de pruebas hidráulicas (de bombeo y de recuperación) y ensayos de trazadores conservativos (Deuterio y Uranina).

Se utilizaron 77 redes de fracturas discretas percoladas. Se definió una metodología de calibración con el acople del modelo numérico TRANSIN IV y tres algoritmos de calibración automática: i) Algoritmo de máxima verosimilitud (Método de Levenberg Marquardt [*Alcolea et al.*, 2000; *Medina et al.*, 2004], ii) *Shuffled complex evolution – University of Arizona* (SEC-UA) [*Duan et al.*, 1993], y. iii) Estimación generalizada de incertidumbre por verosimilitud GLUE (por sus siglas en inglés) [*Beven y Binley*, 1992].

En la solución del problema inverso para flujo, el 40% de las DFNs percoladas obtuvieron resultados satisfactorios y se realizó un análisis estadístico y de sensibilidad a los parámetros estimados, encontrando una enorme variabilidad de los parámetros en toda la red fracturas.

En la solución del problema inverso para transporte, ninguna red percolada obtuvo resultados aceptables en el ajuste de las curvas de llegada para los dos trazadores, esto puede ser debido a que no se cumple el criterio de Péclét o la falta de conectividad de fracturas en la red. Entonces se utilizaron las redes sin percolar utilizadas por *Donado* [2009], en donde solo 5 redes obtuvieron resultados satisfactorios, mejorando el ajuste de las curvas sobre todo en las colas.

Palabras Clave: Redes de Fracturas Discretas, Transporte de soluto, Algoritmos de Optimización

Abstract

In this research, the inverse problem for flow and transport was solved in low permeable highly fractured massifs. These are studied using the Discrete Fracture Network (DFN) approach, this methodology can be used to analyze hydraulic (pumping and recovery) and tracer tests (Deuterium and Uranine) in a real fractured massif located in Central Spain.

77 different realizations of a percolated DFN were used in the calibration process. Calibration methodology is defined with the coupling numerical model TRANSIN IV and three automatic calibration algorithms: i) The Maximum Likelihood Method (The Levenberg-Marquat's Method) [*Alcolea et al.*, 2000; *Medina et al.*, 2004], ii) Shuffled complex evolution – University of Arizona (SEC-UA) [*Duan et al.*, 1993], y. iii) Generalized Likelihood Uncertainty Estimation GLUE [*Beven y Binley*, 1992].

In the inverse problem of flow, around 40% of the networks provide an excellent fitting in terms of heads. A statistical and sensitivity analysis was also done to the fitted parameters (Hydraulic conductivity and Storativity), finding a great variability of flow parameters across the fracture network.

In the inverse problem for transport, no percolated network obtained acceptable results in the breakthrough curve for the two conservative tracers. this may be because the Péclét number is not satisfied in most of the calibrated meshes. Then the networks used without percolating used by *Donado* [2009], where only 5 networks provide an excellent fitting in terms of concentration in breakthrough curve, especially in the tails.

Keywords: Discrete Network Fracture, Solute transport, Optimization Algorithm.

Contenido

Pág.

Resumen ..... **IX**

Abstract ..... **X**

Lista de figuras ..... **XIII**

Lista de tablas ..... **XV**

Introducción **1**

1. Conceptos Básicos **11**
1.1 TRANSIN IV 11
1.1.1 Flujo en medios fracturados 12
1.1.2 Transporte de Solutos 14
1.2 Problema Inverso 16
1.3 Algoritmos de optimización 17
1.3.1 Función objetivo 18
1.3.2 Algoritmo de Marquardt 19
1.3.3 Generalizated Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE) 19
1.3.4 Shuffled Complex Evolution Method (SCE-UA) 20

2. Dominio de Modelación **23**
2.1 Zona de estudio 23
2.2 Generación de las DFNs 24
2.2.1 De la DFN a la malla numérica 26
2.3 Teoría de la Percolación 29
2.4 Ensayos de Campo 30
2.4.1 Ensayo de bombeo 30
2.4.2 Ensayo de trazadores 32

3. Optimización – Problema inverso **35**
3.1 Parametrización 35
3.2 Simulación de flujo 37
3.2.1 Resultados 38
3.3 Simulación de transporte 46
3.3.1 Resultados 48

4. Conclusiones 58

A. ANEXO I 61

Bibliografía 63

Lista de figuras

Pág.

Figura 1-1. Modelos hidrogeológicos conceptuales en medios fracturados [*Selroos et al.*, 2002] 3
Figura 2-1. Ubicación y perfil de la zona de estudio El Berrocal. Adaptado de *D'Alessandro et al.* [1997] 23
Figura 2-2. Metodología de generación de la red de fracturas discretas, adaptado de *Pardo* [2012] 25
Figura 2-3 Realización individual de una red de fracturas, con la sección geológica. tomado de *Donado* [2009] 26
Figura 2-4. Procedimiento de ir de un DFN 3D a una malla de elementos 1D incrustado en un volumen 3D. Adaptado de *Donado* [2009] 27
Figura 2-5. Construcción de una red de canal conductivo [*Donado*, 2009] 28
Figura 2-6. Generación de nodos y elementos en los pozos y puntos de observación, adaptado de *Ruiz* [2002] 28
Figura 2-7. Aplicación de la teoría de la percolación a una de las redes de fracturas discretas 29
Figura 2-8. Ubicación de los obturadores de los pozos involucrados en la prueba de bombeo, adaptado de *Donado* [2009] 31
Figura 2-9. Ubicación de los pozos de bombeo y observación. Gráficas de abatimiento observado para cada pozo. 31
Figura 2-10. Curva de llegada de la Uranina en el pozo S2 33
Figura 2-11. Curva de llegada del deuterio en el pozo S2 33
Figura 3-1. Condiciones de contorno empleadas para la interpretación numérica del ensayo de bombeo entre los tramos de sondeo S2 (de extracción) y S13 (de inyección) [*Ruiz*, 2002] 38
Figura 3-2. Ajuste de la red 10 – Gráfica de abatimiento en el pozo de bombeo y los pozos de observación 39
Figura 3-3. Diagrama de dispersión para los parámetros de flujo de la red 10 utilizando la metodología GLUE 40
Figura 3-4. *a)* Gráfico de distribución de probabilidad acumulada para los parámetros de flujo en la red 10. *b)* Análisis de sensibilidad regional para los parámetros de flujo en la red 10 41

Figura 3-5. Ajuste de la red 17 – Gráfica de abatimiento en el pozo de bombeo y los pozos de observación 42
Figura 3-6. Diagrama de dispersión para los parámetros de flujo de la red 17 utilizando la metodología GLUE 42
Figura 3-7. Histograma de Conductividad hidráulica estimada para todas las familias de fracturas 43
Figura 3-8. Diagrama de cajas de la Conductividad hidráulica estimada para todas las familias de fracturas 44
Figura 3-9. Histograma del coeficiente de almacenamiento estimado para todas las familias de fracturas 45
Figura 3-10. Diagrama de cajas del coeficiente de almacenamiento estimado para todas las familias de fracturas 45
Figura 3-11. Diferentes ajustes de trabajos anteriores para la prueba de bombeo en la red 10 46
Figura 3-12. Condiciones de contorno empleadas para la interpretación numérica del ensayo de trazadores entre los tramos de sondeo S2.1 (de extracción) y S13.4 (de inyección) [*Ruiz*, 2002] 47
Figura 3-13. Ajuste de la curva de llegada de Uranina en la red 10, valores extremos I 49
Figura 3-14. Ajuste de la curva de llegada de Uranina en la red 10, valores extremos II 49
Figura 3-15. Ajuste de la curva de llegada del Deuterio en la red 10 50
Figura 3-16. Diagrama de dispersión para los parámetros de transporte de la red 10 utilizando la metodología GLUE - Deuterio 51
Figura 3-17. *a)* Gráfico de distribución de probabilidad acumulada para los parámetros de transporte en la red 10. *b)* Análisis de sensibilidad regional para los parámetros de transporte en la red 10 - Deuterio 52
Figura 3-18. Diferentes ajustes de trabajos anteriores para la curva de llegada del Deuterio en la red 10 y la red 02. 53
Figura 3-19. Ajuste de la curva de llegada de la Uranina en la red 10 54
Figura 3-20. Diagrama de dispersión para los parámetros de transporte de la red 10 utilizando la metodología GLUE - Uranina 55
Figura 3-21. *a)* Gráfico de distribución de probabilidad acumulada para los parámetros de transporte en la red 10. *b)* Análisis de sensibilidad regional para los parámetros de transporte en la red 10 - Uranina 56
Figura 3-22. Diferentes ajustes de trabajos anteriores para la curva de llegada de la Uranina en la red 10 y la red 02. 57

Lista de tablas

Pág.

Tabla 2-1. Características físicas de los pozos involucrados en los ensayos hidráulicos 30
Tabla 2-2. Datos del ensayo de trazadores [*ENRESA*, 1996] 32
Tabla 3-1. Parámetros de flujo óptimos para la red 10, para cada algoritmo de optimización implementado 39
Tabla 3-2. Valor de función objetivo para la red 10, para cada algoritmo de optimización implementado 40
Tabla 3-3. Estadísticos de la conductividad hidráulica estimada para cada familia de fracturas 43
Tabla 3-4. Estadísticos del coeficiente de almacenamiento estimado para cada familia de fracturas 44
Tabla 3-5. Parámetros de transporte óptimos para cada red - Deuterio 50
Tabla 3-6. Parámetros de transporte óptimos para cada red - Uranina 54

Introducción

Entre los problemas a los que se enfrenta la hidrogeología actualmente, quizás no hay uno tan desafiante como la caracterización de los medios fracturados [*Faybishenko y Benson*, 2013; *Neuman*, 2005], siendo el transporte de solutos uno de los problemas más investigados en las últimas décadas [*Berkowitz*, 2002; *Bodin et al.*, 2003a]. El conocimiento de la dinámica de los fluidos al interior de los macizos rocosos fracturados de baja permeabilidad es de mucha importancia, gracias a que estos medios son reservorios naturales de sustancias como petróleo, gas, agua, aceites y de reservas geotérmicas. También de interés como posibles obstáculos a la pérdida de líquido (o canales de fuga) de embalses naturales y artificiales de almacenamiento y en el subsuelo con la migración de contaminantes o desechos radioactivos [*Neuman*, 2005].

Además, el estudio de estos medios es una etapa fundamental al realizar prospecciones geológicas en proyectos de excavaciones subterráneas de gran longitud [*Donado*, 2009]; pues el desarrollo de presiones de fluido elevadas en las fracturas permeables generan una baja resistencia al corte, lo que trae un riesgo potencial de deformación de las rocas o problemas en obras subterráneas (galerías de minas o túneles) [*Berkowitz*, 2002; *Neuman*, 2005]. También la construcción de estas obras subterráneas en medios fracturados de baja permeabilidad, puede generar despresurización del hidrosistema y ocasionar pérdida de fuentes de agua superficial en la zona de influencia, además de la infiltración excesiva de agua, que puede generar problemas en la construcción y operación de estas obras. [*GIREH*, 2009].

También, a la hora del establecimiento de un almacenamiento subterráneo de residuos radioactivos, las rocas duras presentan, en general, un buen comportamiento mecánico, térmico y geoquímico. Sin embargo, existe un riesgo con la presencia de discontinuidades estructurales/fracturas (fallas, diaclasas y juntas), que interconectadas pueden crear caminos preferenciales para el flujo del agua y transporte de radionucleidos desde el repositorio hacia la biosfera [*Vives et al.*, 2004].

A pesar de su importancia, los macizos rocosos fracturados de baja permeabilidad son muy difíciles de estudiar, pues la estructura natural de una red de fracturas es el resultado de una interacción de diferentes procesos: campo de esfuerzos y su anisotropía, propiedades mecánicas de la roca e interacción mecánica de las fracturas [*Reeves et al.*, 2012]. Así que la modelación de diferentes procesos hidrogeológicos en estos medios es un reto, pues es evidente una complejidad geométrica que se deriva de la existente heterogeneidad altamente errática a todas las escalas [*Martinez*, 2004], dependencia direccional, naturaleza doble o multicomponente y multiescalar de las rocas fracturadas [*Neuman*, 2005]. Por otra parte, el flujo es controlado por una pequeña serie de conductos que transportan la mayor proporción del flujo total; la localización de estos conductos depende de los gradientes regionales y de la anisotropía vinculada a la tectónica [*Donado*, 2009].

Para desarrollar el modelo hidrogeológico conceptual de un macizo rocoso fracturado, la principal tarea y dificultad radica en identificar y representar las propiedades heterogéneas de la red de fracturas interconectadas a diferentes escalas [*Ruiz*, 2002]. Es decir, que se debe generar la geometría de las redes de fracturas, pues a partir de experimentos en campo y laboratorio en fracturas naturales se ha demostrado que los caminos preferenciales de flujo son las fracturas simples y las redes de fracturas [*Neretnieks*, 1993; *Neretnieks et al.*, 1982]. Además, la cuantificación directa del flujo y transporte en tales rocas se hace comúnmente en base a datos geométricos de fracturas acopladas con pruebas de bombeo o presión (flujo) y trazadores [*Neuman*, 2005].

A partir de la segunda mitad del siglo XX el estudio de estos medios fue presentando diferentes enfoques de modelación, en la década del 60, hidrogeólogos e ingenieros de petróleos realizaron enormes esfuerzos para investigar los procesos de flujo y transporte en medios fracturados. Se formularon modelos de doble porosidad *i.e. Warren y Root* [1963], en los cuales la matriz rocosa actúa como un lugar de almacenamiento y las fracturas como conductos donde fluye el líquido, todos enfocados en resolver problemas relativos a la industria petrolera con aguas de formación [*Kurtzman et al.*, 2007].

Desde los 80s el lugar de disposición final de residuos radioactivos fueron medios de baja permeabilidad, que inevitablemente contienen fracturas, volviéndose el estudio de los procesos de flujo y transporte en estos medios indispensable para evitar la migración de residuos. Para dar respuesta a esto se desarrollaron modelos de fracturas discretas, pues se requería una descripción más realista de la geometría de las redes de fracturas. Sin embargo, como el conocimiento de la red

de fracturas en un sistema tridimensional es limitado, se desarrollaron métodos estocásticos [*Kurtzman et al.*, 2007].

Como consecuencia de estos estudios, actualmente para resolver los problemas de flujo y transporte en medios fracturados, se encuentran en la literatura varios enfoques de modelación. Estos modelos hidrogeológicos conceptuales tienen la dificultad de representar las características heterogéneas de una red de fracturas interconectadas en un medio geológico muy complejo [*Pardo*, 2012]. Todos estos modelos se diferencian en la representación que hacen de la heterogeneidad en el medio fracturado y su proximidad con la realidad [*Committee on Fracture Characterization and Fluid Flow*, 1996; *Molinero*, 2001; *Wang y Kulatilake*, 2008].

Los modelos hidrogeológicos en medios fracturados se clasifican en tres grupos (Figura 1-1): Modelos continuos equivalentes (EPM, *Equivalent Porous Media*), Modelos de redes de fracturas discretas (DFN, *Discrete Fracture Network*) y Modelos híbridos o mixtos.

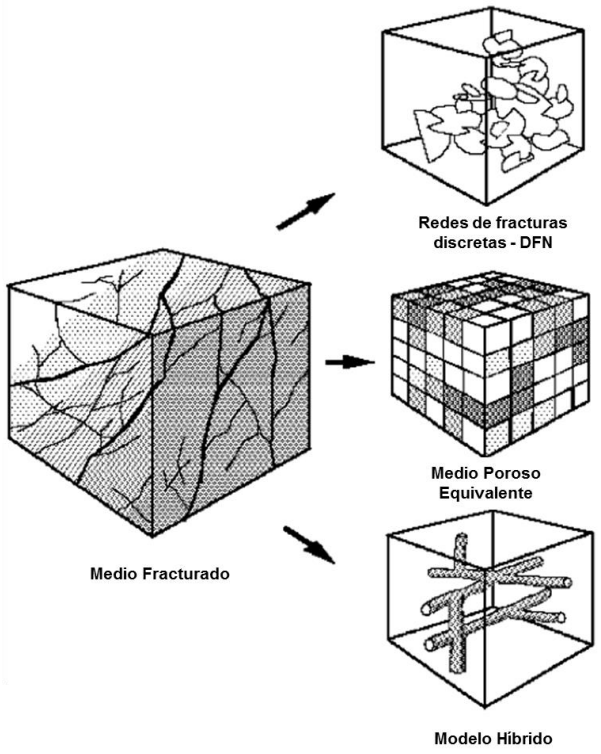

Figura 1-1. **Modelos hidrogeológicos conceptuales en medios fracturados [*Selroos et al.*, 2002]**

Los modelos continuos consideran la roca como una unidad continua no uniforme, que puede ser único, doble o múltiple [*Neuman*, 2005]. Es decir que se puede aproximar como un medio poroso equivalente y por lo tanto en igualdad de

condiciones físicas a ellos. En esta aproximación se simula la heterogeneidad del medio usando solo ciertas regiones, pues las fracturas no son explícitamente tratadas de manera individual [*Berkowitz et al.*, 1988]. Las propiedades hidráulicas del macizo rocoso se representan generalmente mediante propiedades continuas espacialmente (vistas como coeficientes), como la porosidad o la conductividad hidráulica efectiva, que expresan el comportamiento medio de muchas fracturas [*Ruiz*, 2002].

La ventaja de los modelos continuos es que simplifican matemáticamente la complejidad geométrica de los aspectos relacionados con el flujo, de tal forma que son más sencillos de implementar algorítmicamente y, sobre todo, de utilizar por el usuario. Sin embargo, el medio poroso equivalente es aplicable en una red de fracturas densa y con una conectividad muy alta entre ellas o cuando exista una interacción entre la red de fracturas y la matriz rocosa (permeable) en donde se logre establecer un equilibrio local [*Berkowitz*, 2002]. Este modelo se considera poco realista, pero ha sido aplicado a los medios fracturados con éxito por diferentes autores como *Berkowitz et al.* [1988], *Neuman y Depner* [1988], *Durlofsky* [1991] y *Bear et al.* [1993]

Los modelos mixtos o híbridos consisten en un medio continuo no uniforme, conteniendo un número relativamente pequeño de fracturas principalmente discretas [*Neuman*, 2005]. Tratan explícitamente las fracturas dominantes como elementos discretos embebidos en el medio, mientras que las fracturas menos dominantes se simulan junto con la matriz rocosa como medio poroso equivalente [*Ruiz*, 2002].

Este concepto tiene la doble ventaja de la simplicidad de los modelos continuos y de la precisión de contar con fracturas dominantes. Sin embargo, presenta problema en la asignación de valores a los parámetros del medio poroso, pues estos serían parámetros efectivos (no físicos y poco realistas). Diferentes autores han utilizado este enfoque de modelación con éxito en sus investigaciones, *Hudson y Lapointe* [1980], *Bourke* [1987], [*Tsang y Neretnieks*, 1998] y *Carrera* [2006].

Por último en los modelos de redes de fracturas discretas se considera que el flujo en la matriz rocosa es despreciable comparado con el flujo que se da en la red de fracturas interconectadas [*Andersson et al.*, 1984; *Long y Billaux*, 1987; *Long et al.*, 1982]. Por lo tanto, se considera que la roca contiene una red de fracturas discretas inmersas en bloques de matriz rocosa [*Neuman*, 2005]. Los medios fracturados están compuestos por bloques de roca separados por discontinuidades, de tal

forma que los modelos discontinuos son una aproximación muy atractiva para representar estos sistemas [*Ruiz*, 2002]. La mayor motivación para la construcción de modelos hidrogeológicos con redes de fracturas discretas (con cientos o miles de fracturas), es que la descripción detallada en campo de los elementos estructurales de macizo (fracturas individuales, fracturas o canales) resulta confiable para simular el comportamiento hidráulico del macizo a gran escala [*Neuman*, 2005].

Estos modelos han de tener en cuenta que las discontinuidades tienen lugar en una gran variedad de escalas y que sus geometrías y propiedades hidráulicas pueden variar con su posición y con la orientación. Sin embargo, el conocimiento adquirido a partir de observaciones en campo y de sondeos, brindan información muy limitada. Por esta razón, este enfoque de modelación solo puede abordarse mediante el uso de modelos estocásticos basados en aproximaciones probabilísticas [*Alder y Thover*, 1999].

La principal dificultad de este tipo de modelo es definir adecuadamente la geometría de la red de fracturas. Para ello se asume un enfoque estocástico, en donde las redes de fracturas discretas pueden ser caracterizadas geométricamente por distribuciones de probabilidad de sus propiedades (longitud, orientación, localización, densidad y apertura) y su conectividad. Las herramientas para cuantificar estas propiedades incluyen diferentes conceptos como: fractales, leyes de potencia, escalado y resolución, y la teoría de la percolación [*Berkowitz*, 2002].

A partir de este modelo estadístico, se generan múltiples realizaciones de la red de fracturación y es posible resolver los problemas de flujo y transporte a través de cada una de ellas. Cada realización es una de las muchas posibles representaciones que se pueden hacer de la red de fracturas [*Ruiz*, 2002].

El enfoque de considerar los macizos fracturados como bloques de rocas separados por discontinuidades, conducen a la idea que los modelos de las fracturas discretas son una aproximación muy atractiva para representarlos. Estos modelos permiten tener en consideración que las discontinuidades tienen lugar en una gran variedad de escalas y que sus geometrías y propiedades hidráulicas pueden variar con su localización y con su dirección [*Vives et al.*, 2004]. Enfoques teóricos y computacionales para el flujo y el transporte en DFNs se describen en los libros de *Sahimi* [2011], y *Zang y Sanderson* [2002].

Sin embargo, a pesar de los diferentes enfoques de modelación y los esfuerzos de caracterización del medio, en la modelación hidrogeológica las predicciones tienen una incertidumbre muy alta, pues los parámetros a estimar no se pueden definir tan claramente como en otros campos [*Carrera et al.*, 2005b; *Selroos et al.*, 2002] y según *Zhou et al.* [2014] los parámetros del modelo son una de las fuentes principales de incertidumbre debido a la inherente heterogeneidad de las propiedades del acuífero.

En el caso del flujo, la conductividad hidráulica puede variar en diferentes órdenes de magnitud en cortas distancias [*Martinez*, 2004]. Además, si se quiere modelar transporte de contaminantes, el campo de velocidades del macizo debe estar correctamente definido, pues algún error o un conocimiento incompleto es fuente de incertidumbre en la predicción del transporte de solutos a través de las fracturas [*Bodin et al.*, 2003b].

También en los procesos de transporte, las propiedades difusivas pueden variar en un orden de magnitud en pequeñas distancias, inclusive en centímetros [*Bodin et al., 2003b; Neretnieks, 2002*]. A pesar de que conceptualmente se habla de medios fracturados de baja permeabilidad, los poros de la matriz rocosa actúan como una zona de almacenamiento para el fluido y también como almacenamiento/fuente de solutos. En modelos de doble permeabilidad, la matriz rocosa forma parte activa del sistema de flujo y transporte, a través de la cual el fluido y los solutos se mueven, como consecuencia la interacción entre las fracturas y la roca controla los procesos de flujo y transporte en todo el sistema [*Berkowitz*, 2002].

Muchos factores relacionados a la porosidad de la matriz rocosa tienen influencia en el proceso de difusión: conectividad de los poros, tortuosidad y compresibilidad. Además, las propiedades de la roca dependen de la estructura petrográfica y del grado de alteración de los minerales [*Bodin et al.*, 2003a], a este proceso de difusión se le llama difusión en la matriz.

La difusión en la matriz es el mecanismo de transporte por el cual el soluto se mueve de una zona permeable con flujo (Móvil) a una zona sin flujo como la matriz rocosa (inmóvil) o viceversa, debido a la difusión molecular [Carrera et al., 1998]. Cuando la porosidad de la matriz rocosa es relativamente alta, la difusión en la matriz puede controlar el transporte de solutos en medios fracturados [*Bodin et al*., 2003a], en este caso la geometría de la red de fracturas y la dispersión hidrodinámica tendrían un papel secundario. Según *Bodin* et al. [2003a], a partir de datos de estudios y de la literatura la difusión en rocas ígneas y metamórficas, se

presenta una profundidad relativamente pequeña (3-10 cm) en la matriz rocosa en donde está presente la difusión.

Los efectos de la difusión en la matriz son diversos. Debido al gran volumen de vacíos en la matriz rocosa que puede ocupar el soluto por difusión, ocasiona un retardo aparente, respecto a los solutos que no ingresan a la matriz. Otro efecto son las colas que se observan en las curvas de llegada, pues los solutos pueden gastar bastante tiempo en salir de la matriz rocosa, debido a que los gradientes son muy pequeños [*Carrera et al*., 1998].

En ausencia de difusión en la matriz, las curvas de llegada típicas en fracturas presentan un comportamiento clásico de la solución de la ecuación de advección-dispersión de solutos en fracturas, se caracterizan por tener un tiempo al pico muy corto (llegada rápida de la mayoría del soluto) y con relativa frecuencia la llegada de otros picos menores de concentración o largas colas [*Berkowitz*, 2002]. Sin embargo, ensayos de trazadores realizados en las últimas dos décadas, han demostrado que a pesar de tener una geología detallada y una buena caracterización hidráulica del medio, en la mayoría de los casos es insuficiente para lograr una modelación robusta de la migración de solutos en estos medios [*Berkowitz*, 2002].

Como consecuencia, la estimación de los parámetros de flujo y transporte que describen estos procesos, es muy complejo y se conoce como problema inverso, en donde la calibración es vista como un paso necesario en la modelación [*Carrera et al.*, 2005b]. El problema inverso consiste en obtener un estimador de los parámetros de la ecuación que representan el problema físico a modelar, utilizando información previa sobre los mismos. Obtenida, por ejemplo, mediante ensayos de campo o de laboratorio, su estructura de correlación, así como información acerca de la variable de estado [*Carrera et al.*, 2005a]. En el contexto de la hidrogeología se basa en la estimación de los parámetros de un acuífero (transmisividad, almacenamiento, etc), a partir de medidas directas de los mismos y de variables dependientes de ellos, tales como los niveles el agua [*Zhou et al*., 2014].

Una calibración ideal consiste en encontrar los parámetros que hagan que la solución del modelo sea igual a las mediciones hechas en campo, para ello se hace necesario definir un residuo que representa la diferencia entre los valores obtenidos mediante la simulación del modelo y los valores medidos en campo, esto se realiza mediante la definición de una función objetivo [*Medina et al.*, 1996].

A diferencia de la modelación tradicional, la modelación inversa es más compleja debido a que involucra una gran cantidad de pasos de los cuales la estimación de los parámetros no es necesariamente el más importante ni el que requiere más tiempo. En este caso, definir la estructura del modelo puede ser equivalente a describir la estructura física del sistema en términos de parámetros de los modelos. Uno de los pasos más importantes en el proceso es la parametrización, la cual consiste en expresar los parámetros físicos como una función de parámetros del modelo, y uno de los problemas que se presentan en la estimación de parámetros es que diferentes conceptualizaciones pueden conducir a un modelo de similar rendimiento. Además, si la estructura del modelo es incorrecta, sus parámetros pueden no tener relación con su representación física [*Medina et al.*, 1996].

Una vez se tenga bien definida la estructura básica del modelo, se debe elegir un método adecuado de optimización que permita identificar los parámetros que gobiernan los procesos de flujo y transporte de solutos en la formación. Aquí se introduce el concepto de caja negra, en donde se conocen las entradas y las salidas pero no el sistema físico a modelar [*Yaver*, 2011]. Las redes de fracturas que se generan de forma estocástica, basándose en un proceso de prospección geológica, de antemano tienen un alto grado de incertidumbre dada la dificultad en la toma de información. Por eso es necesario elegir un método de búsqueda, que sea capaz de identificar los parámetros representativos del sistema dentro de una superficie paramétrica con infinidad de soluciones.

El Grupo de Investigación en Ingeniería de Recursos Hídricos de la Universidad Nacional de Colombia, en la línea de investigación de modelación de fenómenos y amenazas naturales, enfocado en hidrogeología, ha abordado el problema de la modelación de flujo y transporte en medios fracturados, a través de los modelos DFNs por considerar que estos son la solución más realista y aproximada a este problema pese a su gran complejidad. *Donado* [2009] realizó modelación en medios fracturados mediante redes de fracturas discretas, en este trabajo se presenta una metodología para la interpretación de pruebas de bombeo y de trazadores en DFN en un batolito granítico. *Yaver* [2011] realizó la optimización de parámetros de flujo en medios fracturados, en donde se implementaron algoritmos sofisticados de calibración, con el objetivo de encontrar los parámetros hidrodinámicos óptimos del medio (K conductividad hidráulica y Ss coeficiente de almacenamiento específico) que describan adecuadamente el proceso de flujo en éste; [*Pardo*, 2012] utilizó la teoría de percolación, en donde se redujo el ancho de

banda (reducción de gasto computacional y tiempo de simulación) para hacer ágil y parsimonioso el modelo, sin embargo enfocado en el proceso de flujo.

Este trabajo es la culminación de toda ésta investigación, realizando la modelación de los procesos de transporte en medios fracturados, utilizando la red de fracturas modificadas con la teoría de la percolación y la implementación de algoritmos sofisticados de calibración para obtener el conjunto de parámetros de transporte óptimos en el medio, pues este es el punto clave del presente trabajo, evaluar diversas metodologías de optimización que han sido aplicadas ampliamente en diferentes campos de la investigación con resultados satisfactorios.

Esto dará paso a que este tipo de modelos (más cercanos a la realidad) sea más versátil, parsimonioso y eficiente, estimulando cada vez más su uso en consultoría o estudios de impacto ambiental, en procesos de construcción de túneles viales o de centrales hidroeléctricas, plantas de abastecimiento de agua potable con fuentes subterráneas, explotación minera, entre otras.

El primer capítulo del presente documento expone los conceptos básicos necesarios para la comprensión del trabajo desarrollado. Una breve descripción del Código TRANSIN IV desarrollado por *Medina et al.* [2004], con la formulación y el esquema de solución de las ecuaciones de flujo y transporte. Seguido, se presenta la definición del problema inverso y la descripción de las funciones objetivo utilizadas. Finalmente, se describen los tres algoritmos de optimización acoplados al TRANSIN IV.

El segundo capítulo contiene la descripción de la zona de estudio, su caracterización geológica y los ensayos de bombeo y de trazadores realizados. Además, se presenta el enfoque de modelación, redes de fracturas discretas (generación estocástica de 100 redes) y el proceso de percolación, que se realizó a cada una de estas redes.

El tercer capítulo presenta la parametrización que utiliza TRANSIN IV y las condiciones de frontera para modelación de flujo y transporte. También la solución del problema inverso para encontrar los parámetros de flujo y transporte para cada red de fracturas discretas; y, una discusión con base en los resultados obtenidos, donde se realiza un análisis de sensibilidad y estadístico de los parámetros obtenidos. Finalmente, en el cuarto capítulo se presentan las conclusiones que surgen de la presente investigación.

1. Conceptos Básicos

En este capítulo se presentan brevemente las bases conceptuales necesarias para comprender este trabajo de investigación. Primero se realiza una breve descripción del modelo numérico TRANSIN IV, con la formulación y el esquema de solución de las ecuaciones de flujo y transporte. Seguido se presenta la definición del problema inverso y la descripción de las funciones objetivo utilizadas. Finalmente, se describen los tres algoritmos de optimización acoplados al TRANSIN IV.

1.1 TRANSIN IV

El modelo numérico TRANSIN IV resuelve principalmente el flujo lineal junto al problema inverso de transporte, utilizando estimaciones previas, medidas de nivel y concentración, se pueden estimar los siguientes parámetros de un acuífero: transmisividad, almacenamiento, recarga, límites de niveles y flujo, goteo, dispersividad, difusión molecular, porosidad, retraso, decaimiento lineal, límite de concentraciones. TRANSIN IV implementa el método de elementos finitos en el espacio y pondera el esquema de diferencias finitas en el tiempo para resolver las ecuaciones de flujo no permanente y transporte en modo transitorio [*Medina et al.*, 2004].

El dominio del flujo y transporte es 1D, 2D o cuasi 3D, aplicando elementos lineales 1D, triángulos lineales 2D o rectángulos bilineal en 2D mixtos. Los regímenes de tiempo pueden ser transitorio o estacionario en cualquier ecuación (flujo o transporte). Los parámetros se estiman sobre la base de la teoría de máxima verosimilitud "*maximum, likelihood*". La minimización de la probabilidad log negativa se calcula usando el método de Marquardt [*Alcolea et al.*, 2000; *Vives et al.*, 2004].

TRANSIN IV está escrito en Fortran-77 estándar. Por lo general, no hay que compilar y vincular el programa, pero cuando la dimensión del problema es muy grande (en términos de puntos de nodos, elementos, parámetros, tiempos de

observación, etc.), la dimensión del programa no puede ser suficiente. En estos casos hay que editar un archivo y cambiar las dimensiones correspondientes.

Los tipos de análisis que puede realizar TRANSIN IV, son:

- Simulación: solución directa de nivel de flujo de aguas subterráneas y las ecuaciones de transporte.
- Estimación de parámetros (uso principal del código).
- Análisis de errores: evaluación de la incertidumbre en los parámetros del modelo.
- Análisis de Sensibilidad: evaluación de las respuestas del modelo a los cambios de los parámetros.
- Selección de modelo: identificación de los “mejores” entre un conjunto de alternativas de modelos conceptuales.
- Diseño de experimentos: selección del experimento más informativo entre un conjunto de alternativas.

Además, TRANSIN IV tiene un conjunto muy robusto de opciones de salida, que facilita el post-procesamiento de los resultados.

1.1.1 Flujo en medios fracturados

En medios fracturados se adopta que el flujo va a través de una red de fracturas interconectadas, llamadas fracturas conductivas. El código utilizado en esta investigación y en *Donado* [2009] fue TRANSIN IV y donde el flujo en fracturas planas sigue la ecuación de flujo de pozo conocido en un dominio de dos dimensiones [*Medina et al.*, 2004; *Pardo*, 2012]:

$$\nabla(T\nabla h) + q + q_L = S\frac{\partial h}{\partial t} \qquad en\ \Omega, \tag{1.1}$$

donde: h es la carga hidráulica, T es la transmisividad, S es el coeficiente de almacenamiento, Ω es el dominio de flujo, q el término de fuente o sumidero y q_L representa el goteo debido a recarga por acuitardos o por fracturas que conectan con otros acuíferos.

Esta ecuación se resuelve para las siguientes condiciones iniciales y de contorno:

1. Nivel prescrito: Solución para estado estable, cuando el nivel inicial de la prueba de bombeo h_o se considera cero, siendo h la variación de nivel o

abatimiento. Se tiene: $h(x,y,0) = h_o(x,y)$, entonces la solución de la ecuación **(1.1)** para estado estable sería:

$$K\frac{d^2h_o}{dx^2} + q_o + q_{L_o} = 0 \qquad en\ \Omega, \tag{1.2}$$

donde: K es la conductividad hidráulica

2. Caudal prescrito: Solución para estado estable con la condición de contorno de caudal prescrito. La ecuación (**1.1)** quedaría:

$$\left(K\frac{d^2h_o}{dx^2}\right)n = \alpha(H_0 - h_0) + Q_0 \qquad en\ \Gamma, \tag{1.3}$$

donde: Γ es el límite de Ω, n vector unitario normal a Γ y apuntando hacia el exterior; H nivel externo; Q caudal prescrito, y α condición de contorno conocida como coeficiente de goteo ($\alpha = 0$ para el caudal establecido, $\alpha = \infty$ para nivel prescrito). El lado izquierdo de la ecuación **(1.3)** es el flujo de agua que entra o sale del acuífero. En el caso de esta investigación se tiene una sola zona de caudal prescrito.

Para resolver esta ecuación de flujo con sus condiciones de iniciales y de contorno, se necesita conocer los valores de los parámetros desde mediciones hechas directamente en campo (conductividad específica y almacenamiento). Para tener estos parámetros físicos representados en el modelo, se debe tener un proceso de parametrización.

Una vez conocidos estos valores de los parámetros de la ecuación de flujo, se puede resolver numéricamente utilizando métodos numéricos mediante una modelación inversa. Se aplica una discretización espacial por elementos finitos a la ecuación teniendo un sistema diferencial ordinario resuelto mediante diferencias finitas. Después de aplicar el método de Galerkin a la ecuación **(1.1)** y se obtiene [*Medina et al.*, 2004]:

$$Ah + D\frac{\partial h}{\partial t} = b, \tag{1.4}$$

donde: A y D son las matrices conductancia o rigidez y de almacenamiento, respectivamente, que dependen de la geometría de los elementos y de parámetros

de flujo y b es un vector que depende de la recarga del área y de los parámetros límites. Esta ecuación es resuelta por TRANSIN IV con un sistema numérico lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias con un parámetro de peso, obteniendo un sistema de ecuaciones lineales [*Medina et al.*, 2004].

$$\left(\theta_f A + \frac{1}{\Delta t} D\right) h^{k+1} = \theta_f b^{k+1} + \left(1 - \theta_f\right) b^k + \left(\left(\theta_f - 1\right) A + \frac{1}{\Delta t} D\right) h^k, \qquad (1.5)$$

donde: θ_f parámetro de peso de flujo ($0 \leq \theta_f \leq 1$ si $\theta_f = 0$ se trata de un esquema explícito, si $\theta_f = 1$ está implícito), h^{k+1} matriz de nivel en el tiempo $k + 1$. Este sistema de ecuaciones se resuelve de forma secuencial a partir de las condiciones iniciales h_0.

1.1.2 Transporte de Solutos

La ecuación de transporte resuelta por TRANSIN IV sigue la formulación clásica. Los procesos físicos - químicos considerados por el programa son: dispersión, difusión molecular, advección, reacciones químicas de primer orden, adsorción lineal y difusión en la matriz [*Medina et al.*, 2004]. El régimen puede ser estacionario o transitorio. En los contornos se pude fijar la concentración o flujo másico; también puede especificarse el flujo másico como producto de una concentración por el flujo de agua. Tanto las concentraciones como los flujos másicos pueden variar de forma impuesta [*Guimerá et al.*, 1996], y se rige por la siguiente ecuación:

$$b\emptyset R \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(D\nabla c) - q\nabla c + q_r(c - c') - \lambda b\emptyset R_c - b\sigma_m \emptyset_m D_m|_{z=0} \qquad en\ \Omega, \qquad (1.6)$$

donde: $\emptyset$ es la porosidad del acuífero, b es el espesor, c es la concentración del soluto, t es el tiempo, q es la velocidad de Darcy, c' es la concentración externa del soluto en los sumideros o fuentes, λ es coeficiente de reacción de primer orden (por ejemplo, la desintegración radiactiva), $\emptyset_m$ es la porosidad de la matriz, D_m la difusión molecular en la matriz, σ_m la superficie específica en la matriz y z es el eje de coordenadas perpendicular a la dirección de flujo, *R* es el coeficiente por el retraso a los fenómenos de adsorción. D es el tensor de dispersión, que se formula de la siguiente forma:

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{xy} & D_{yy} \end{pmatrix} \qquad (1.7)$$

$$D_{xx} = \emptyset b D_d + \frac{\alpha_L q_x^2 + \alpha_T q_y^2}{|q|}, \tag{1.8}$$

$$D_{yy} = \emptyset b D_d + \frac{\alpha_L q_x^2 + \alpha_T q_y^2}{|q|}, \tag{1.9}$$

$$D_{xy} = (\alpha_L - \alpha_T)\frac{q_x q_y}{|q|}, \tag{1.10}$$

donde: D_d es la difusión molecular, α_L es la dispersividad longitudinal, α_T es la dispersividad transversal, q_x y q_y son los componentes de la velocidad de Darcy en las direcciones x y y.

Esta ecuación se resuelve para las siguientes condiciones iniciales y de contorno:

Condiciones iniciales:

$$c(x, y, 0) = c_o(x, y) \qquad \forall x, y \in \Omega. \tag{1.11}$$

Condiciones de contorno:

1. Dirichlet:

$$c = c_e \qquad en\ \Gamma_1, \tag{1.12}$$

2. Mixta:

$$D\nabla cn = \beta(c_e - c) + M \qquad en\ \Gamma_2, \tag{1.13}$$

donde: $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ son los límites de Ω, $\beta = 0$ y $M = 0$ condiciones de contorno de salidas en el dominio (flujo másico igual a cero), $\beta = -qn$ condición de contorno de inyección de una concentración externa, $\beta = 0$ y $M \neq 0$ condición de contorno para la entrada de masa al dominio.

Para resolver esta ecuación de transporte con sus condiciones de iniciales y de contorno y conocidos los valores de los parámetros, se puede resolver numéricamente utilizando métodos numéricos mediante una modelación inversa.

Se aplica una discretización espacial por elementos finitos a la ecuación, teniendo un sistema diferencial ordinario resuelto mediante diferencias finitas. Después de aplicar el método de Galerkin a la ecuación (1.6), se obtiene [*Medina et al.*, 2004]:.

$$Ec + F\frac{\partial c}{\partial t} = g, \tag{1.14}$$

donde: las matrices E, F y el vector g dependen de los parámetros de transporte (porosidad, dispersividad, etc.) y de la velocidad de Darcy. Aplicando diferencias finitas en la ecuación (1.14), se obtiene:

$$\left(\theta_\tau E + \frac{1}{\Delta t}F\right)c^{k+1} = \theta_\tau g^{k+1} + (1-\theta_\tau)g^k + \left((\theta_\tau - 1)E + \frac{1}{\Delta t}F\right)h^k, \tag{1.15}$$

donde: θ_τ parámetro de peso de transporte ($0 \leq \theta_f \leq 1$ si $\theta_f = 0$ se trata de un esquema explícito, si $\theta_\tau = 1$ está implícito), c^{k+1} matriz de nivel en el tiempo $k+1$. Este sistema de ecuaciones, se resuelve de forma secuencial a partir de las condiciones iniciales c_0.

La mayoría de las dificultades asociadas a la modelación de transporte de solutos están relacionadas con los criterios de estabilidad numérica, los cuales se deben cumplir de acuerdo a la discretización y los parámetros del modelo. En una discretización con una malla 1D, los criterios son:

Criterio de Courant $$C_o = \frac{\mathrm{v}\,\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \tag{1.16}$$

Criterio de Péclét $$P_e = \frac{\mathrm{v}\,\Delta \mathrm{x}}{\mathrm{dispersividad}} \leq 2 \tag{1.17}$$

1.2 Problema Inverso

El problema inverso consiste en la estimación de los parámetros del modelo a partir de mediciones de la respuesta del sistema y un apropiado conocimiento previo de los parámetros (obtenida, por ejemplo, mediante ensayos de campo o de laboratorio) *Carrera et al.* [2005a]. En el contexto de la hidrogeología subterránea se basa en la estimación de los parámetros de un acuífero (transmisividad,

almacenamiento, etc). Para la modelación inversa es conveniente distinguir los siguientes conceptos [*ENRESA*, 1996]:

Proceso de identificación: consiste en la selección de los parámetros físicos y químicos, y las correspondientes ecuaciones, que son incluidas en el modelo numérico que se consideren pertinentes de la salida simulada (Ejemplo: ley de Darcy, mecanismos de recarga, etc.)

Identificación de la estructura del modelo: se basa en la definición de la geometría del modelo y variación de los parámetros físicos (Ejemplo: zonas hidráulicas sobre las cuales la conductividad es asumida constante; límites geométricos y tipos, localización de las fuentes, etc.)

Estimación de parámetros: es definida como la cuantificación de todos los parámetros del modelo. Esto implica asignar valores numéricos a las variables que definen los parámetros físicos.

1.3 Algoritmos de optimización

El principal objetivo de la modelación es representar adecuadamente los fenómenos físicos que intervienen en el problema. Para evaluar esta eficiencia se comparan las mediciones de campo con los resultados de la simulación, en nuestro caso: niveles piezométricos y concentraciones de solutos. Evidentemente lograr una correspondencia perfecta entre las entradas y las salidas del modelo es complejo, principalmente debido a la incertidumbre y errores provenientes de las simplificaciones en el modelo conceptual, errores numéricos relacionados con la discretización, errores de redondeo o errores de medición en campo [*Medina et al.*, 1996; *Yaver*, 2011]. La incidencia o la suma de estos errores se traduce en una diferencia entre los datos medidos y los simulados, la cual se cuantifica mediante una función objetivo.

El desempeño de cada simulación del modelo numérico, se evalúa mediante el valor de la función objetivo, para garantizar la minimización veloz y eficientemente se utilizan algoritmos automáticos de optimización. En este trabajo de investigación se implementaron de tres algoritmos de calibración automática: i) Algoritmo de máxima verosimilitud (Método de Levenberg-Marquardt [*Alcolea et al.*, 2000; *Medina et al.*, 2004], ii) *Shuffled Complex Evolution – University of Arizona* (SCE-UA) [*Duan et al.*, 1993], y. iii) Estimación generalizada de incertidumbre por verosimilitud GLUE (por sus siglas en inglés) [*Beven y Binley*, 1992].

1.3.1 Función objetivo

La función objetivo es una medida de desempeño que utiliza estadísticos de error o combinaciones de ellos. Generalmente, la función objetivo se plantea de tal forma que valores pequeños (o en algunos casos grandes) correspondan con mejores ajustes, entre las predicciones del modelo y el comportamiento observado del sistema [*Hernández*, 2014].

En este trabajo de investigación se utilizaron dos formulaciones de funciones objetivo: El método que utiliza TRANSIN IV, aplica la máxima verosimilitud que maximiza la probabilidad de los datos medidos con respecto a los parámetros [*Medina et al.*, 2004] y el coeficiente de eficiencia o Nash – Sutcliffe (E) [*Nash y Sutcliffe*, 1970].

En TRANSIN IV, la minimización de la función objetivo (J) incluye la diferencia de pesos entre los datos observados (y_i) y calculados (y_i^*) más la diferencia entre los parámetros usados como información previa (p_i) y los parámetros estimados (p_i^*) [*Donado*, 2009]:

$$\min J = \sum_{i=1}^{ny} \lambda_{y,i}\,(y_i - y_i^*) + \sum_{i=1}^{np} \lambda_{p,i}\,(p_i - p_i^*) = J_h + J_p, \tag{1.18}$$

donde: λ valor de los pesos de los parámetros, ny número de la variable medida (Niveles piezométricos o concentraciones) y np parámetros de los valores de entrada.

El coeficiente de eficiencia adquiere valores entre menos infinito y 1, siendo los valores más cercanos a 1 los que indican un mejor ajuste. Un caso especial es cuando $E = 0$, el cual se obtiene cuando la variable calculada es igual al promedio de los observados, mostrando que el promedio de los valores observados en este caso es tan buen predictor como el modelo. En este orden de ideas, se podría pensar que se requiere un valor de E>0 para que el modelo sea ajustado a la realidad [*Hernández*, 2014].

$$E = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(y_i^* - y_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{n} \left(y_i^* - \bar{y}\right)^2} \tag{1.19}$$

1.3.2 Algoritmo de Marquardt

TRANSIN IV permite resolver el problema inverso, es decir estimar los parámetros que se emplean en las ecuaciones de flujo o transporte [*Medina et al.*, 2004]. Lo resuelve a través de la minimización de una función objetivo derivada de la teoría de la máxima verosimilitud que permite incluir información de los parámetros, descrita en la sección anterior (1.3.1 Función objetivo). Dispone de un algoritmo de calibración que usa el Método de Levenberg-Marquardt, perteneciente al grupo de optimización de Gauss-Newton, este resuelve numéricamente dos ecuaciones diferenciales parciales, para cada valor único de la función objetivo [*Alcolea et al.*, 2000].

En general, el algoritmo consta de tres (3) partes: (i) la primera resuelve el problema directo, (ii) la segunda actualiza el estado de variable en el tiempo, y (iii) la última que actualiza el conjunto de valores de los parámetros [*Yaver*, 2011]. El programa TRANSIN IV, detiene las iteraciones cuando se cumple uno de los siguientes criterios de convergencia [*Pardo*, 2012]:

1. Cuando se alcanza el número máximo de iteraciones definidas por el usuario, así no se alcance la convergencia.
2. Cuando la pendiente de la norma del gradiente se hace pequeña, o sea la solución se encuentra cerca del óptimo y se detiene la iteración.
3. Cuando se obtiene una reducción importante de la norma de gradiente con respecto a la primera norma.
4. Cuando se tiene una reducción relativa de la función objetivo por iteración.
5. Cuando el máximo relativo del incremento de los parámetros es menor que el criterio de convergencia.

Una vez se cumple uno de los criterios de convergencia, el método arroja como resultado la combinación o el conjunto de parámetros del modelo, que mejor valor de función objetivo obtuvo.

1.3.3 Generalizated Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE)

La metodología GLUE rechaza la idea de una única solución “óptima” que explica el mejor ajuste entre los resultados o las simulaciones del modelo y los datos observados, en favor de encontrar un grupo de combinaciones (entradas, estructuras, sets de parámetros, errores), que sean consistentes en comportamiento con las observaciones [*Hernández*, 2014].

En este algoritmo se llevan a cabo un gran número de corridas (simulaciones de Monte Carlo) del modelo con diferentes combinaciones de valores de parámetros, seleccionados aleatoriamente de una distribución paramétrica a priori. Comparando las respuestas simuladas y observadas, a cada combinación de valores de parámetros se les asigna un valor de verosimilitud, es decir, una función que cuantifica qué tan bien simula una combinación paramétrica en particular el sistema. Las corridas se detienen cuando se cumple uno de los siguientes criterios de convergencia:

1. Cuando se alcanza el número máximo de iteraciones definidas por el usuario, así no se alcance la convergencia.
2. Cuando se tiene una reducción relativa de la función objetivo por iteración (porcentaje de cambio máximo permitido en la mejor función objetivo en 6 iteraciones consecutivas igual a 0.1).
3. Cuando el máximo relativo del incremento de los parámetros es menor que el criterio de convergencia (Rango geométrico normalizado máximo de 0.001, como medida del tamaño del espacio de búsqueda).

Una vez se cumple uno de los criterios de convergencia, la metodología presenta diez combinaciones o conjuntos de parámetros del modelo, que obtuvieron los mejores valores de la función objetivo. El principal problema práctico en la aplicación de la metodología GLUE, viene con la elección subjetiva de la función de probabilidad y la evaluación de un umbral de riesgo entre los modelos de comportamiento [Yaver, 2011].

1.3.4 Shuffled Complex Evolution Method (SCE-UA)

El algoritmo SCE-UA está basado en cuatro conceptos principales [*Hernández*, 2014; *Yaver*, 2011]: *i)* una combinación de aproximaciones determinísticas y probabilísticas; *ii)* concepto de agrupamiento, con la evolución sistemática de un “complejo” de puntos esparcidos en el espacio paramétrico, en la dirección de una mejora global de la función objetivo; *iii)* evolución competitiva, cuando cada una de la subpoblaciones ha evolucionado, éstas están facultadas para mezclarse garantizando con esto que todas las subpoblaciones aporten sus mejores descendientes, una vez sucede esto, el proceso se repite iterativamente hasta lograr la convergencia, y *iv)* barajado (*shuffling*) complejo.

Estas cuatro características representan lo mejor de varios métodos de optimización global [*Thyer et al.*, 1999]. A continuación se describe de forma general la implementación del método [*Hernández*, 2014]:

1. Selección aleatoria (distribución uniforme) de s puntos en el espacio paramétrico factible y cálculo de la función objetivo en cada uno.
2. Organización de los puntos en orden ascendiente en el valor de la función objetivo. El menor valor en la función objetivo representa un mejor desempeño.
3. Partición de la población (s puntos) en p complejos (*complexes*), cada uno conteniendo m puntos. Los complejos son conformados de manera que el primer complejo contiene todos los $p(k-1)+1$ puntos ordenados, el segundo complejo contiene todos los $p(k-1)+2$ puntos ordenados, y así sucesivamente, siendo $k = 1, 2, \ldots, m$.
4. Evolución de cada complejo de acuerdo con el algoritmo de evolución competitiva compleja (CCE), explicado más adelante.
5. Barajado (*shuffling*) de complejos. Esto consiste en combinar los puntos en los complejos evolucionados en una única población, dicha población se ordena en orden ascendente del valor de la función objetivo y se vuelve a dividir en p grupos de acuerdo con el procedimiento descrito en el paso 3.
6. Verificación de convergencia. Si se cumplen los criterios definidos, parar, de lo contrario, continuar.

Las corridas se detienen cuando se cumplen uno de los siguientes criterios de convergencia:

1. Cuando se alcanza el número máximo de iteraciones definidas por el usuario, así no se alcance la convergencia.
2. Cuando se tiene una reducción relativa de la función objetivo por iteración (porcentaje de cambio máximo permitido en la mejor función objetivo en 6 iteraciones consecutivas igual a 0.1).
3. Cuando el máximo relativo del incremento de los parámetros es menor que el criterio de convergencia (Rango geométrico normalizado máximo de 0.001, como medida del tamaño del espacio de búsqueda).

Una vez se cumple uno de los criterios de convergencia, la metodología presenta la mejor combinación o conjunto de parámetros del modelo, que obtuvo el mejor valor de la función objetivo.

Teniendo claro los conceptos básicos para la modelación del flujo y transporte de medio fracturados, en el siguiente capítulo se describirá la zona de estudio donde se desarrolló está investigación. Se realizará una breve descripción de los trabajos de caracterización geológica e hidrogeológica, así como la metodología de generación de las redes de fracturas discretas y el proceso de precolación de las mismas. Por último se presentan los detalles del ensayo de bombeo y los ensayos de trazadores realizados en el macizo.

2. Dominio de Modelación

En este capítulo se presenta una descripción de la zona de estudio y todos los trabajos de caracterización geológica e hidrogeológica que se hicieron en campo. Y, cómo a partir de estos datos se realizó la generación de 100 redes de fracturas discretas, con el ánimo de representar adecuadamente el medio. Por último, se describen los ensayos de bombeo y de trazadores realizados.

2.1 Zona de estudio

Este trabajo se realiza en el marco del proyecto internacional El Berrocal, que tiene como objetivo entender y modelar los procesos de migración que controlan la distribución natural de los radionucleicos en un ambiente de fracturas graníticas [*D'Alessandro et al.*, 1997; *ENRESA*, 1996]. La zona de estudio es un macizo granítico fisurado de unos 22 km^2 localizado en Nombela, provincia de Toledo – España.

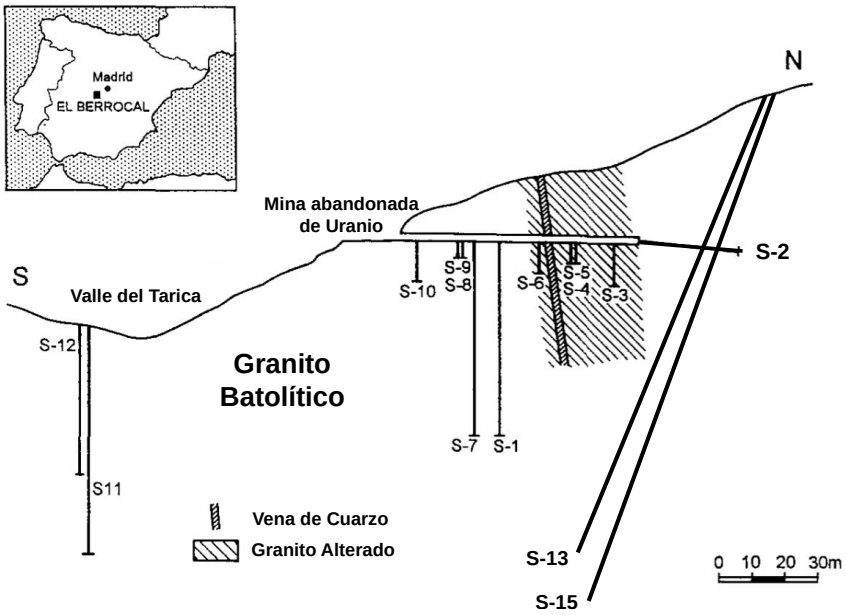

Figura 2-1. Ubicación y perfil de la zona de estudio El Berrocal. Adaptado de *D'Alessandro et al.* [1997]

El proyecto tenía como objetivo conocer los aspectos estructurales, litológicos, geoquímicos, hidroquímicos e hidrogeológicos del sistema granito-mineralización, a fin de establecer un modelo de migración de los radionucleidos naturales del medio [*Rivas et al.*, 1993].

Para la exploración del macizo se contaba con la galería de acceso a una antigua mina de Uranio y se perforaron 19 sondeos al exterior de la galería, Figura 2-1. A los testigos de perforación se les realizó un análisis minerológico, identificación de fracturas hidráulicamente cortadas por los sondeos y una caracterización de los rellenos fisúrales. Además, se realizó una cartografía geológica de un área aproximada de 1 km^2, acompañada de un estudio estructural, con el fin de generar una red de fracturación. Así mismo, se realizaron estudios geofísicos de superficie (magnetometría y gravimetría), ensayos hidráulicos (pruebas de bombeo de corta y larga duración), ensayos de trazadores de dilución y flujo convergente [*Guimerá et al.*, 1996] y un estudio hidrogeoquímico e isotópico.

2.2 Generación de las DFNs

El comportamiento hidráulico en un modelo DFN es entendido y representado por tres factores: i) sistema geométrico de las redes de fracturas (la conectividad de la red), ii) la apertura o transmisividad de fracturas individuales y iii) el material de relleno de la fractura.

La generación se basa en simulaciones estocásticas de sistemas de fracturas, usando funciones de densidad de probabilidad (*pdf*) de los parámetros geométricos de las fracturas (densidad, orientación, longitud, apertura o transmisividad) formulada de acuerdo a los resultados del campo mapeado, y de la suposición de la forma de la fractura (circular, elíptica o poligonal). El mapeo directo en campo solo puede llevarse a cabo en superficies de exposición de tamaño limitado, perforaciones de diámetro, longitud y profundidad limitadas y en las paredes de las excavaciones subterráneas (túneles, cavernas, pozos, etc.). En el Berrocal se mapeo en superficie, en las paredes de la mina abandonada de uranio y en la interpretación de los núcleos de perforación obtenidos en los 19 sondeos. A partir de estos datos, se obtuvo el conjunto de familias de fracturas; estas series de fracturas con características similares definidas en términos de funciones de densidad de probabilidad. Las herramientas para cuantificar las *pdf* de estas propiedades incluyen diferentes conceptos como: fractales, leyes de potencia, escalado y resolución, y la teoría de la percolación [*Berkowitz*, 2002].

La selección de la forma particular de la geometría de las fracturas depende de que esta pueda ser fácilmente parametrizada, para este trabajo se utilizó la forma circular, es decir discos. Una fractura individual se caracteriza como un disco en un espacio 3D por un punto (localizado en el centro), una longitud (el radio), tres ángulos (orientación) y una distancia (la abertura de fractura, si se considera constante). Todos estos parámetros de dibujo se extraen de distribuciones de densidad de probabilidad *pdf (*ya sea de forma independiente o conjunta).

La metodología usada por *Ruiz* [2002], para hacer la descripción de la red de fracturas, consiste en la caracterización en funciones de distribución por módulos: cantidad, tamaño, alineación y localización de las fracturas. Estos cuatro módulos se implementan siguiendo un proceso secuencial para producir una realización de un sistema de fracturas, siguiendo el principio de conservación de densidad de fractura. Esto significa que cada nueva red de fractura generada debe considerar la imposición de densidad (menos en el dominio de simulación) y la preservación de la función de distribución de tamaño. El resultado es un medio sintético, en la cual las fracturas adicionales pueden ser fácilmente añadidas (o eliminadas) para mejorar los aspectos de conectividad de la red o para incluir fracturas específicas que se han observado o postulado.

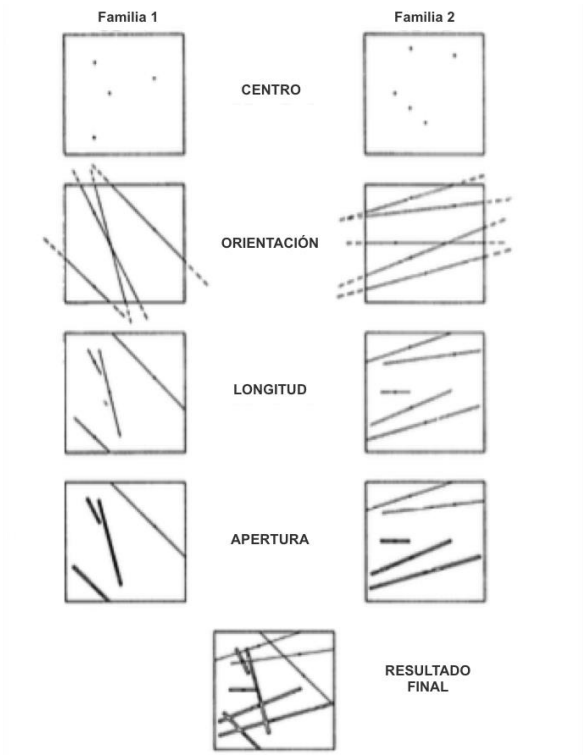

Figura 2-2. Metodología de generación de la red de fracturas discretas, adaptado de *Pardo* [2012]

De la investigación geológica se encontraron cinco familias de fracturas, que se caracterizaron de acuerdo a propiedades geomorfológicas, densidad de fracturas, localización, orientación espacial y apertura de fractura [*Vives et al.*, 2004]. Una vez que se han definido estadísticamente las familias de fractura, se generan campos sintéticos de las fracturas en una escala pre-especificada (1:2000). En la Figura 2-3 se muestra una de las realizaciones de la red, junto con una sección geológica en una elevación de 0 m. En el Berrocal sobre la base de un modelo regional del sitio, la extensión de simulación del bloque seleccionado fue de 600 × 600 × 300 m., se generaron un total de 100 redes por este método.

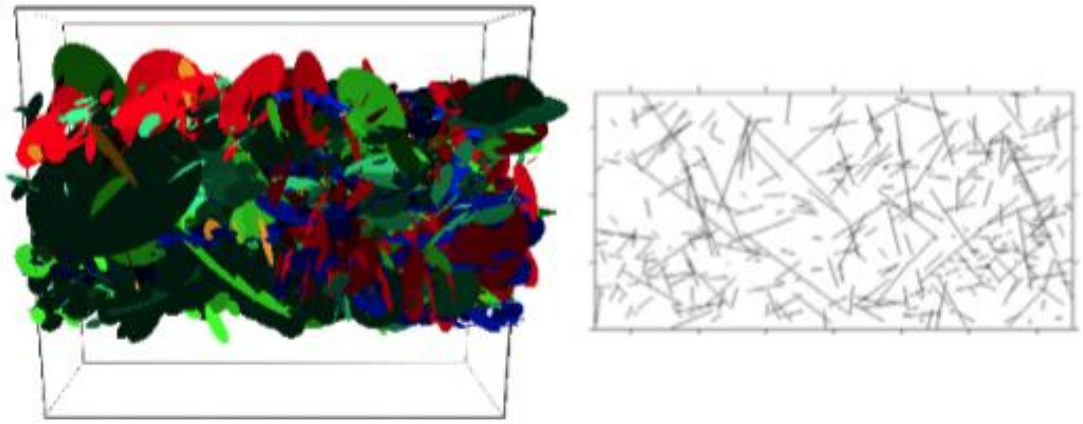

Figura 2-3 Realización individual de una red de fracturas, con la sección geológica. tomado de *Donado* [2009]

2.2.1 De la DFN a la malla numérica

Una vez generadas las DFNs, el siguiente paso es traducirlas a una malla que pueda ser leída por un código numérico. Para este caso, la metodología usada conceptualiza el flujo en una red de fracturas como una red de canales interconectados, Figura 2-4. La metodología propuesta es una modificación del modelo de canales desarrollado por *Cacas et al.* [1990].

Lo primero es encontrar la red de fracturas conductiva (subconjunto de toda la red). Esta red está formada por un cluster o grupo de fracturas que están físicamente interconectadas (no aisladas) y conectadas hidráulicamente a los límites, de manera que puedan conducir el agua. Una vez definido el cluster, la creación de la red de elementos 1-D (canales) se realiza en tres etapas de acuerdo a la metodología de [*Ruiz*, 2002], Figura 2-4:

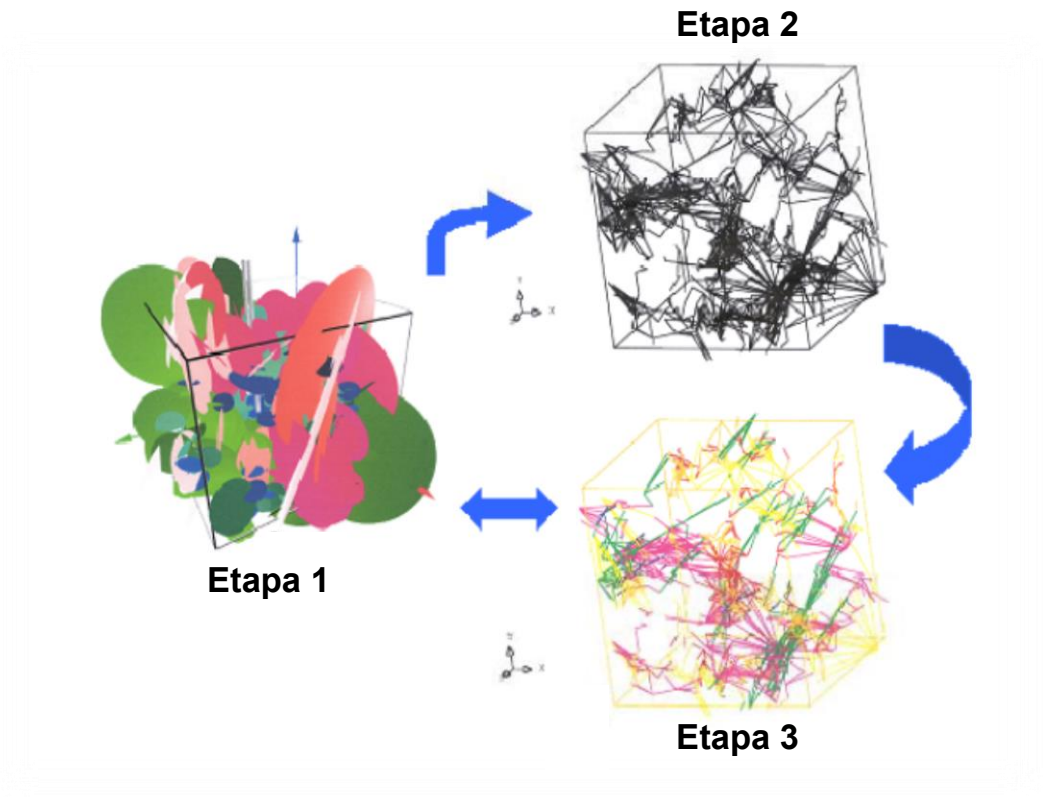

Figura 2-4. Procedimiento de ir de un DFN 3D a una malla de elementos 1D incrustado en un volumen 3D. Adaptado de *Donado* [2009]

1. En la Figura 2-5 se observan tres discos interceptados que están conectados por tres segmentos (e31, e13-e12, y e21), cada uno con un nodo situado en el centro de cada disco (h3, h2, h1). Estos tres nodos están conectados mediante la definición de dos nodos adicionales (h13, y h12), localizado en la intersección de las tres fracturas (el punto real seleccionado es el que minimiza la longitud total de los segmentos). El resultado de elementos o segmentos en 2D se asocia a dos discos determinados (fracturas), es decir, los segmentos o elementos e31, e12 y e13, y e21 que pertenecen a la zona conductiva asociada a las fracturas 1, 2 y 3.

2. La etapa 1 se repite para todos los discos interceptados que pertenecen a un cluster interconectado.

3. A cada elemento e_{ij} generado, se asocia a una fractura y se transfieren las propiedades hidráulicas de la fractura al elemento. En la Figura 2-4, cada color representa una familia de fracturas compuesta por varios elementos.

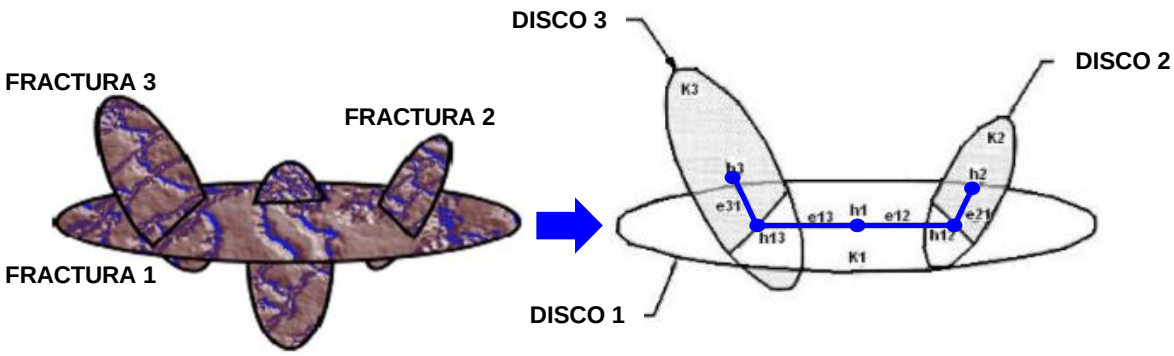

Figura 2-5. Construcción de una red de canal conductivo [*Donado*, 2009]

Para introducir los pozos y los puntos de observación, se generan elementos 1D adicionales en la malla 3D, los cuales hacen parte de la red conductiva. Esto se puede observar en la Figura 2-6, donde dos nodos son generados por cada punto de observación (n1 y n2) y están conectados a través de un elemento 1D (e1 - este elemento tiene las propiedades del pozo), uno de estos nodos (n2) están conectados a todos los discos de intersección (D1, D2, D3 y D4), con elementos que conectan al punto central de cada disco (e_{ij} - estos elementos tienen las propiedades de las fracturas). Todas las fracturas que interceptan el pozo están unidas a un nodo simple (que representa el punto de observación). Dado que estos elementos no se corresponden con cualquier familia, se creó una familia adicional.

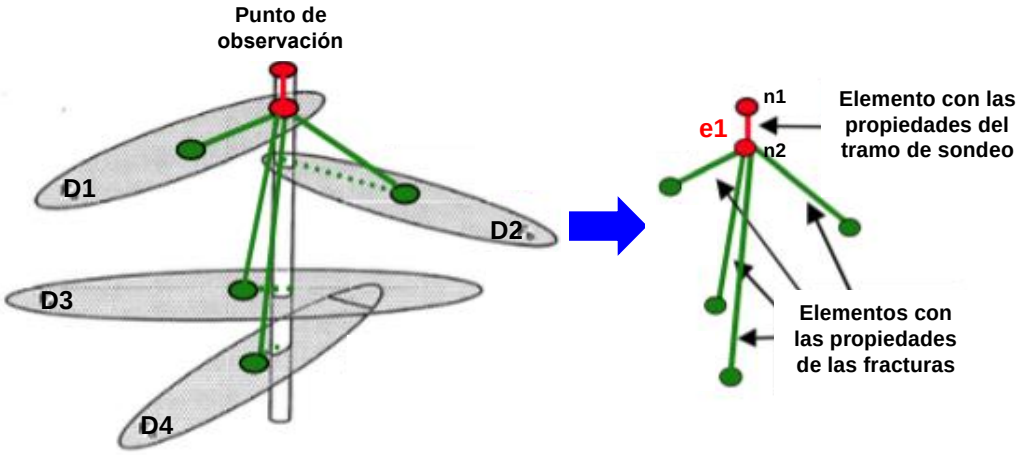

Figura 2-6. Generación de nodos y elementos en los pozos y puntos de observación, adaptado de *Ruiz* [2002]

Finalmente se obtuvieron 100 mallas numéricas, cada una compuesta por una red de nodos y elementos 1D inmersos en un dominio 3D, en promedio las redes cuentan con aproximadamente 1000 elementos.

2.3 Teoría de la Percolación

Donado [2009] y *Yaver* [2011] presentaron problemas para la simulación de flujo y transporte en las redes de fracturas discretas sintéticas, asociados al gran tiempo de cálculo en cada simulación. Esto debido al elevado número de elementos presentes en cada red (incrementa el ancho de banda de las matrices de conductancia o rigidez y de almacenamiento), llevando la metodología a ser altamente ineficiente. Se planteó entonces la necesidad de incluir la teoría de la percolación para redefinir las redes conductivas [*Berkowitz*, 2002].

Pardo [2012] implementó un algoritmo de percolación para encontrar el "*Backbone* - columna vertebral" de cada red. Es decir, el conjunto de elementos del sistema a través del cual el fluido puede fluir [*Berkowitz*, 2002]. Este algoritmo eliminó los clusters de las fracturas que se han desconectado del esqueleto principal y definió acertadamente la red conductiva (Fracturas que efectivamente conducen agua). Disminuyendo el número de parámetros a calibrar, y por tanto el ancho de banda de las matrices de rigidez de modelos numéricos, es decir reduce el costo computacional de cálculo *Pardo* [2012].

Después de hacer múltiples pruebas para eficacia del algoritmo de percolación resuelto para las DFNs, se corrieron las nuevas 100 DFNs. Estas redes en general tienen una reducción considerable del número de elementos que forman clusters, generalmente en un orden de magnitud (de 1000 elementos a 100). En la Figura 2-7, se presentan los resultados de la percolación para una red.

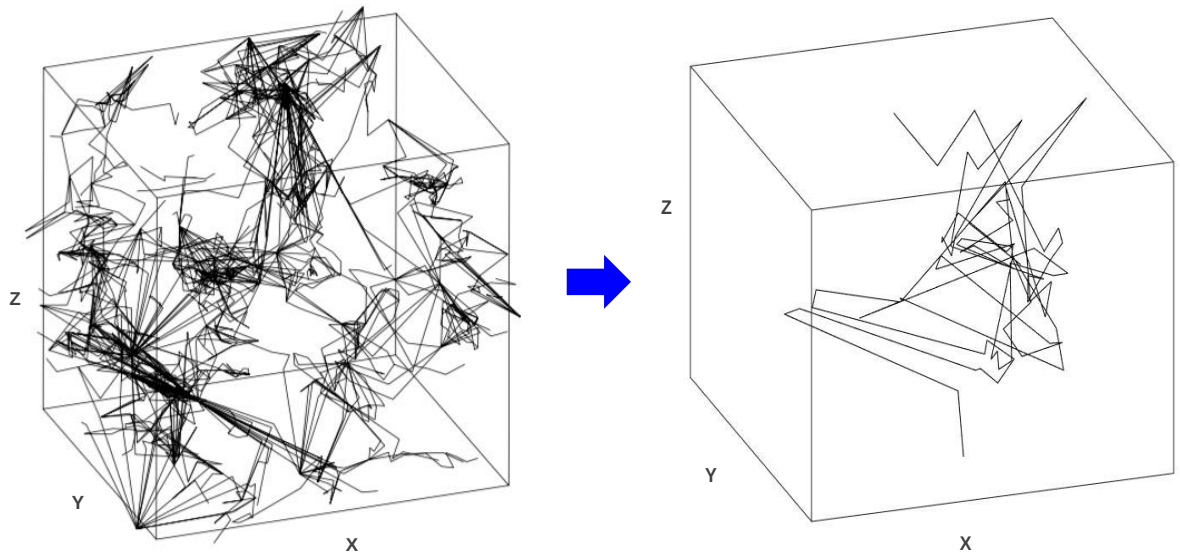

Figura 2-7. Aplicación de la teoría de la percolación a una de las redes de fracturas discretas

De las 100 redes, 97 eran aptas para aplicarles el algoritmo de percolación (se tenían los datos completos); de éstas, en 13 fue imposible realizar simulaciones de flujo con la nueva red corta. Sin embargo, en las redes restantes el tiempo de cálculo para simular el flujo pasó de varias horas a solo un segundo, obteniendo resultados muy similares.

Finalmente, en este trabajo se contó con datos de 84 redes (promedio de 100 elementos), para realizar las simulaciones de flujo y resolver el problema inverso en transporte.

2.4 Ensayos de Campo

En los ensayos hidráulicos analizados intervienen tres pozos, uno de bombeo, otro de inyección (ensayo de trazadores) y otro de observación, sin embargo se midieron las cargas hidráulicas y las concentraciones en los tres pozos involucrados. En la Tabla 2-1 se presentan las características de los pozos S-2 (Sondeo realizado al interior de la mina abandonada), S-13 y S-15.

Pozo	Coordenadas			Pendiente (drv)	Profundidad (m)	Diámetro (mm)
	X	Y	Z			
S 2	370.056	4 451.1806	900.21	95	30.1	86
S 13	370.058	4 451.194	945.00	20	173.7	101
S 15	370.088	4 451.010	946.5	30	154.76	101

Tabla 2-1. Características físicas de los pozos involucrados en los ensayos hidráulicos

2.4.1 Ensayo de bombeo

Se realizó un ensayo de bombeo de interferencia, en donde a través de obturadores (*packers*) se aísla la zona donde el sondeo se encuentra con alguna fractura (ésta debe ser conductiva). En la Figura 2-8, se presenta el esquema de cada pozo realizado y se puede observar que las zonas grises es donde se aísla la fractura y se mide el cambio de presión durante el ensayo.

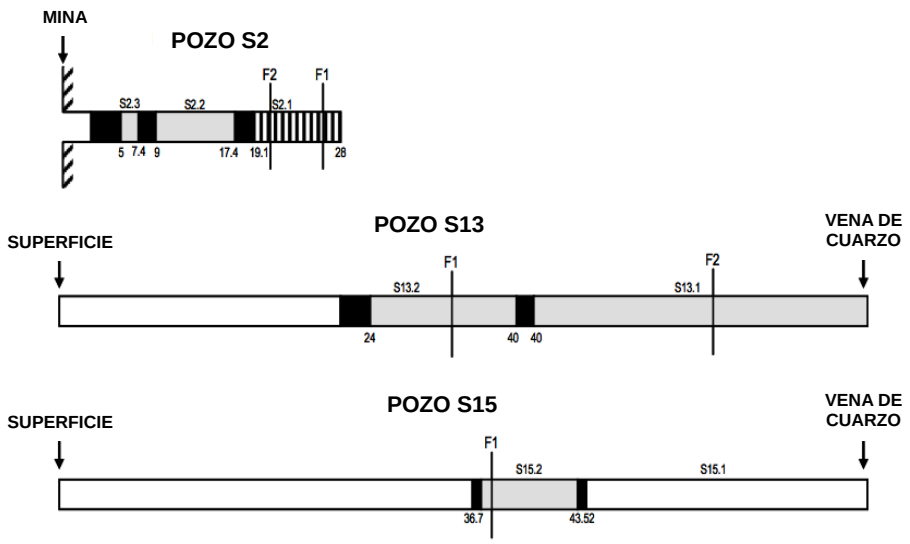

Figura 2-8. Ubicación de los obturadores de los pozos involucrados en la prueba de bombeo, adaptado de *Donado* [2009]

Durante el ensayo se extrajo agua del pozo S-2, un caudal constante de 0.1 L/min durante 4 días y se midieron las cargas hidráulicas en los pozos de observación S-13 y S-15, y en el pozo de bombeo S-2 [*Guimerá et al.*, 1996].

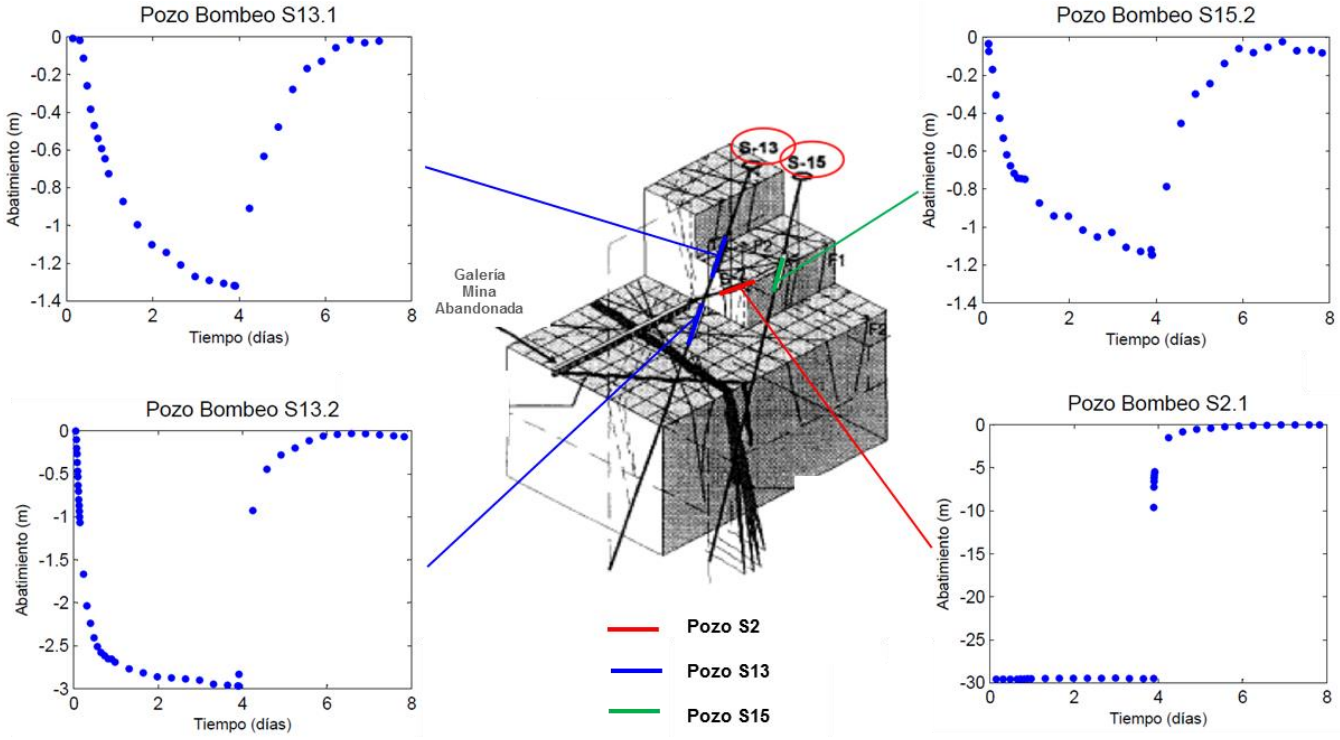

Figura 2-9. Ubicación de los pozos de bombeo y observación. Gráficas de abatimiento observado para cada pozo.

2.4.2 Ensayo de trazadores

Se realizó un ensayo de flujo convergente, que consistió en la creación de un campo de velocidades del agua convergente hacia un pozo de bombeo y la inyección de uno o varios trazadores dentro del ámbito de ese campo. El ensayo se realizó con unas medidas de control muy estrictas: i) Verificación de las presiones hidráulicas en las secciones obturadas de los pozos, ii) Mezcla adecuada de la solución con los trazadores para garantizar su homogeneidad y iii) Monitoreo continuo de la concentración de los trazadores en el pozo de extracción [*D'Alessandro et al.*, 1997].

En este caso, se bombeó desde el pozo S2 un caudal de 0.08 L/min y se realizaron dos inyecciones simultáneas en el tramo superior del pozo S13. Los trazadores inyectados fueron Uranina y Deuterio (D2O), ambos estables y conservativos. En la Tabla 2-2 se resumen las masas inyectadas y recuperadas.

Trazador	Masa inyectada (g)	% Recuperado	Tiempo al Pico (h)	50% recuperado (h)
Deuterio D2O	12.1	56.3	52.3	173
Uranina	15.0	40.8	96.0	-

Tabla 2-2. Datos del ensayo de trazadores [*ENRESA*, 1996]

Se estableció un caudal de recirculación en la inyección del orden de 4 a 10 veces el caudal del bombeo, una vez establecida la recirculación se inyectaron los dos trazadores y cuando se homogenizó la concentración, se forzó la entrada de estos a la formación, inyectando un volumen de agua conocido sin trazador. Esta inyección perturbó durante pocas horas el sistema de flujo, sin embargo, el tiempo que duró es pequeño si se compara con la duración total del ensayo (menos de un día frente a los 40 que duró el ensayo).

Es posible que debido a esta inyección, parte del trazador se perdiera fuera del pozo S2, lo que explicaría las recuperaciones tan bajas. La ventaja de realizar esta inyección, es que más del 90% del trazador entra en la formación antes de finalizar el primer día, con lo que se puede considerar una inyección prácticamente puntual [*Guimerá et al.*, 1996].

En la Figura 2-10 y la Figura 2-11, se presentan las curvas de llegada de los dos trazadores.

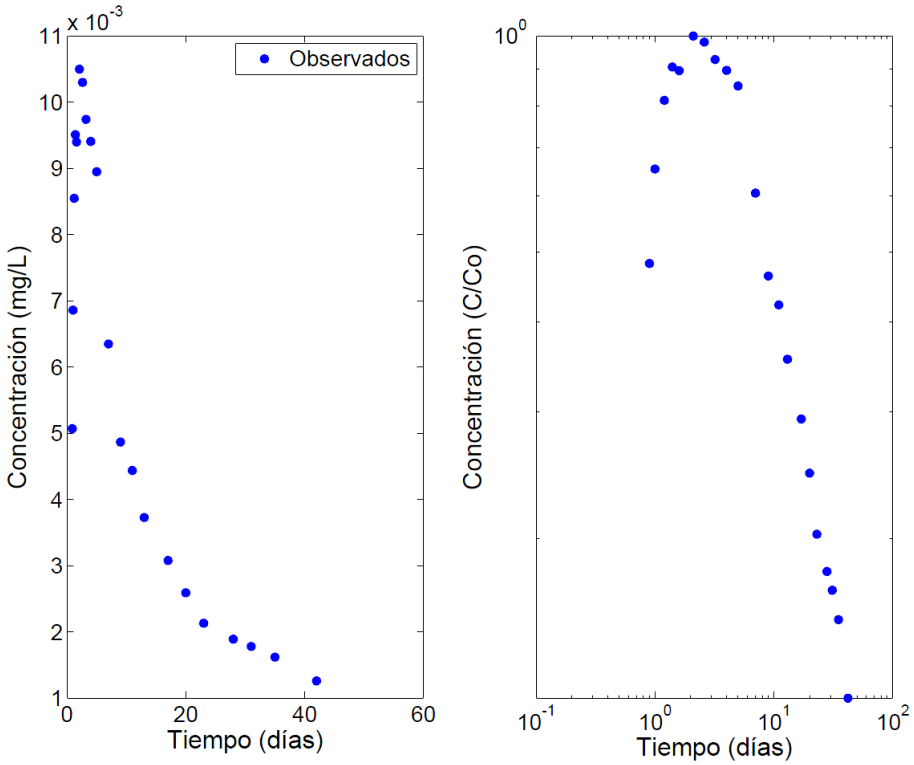

Figura 2-10. Curva de llegada de la Uranina en el pozo S2

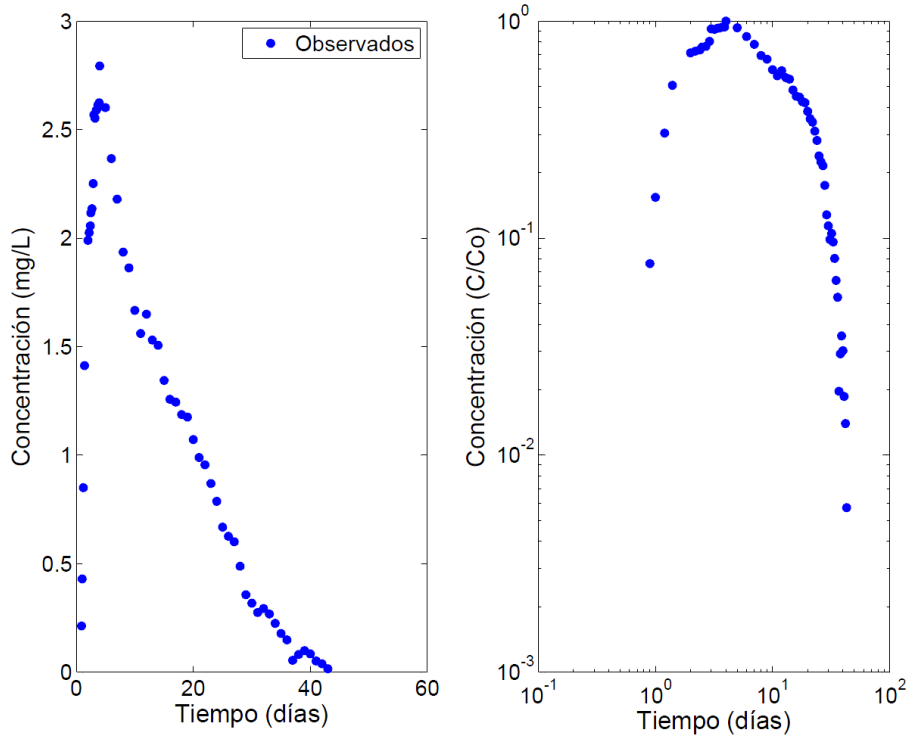

Figura 2-11. Curva de llegada del deuterio en el pozo S2

Con una descripción precisa de la zona de estudio, los datos geométricos de las redes de fracturas discretas y el conocimiento adecuado del ensayo de bombeo y de trazadores. En el siguiente capítulo se describe la parámetrización que utliza TRANSIN IV en los problemas de flujo y transporte, también se describen las condiciones iniciales y de borde para los modelos de flujo y transporte en las redes de fracturas discretas. Finalmente, se presentan los resultados de la calibración para el ensayo de bombeo y trazadores.

3. Optimización – Problema inverso

En este capítulo se describe matemáticamente cómo se realiza la parametrización del modelo numérico TRANSIN IV, proceso importante para definir los parámetros a calibrar en el problema inverso. Después se describen las condiciones iniciales y de borde para los modelos de flujo y transporte en las redes de fracturas discretas. Finalmente, se presentan los resultados de la calibración para el ensayo de bombeo y trazadores.

3.1 Parametrización

El primer paso en modelación es la construcción del modelo conceptual del sistema estudiado. Es decir, la identificación cualitativa de los procesos físicos que en él intervienen. Seguido a esto, se debe realizar una formulación matemática o numérica que describa dichos procesos. En este paso se expresan los parámetros físicos en términos matemáticos que se ajusten al modelo, este proceso se conoce como parametrización [*Medina et al.*, 2004; *Medina et al.*, 1996].

Tradicionalmente, el problema inverso es definido como la estimación de los parámetros del modelo, a partir de mediciones de los datos de salida. Por lo tanto, el problema inverso se puede equiparar a la estimación de parámetros.

Uno de los problemas en la estimación de parámetros del modelo, es que muchas conceptualizaciones diferentes pueden dar lugar a una interpretación similar del modelo. Por otra parte, si la estructura del modelo es correcta, sus parámetros pueden no tener ninguna relación con sus contrapartes físicas [*Yaver*, 2011]. Además, la heterogeneidad natural de los medios fracturados implica una variación espacio – temporal de los parámetros físicos. Minimizar estos problemas y representar la variación paramétrica, es uno de los retos actuales de la hidrogeología.

Existen varios métodos para aproximar la variación de estos parámetros, TRANSIN IV adopta la zonificación como método de aproximación (especialmente porque se puede incluir la información geológica). Básicamente, este método consiste en dividir el dominio en subregiones o zonas [*Carrera et al.*, 2005a]. Cada subregión comprende varios elementos (nodos), en el que cada parámetro físico se supone constante o prescrito y se formula una función de interpolación que tiene predefinida una variación espacio – temporal, aunque también puede ser una constante.

En TRANSIN IV, la parametrización en cada elemento del modelo se expresa así [*Medina et al.*, 2004]:

$$p(x,t) = \sum_{j=1}^{n} p_j f_j(x,t), \tag{3.1}$$

donde: p_j son escalares conocidos como parámetros del modelo y $f_j(x,t)$ son funciones de interpolación.

Para optimizar la solución del problema inverso y aplicar la zonificación, se considera que los valores de parámetros en cada elemento son resultado del producto de dos (2) valores: (a) un número específico, basado en la geometría y consideraciones de conectividad, y (b) un factor de escala (parámetro de familia) que es el mismo para todos los elementos asociados a una determinada familia. Y, si se considera independiente la variación temporal y la variación espacial de los parámetros, se agrega un término temporal [*Medina et al.*, 2004].

Entonces la ecuación (3.1) quedará expresada como un producto de una función espacial y una función temporal:

$$p(x,t) = CF(N) \cdot G(I) \cdot FT(t) \qquad X \in Zona\ I, \tag{3.2}$$

donde: x pertenece al elemento N, que a su vez está contenido en la zona I y $FT(t)$ representa un valor de función de tiempo en el tiempo *t*.

Debido a que la definición de $CF(N)$ para cada elemento y para cada tipo de parámetro puede ser tediosa (gran número de elementos en cada red), la incógnita en el problema inverso es el parámetro de familia $G(I)$. Es decir, estos últimos son los que se calibran.

De acuerdo a la prospección geológica y a la generación de las redes de fracturas, se decidió implementar 5 zonas, siendo congruentes con las familias de fracturas

encontradas en el macizo. En términos de la malla numérica, cada zona es un conjunto de elementos 1D y nodos. Es decir, que para resolver el problema inverso en flujo y transporte, los parámetros que dependan del medio (conductividad hidráulica, coeficiente de almacenamiento y porosidad) se estimaron para cada familia, mientras que para los parámetros que dependen del fluido o del soluto solo se estimó uno para todo el sistema (dispersividad longitudinal, coeficiente de difusión y difusión en la matriz).

La estimación de los parámetros de flujo y de transporte se realizó por separado. Primero se interpretó ensayo de bombeo y se obtuvieron los parámetros hidráulicos. Posteriormente, se analizó el ensayo de trazadores con los parámetros obtenidos anteriormente y se obtuvieron los parámetros de transporte para cada soluto inyectado.

Se solucionó el problema inverso con la implementación de tres algoritmos de calibración automática: i) Algoritmo de máxima verosimilitud (Método de levenberg Marquardt [*Alcolea et al.*, 2000; *Medina et al.*, 2004], ii) *Suffled Complex Evolution – University of Arizona* (SCE-UA) [*Duan et al.*, 1993], y. iii) Estimación generalizada de incertidumbre por verosimilitud GLUE (por sus siglas en inglés) [*Beven y Binley*, 1992].

3.2 Simulación de flujo

Los parámetros de flujo asociados a cada elemento y a cada familia en una malla de canales 1-D, son: la conductividad hidráulica y el coeficiente de almacenamiento para flujo saturado. Es decir, que el número de parámetros estimados para cada red de fracturas fue 10 (los dos parámetros de flujo para cada familia). La estimación de dichos parámetros, se realizó a través de la interpretación del ensayo de bombeo descrito en la sección 2.4.1.

Cuando se analiza un ensayo de bombeo, se debe garantizar que las condiciones de frontera impuestas en el modelo numérico no afecten la zona influenciada por el bombeo (por ejemplo, abatimiento nulo en todas las fronteras). Debido a esto, para la definición del dominio se usa una geometría externa (cubo) que contenga toda la red de fracturas. En la Figura 3-1, se presentan las condiciones de frontera aplicadas al cubo en el problema de flujo.

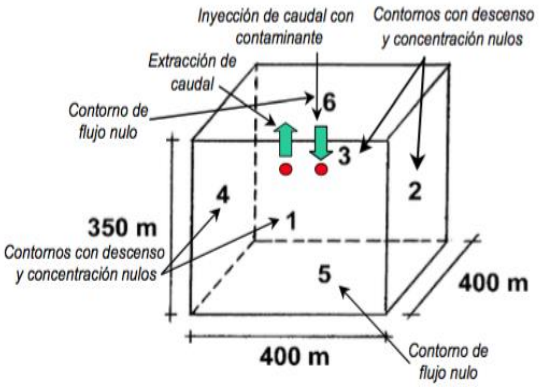

Figura 3-1. Condiciones de contorno empleadas para la interpretación numérica del ensayo de bombeo entre los tramos de sondeo S2 (de extracción) y S13 (de inyección) [*Ruiz*, 2002]

Puesto que en elementos finitos las condiciones de borde o de frontera se asignan a los nodos y los parámetros se asignan a los elementos o a las familias, a los nodos que intersectan las caras de arriba y de abajo del cubo (dominio), se les asignó una condición de flujo nulo; mientras que a los nodos que intersectan las caras laterales, se les asignó una condición de nivel fijo con descenso nulo [*Ruiz*, 2002; *Vives et al.*, 2004]. Además, en los nodos donde se encuentran los tramos de los sondeos S2 y S13, se les asignó el valor del caudal de extracción e inyección respectivamente.

Se simuló el flujo en el macizo durante los 9 días que duró el ensayo de bombeo y se obtuvieron los datos de niveles piezométricos en los 4 tramos obturados de los pozos donde se tenían registros de campo, esto con el fin de comparar los datos simulados con los medidos utilizando una función objetivo. Después, se calibraron los parámetros de flujo a través de los diferentes algoritmos de optimización, y así se obtuvo, el campo de velocidades con el cual se moverán los trazadores en el macizo cuando se analice el transporte [*Guimerá et al.*, 1996].

3.2.1 Resultados

Ante la dificultad de calibrar los parámetros de flujo en la redes de fracturas discretas, se optó por realizar una metodología de calibración en serie, combinando los algoritmos de optimización. Primero, se optimizó cada red con el Algoritmo de máxima verosimilitud (Método de Levenberg-Marquardt) y el SCE-UA (obteniendo los valores semilla de los resultados de trabajos anteriores), los cuales arrojan un conjunto único de parámetros óptimos. Seguido a esto, se compararon los resultados de cada algoritmo y se definió un intervalo de búsqueda en cada parámetro, para finalmente implementar la metodología GLUE y realizar un análisis de sensibilidad.

De las 77 redes a las cuales *Pardo* [2012] aplicó con éxito la teorìa de la percolación, solo 36 obtuvieron resultados aceptables en términos del valor mínimo de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). En la Figura 3-2 se presentan el mejor ajuste obtenido con la red 10, donde se observan las gráficas del abatimiento para el pozo de bombeo y los 3 pozos de observación.

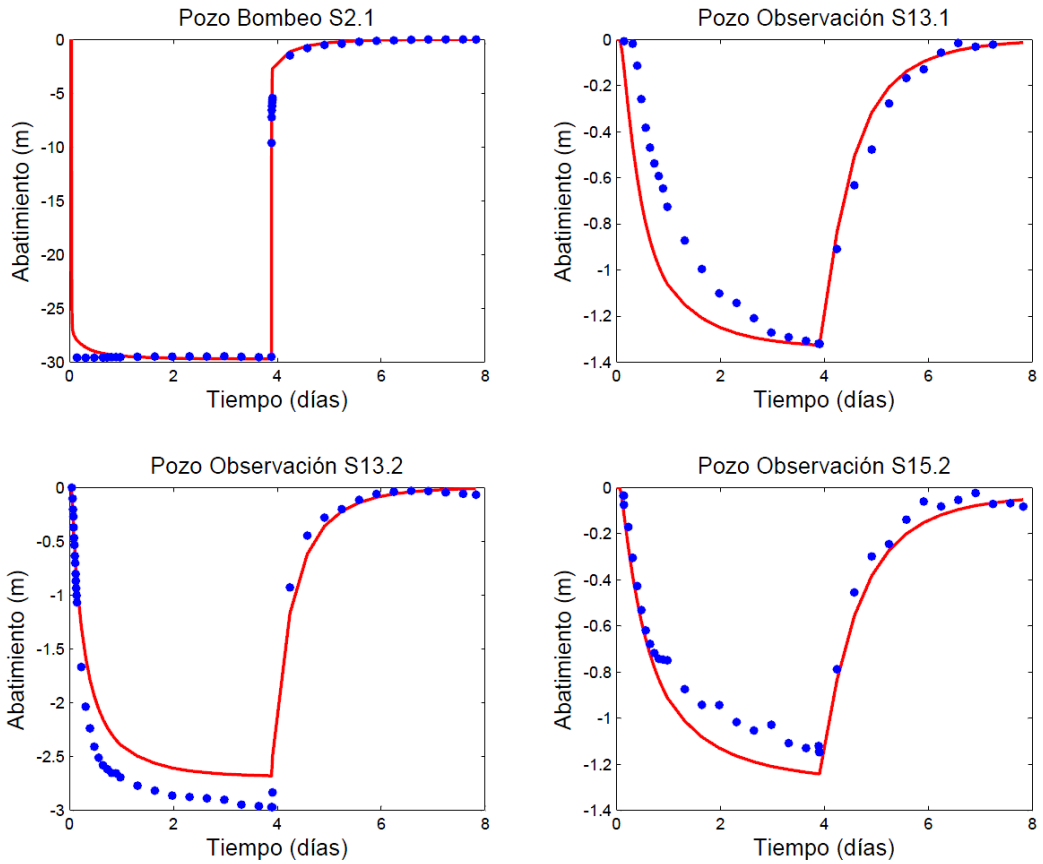

Figura 3-2. Ajuste de la red 10 – Gráfica de abatimiento en el pozo de bombeo y los pozos de observación

En la Tabla 3-1, se presentan los valores de los parámetros de flujo óptimos de la red 10 para cada algoritmo de optimización (siendo la de GLUE, la mejor corrida de las 10 que arroja), y en la Tabla 3-2 se observa el valor de las funciones objetivo para las mejores corridas en cada algoritmo.

	K_1 (m/d)	K_2 (m/d)	K_3 (m/d)	K_4 (m/d)	K_5 (m/d)	Ss_1	Ss_2	Ss_3	Ss_4	Ss_5
Marquat	8.99E+00	2.65E-01	6.98E-02	1.00E+00	2.08E-03	1.43E-07	1.49E-07	1.34E-08	4.30E-09	7.69E-09
SCE	9.07E+00	2.94E-01	6.47E-02	9.82E-01	3.50E-03	4.00E-07	3.01E-07	1.14E-08	2.45E-09	6.59E-09
GLUE	9.91E+00	2.84E-01	6.23E-02	9.56E-01	8.02E-03	1.15E-07	3.18E-07	1.16E-08	4.08E-09	6.97E-09

Tabla 3-1. Parámetros de flujo óptimos para la red 10, para cada algoritmo de optimización implementado

	Nash E	J_h
Marquat	0.03737	0.536
SCE	0.045	0.812
GLUE	0.0674	1.12

Tabla 3-2. Valor de función objetivo para la red 10, para cada algoritmo de optimización implementado

Observando el diagrama de dispersión o de puntos (Figura 3-3), arrojado por la metodología GLUE (utiliza MCAT), se puede concluir que el parámetro más sensible e identificable para el modelo es la conductividad hidráulica de las fracturas que pertenecen a la familia 3.

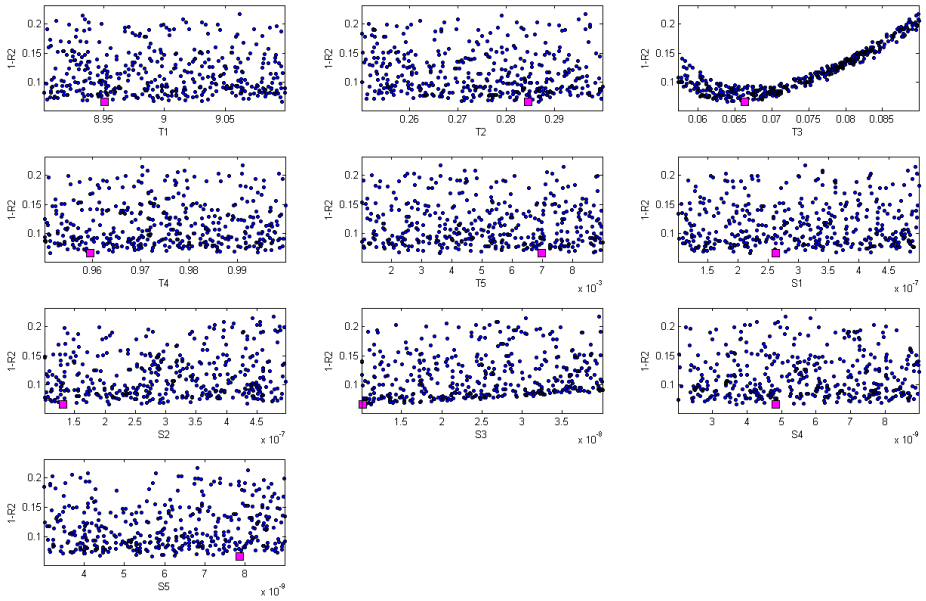

Figura 3-3. Diagrama de dispersión para los parámetros de flujo de la red 10 utilizando la metodología GLUE

Esto se confirma con el análisis de sensibilidad que evalúa el comportamiento de los parámetros de flujo en la red 10, en la Figura 3-4 a) se presenta el gráfico de la distribución de probabilidad acumulada (basado en la función objetivo), el gradiente más alto se encuentra en la barra más oscura, el cual representa el valor de ese parámetro en la mejor corrida. Y, en la Figura 3-4 b) se presenta el gráfico de sensibilidad regional, donde las curvas de color magenta corresponden al grupo con mejor (H) Función Objetivo y la de color cian los peores (L) valores de la Función Objetivo. En ambas gráficas se puede concluir que el parámetro con mayor grado de identificabilidad y más sensible, es la conductividad hidráulica de las fracturas de la familia 3.

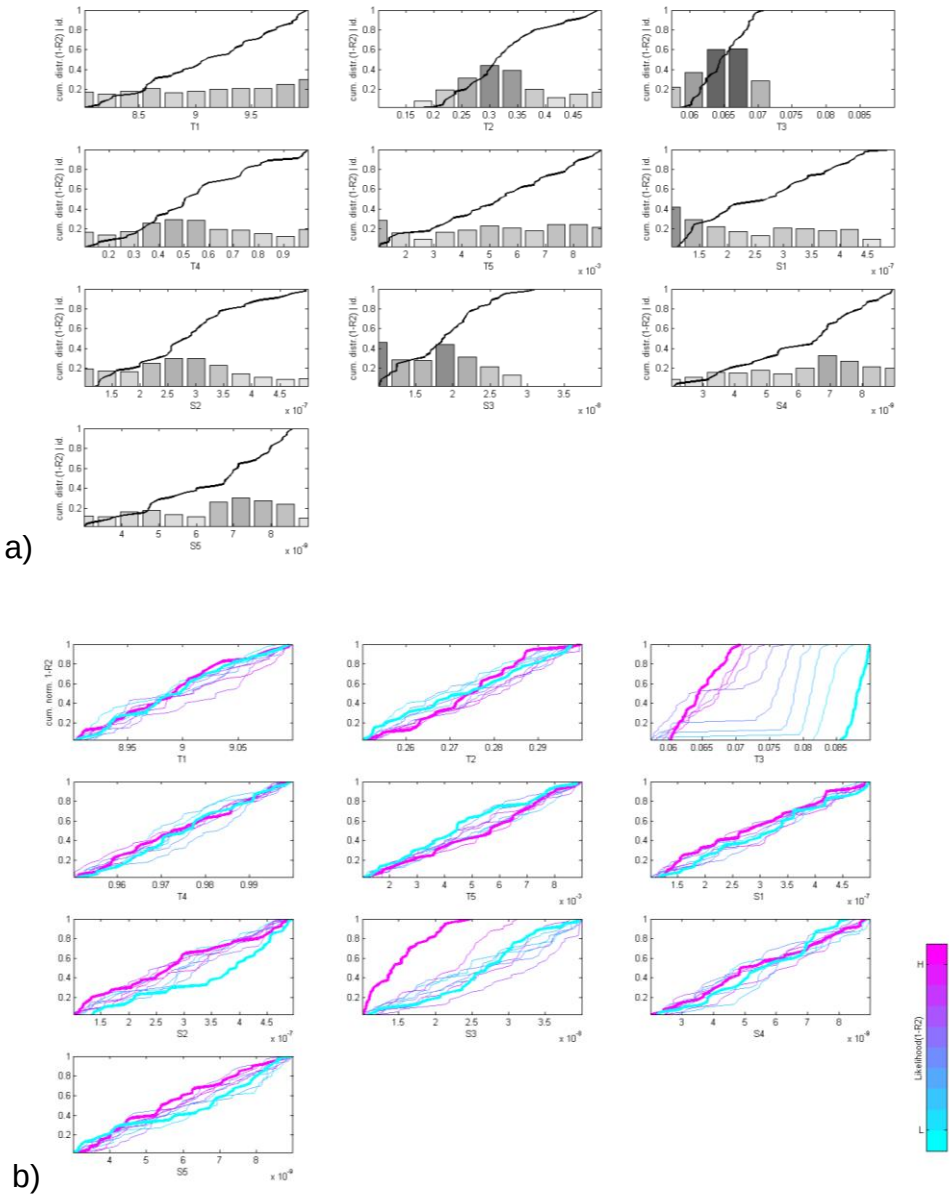

Figura 3-4. ***a)*** **Gráfico de distribución de probabilidad acumulada para los parámetros de flujo en la red 10.** ***b)*** **Análisis de sensibilidad regional para los parámetros de flujo en la red 10**

Sin embargo, no todas las redes presentaron una mejoría en la calibración; en la Figura 3-5, se puede observar el mejor ajuste obtenido en la red 17 (gráficas del abatimiento para el pozo de bombeo y los 3 pozos de observación), el cual con claridad no es bueno. Aunque, al realizar el análisis de sensibilidad, el diagrama de dispersión muestra que el parámetro de flujo más sensible es la conductividad hidráulica de la familia 5. Lo que demuestra que las familias de fracturas dominantes en el flujo son diferentes para cada red, esto debido a que su generación no fue condicionada.

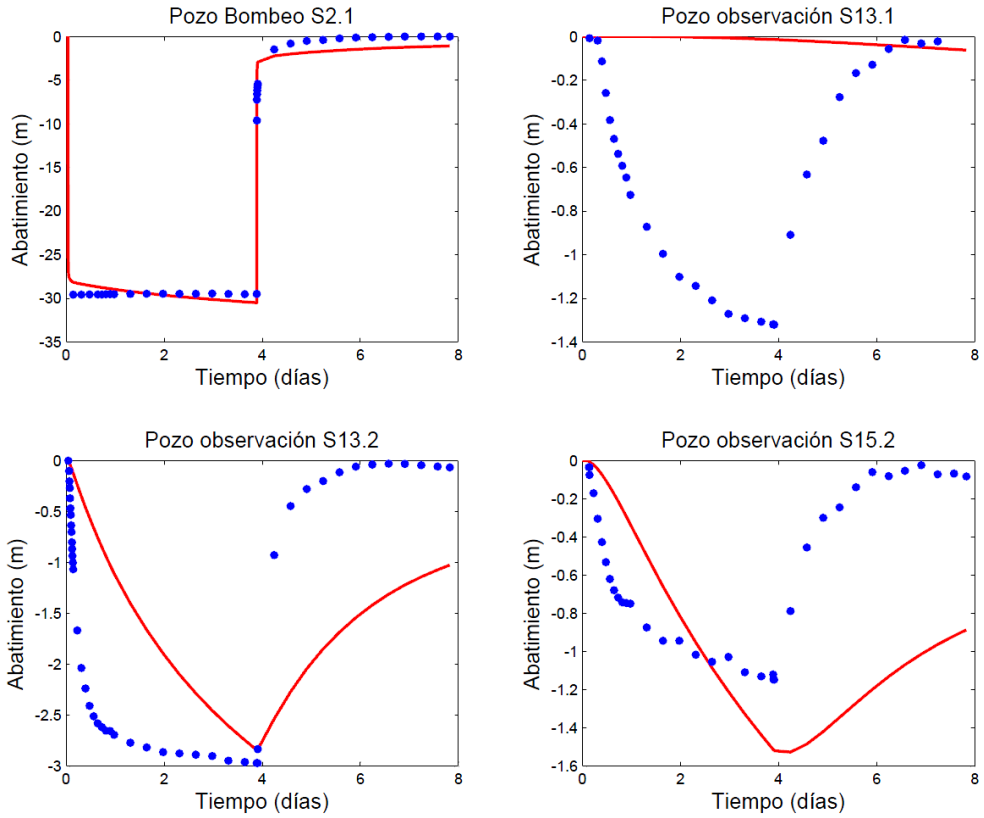

Figura 3-5. Ajuste de la red 17 – Gráfica de abatimiento en el pozo de bombeo y los pozos de observación

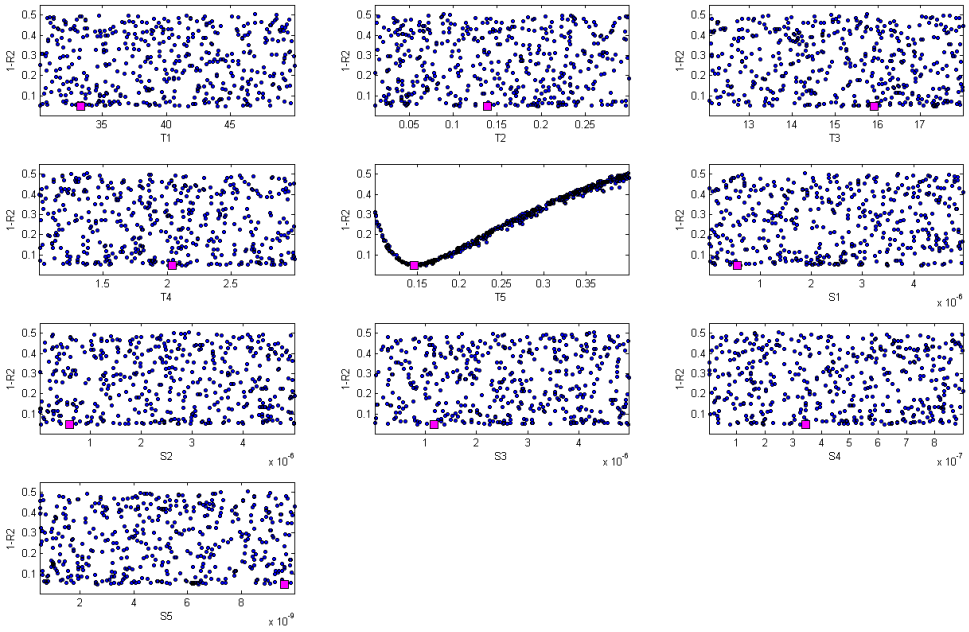

Figura 3-6. Diagrama de dispersión para los parámetros de flujo de la red 17 utilizando la metodología GLUE

- **Análisis estadístico**

Con los parámetros hidráulicos obtenidos después de la calibración de las redes, con la metodología anteriormente descrita: conductividad hidráulica (K) y el coeficiente de almacenamiento específico (Ss) para cada familia de fracturas independientes (5 para cada red); se calculó la distribución de los parámetros de la conductividad hidráulica y el almacenamiento de cada red analizada, así como para las 5 familias de fracturas independientes.

En la Tabla 3-3, se presentan los estadísticos principales de la conductividad hidráulica estimada en todas las redes para cada familia de fracturas.

	K_{total}	K_1 (m/d)	K_2 (m/d)	K_3 (m/d)	K_4 (m/d)	K_5 (m/d)
$K_{promedio}$	3.68E+00	5.19E+00	3.55E+00	5.43E+00	5.37E-01	2.70E+00
$K_{varianza}$	8.27E+01	1.13E+02	1.30E+02	9.97E+01	3.38E-01	4.31E+01
$K_{mínimo}$	6.63E-05	2.14E-03	6.63E-05	2.22E-03	0.00E+00	1.29E-04
$K_{máximo}$	6.25E+01	4.96E+01	6.25E+01	4.16E+01	2.18E+00	3.35E+01

Tabla 3-3. Estadísticos de la conductividad hidráulica estimada para cada familia de fracturas

Se puede concluir, que la variación de la conductividad hidráulica en cada familia de fracturas es de aproximadamente 5 o 6 órdenes de magnitud. En la Figura 3-7 se presenta el histograma de conductividad hidráulica, donde se puede apreciar con más claridad está variación y se observa que la mayoría de los valores son mayores a $1\ m/d$. De donde se deduce, que la mayor parte de las fracturas son altamente conductivas y el flujo estaría más influenciado por la conectividad de la red de fracturas.

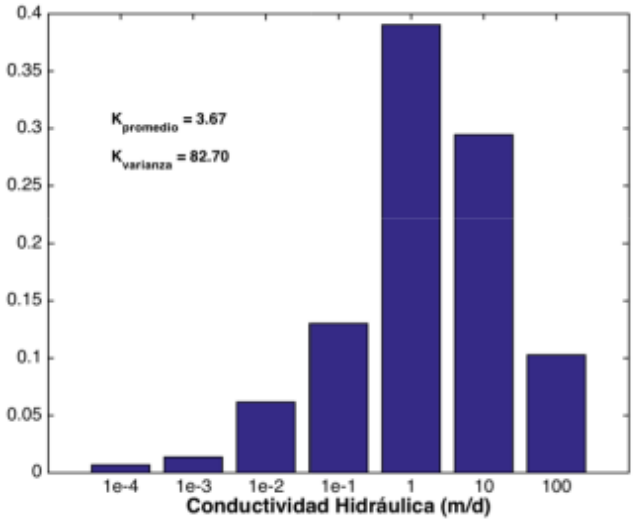

Figura 3-7. Histograma de Conductividad hidráulica estimada para todas las familias de fracturas

En la Figura 3-8 se presenta el diagrama de cajas de la conductividad hidráulica de todas las familias, donde se confirma la gran variación de este parámetro en cada familia en las diferentes redes. Sin embargo, se puede observar que la conductividad media para cada familia es aproximadamente la misma o por lo menos del mismo orden de magnitud.

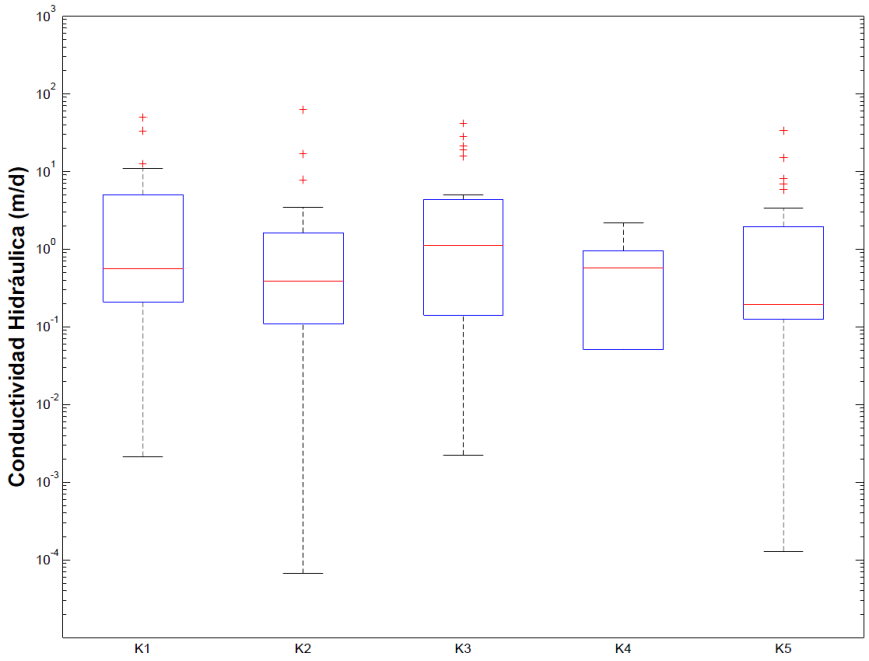

Figura 3-8. Diagrama de cajas de la Conductividad hidráulica estimada para todas las familias de fracturas

En la Tabla 3-4, se presentan los estadísticos principales del coeficiente de almacenamiento en todas las redes para cada familia de fracturas.

	Ss_{total}	Ss_1	Ss_2	Ss_3	Ss_4	Ss_5
$Ss_{promedio}$	1.32E-07	1.23E-07	1.62E-07	1.12E-07	1.77E-02	1.89E-07
$Ss_{varianza}$	1.63E-13	5.87E-14	1.74E-13	6.00E-14	7.57E-03	4.76E-13
$Ss_{mínimo}$	5.76E-12	2.14E-11	1.91E-11	5.76E-12	1.34E-09	1.01E-10
$Ss_{máximo}$	3.71E-06	1.00E-06	2.22E-06	1.17E-06	4.85E-01	3.71E-06

Tabla 3-4. Estadísticos del coeficiente de almacenamiento estimado para cada familia de fracturas

Se puede concluir, que la variación del coeficiente de almacenamiento en cada familia de fracturas es de aproximadamente 5 o 6 órdenes de magnitud. En la Figura 3-9 se presenta el histograma del coeficiente de almacenamiento, donde se puede apreciar con más claridad está variación y se observa que la mayoría de los valores son superiores a 1e-8.

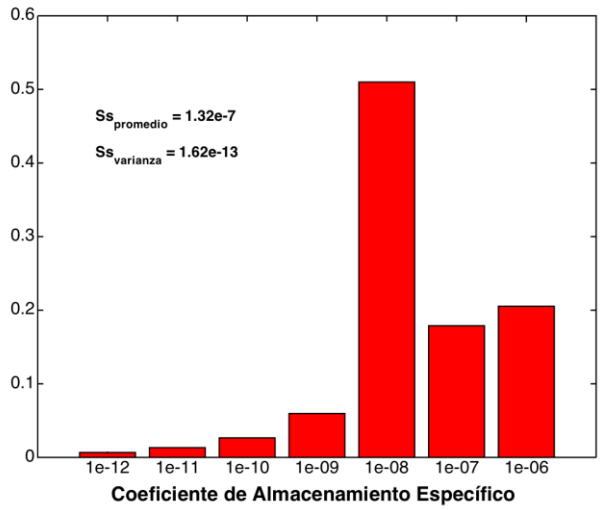

Figura 3-9. Histograma del coeficiente de almacenamiento estimado para todas las familias de fracturas

En la Figura 3-10 se presenta el diagrama de cajas del coeficiente de almacenamiento de todas las familias, donde se confirma la gran variación de este parámetro en cada familia en las diferentes redes. Sin embargo, se puede observar que el coeficiente de almacenamiento medio para cada familia, es aproximadamente el mismo o por lo menos del mismo orden de magnitud. Este valor es muy pequeño y se concluye que las fracturas del granito batolítico El Berrocal son muy conductivas, pero tienen muy poca capacidad de almacenamiento.

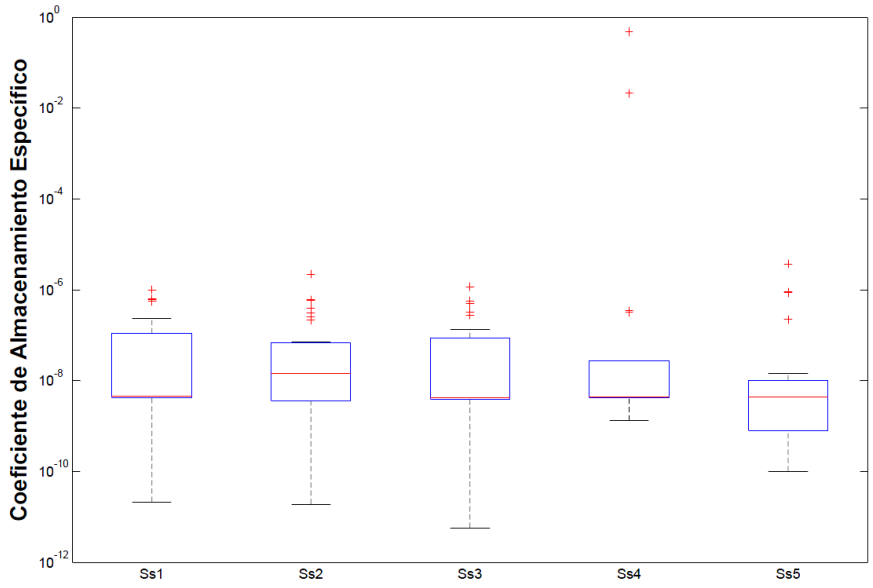

Figura 3-10. Diagrama de cajas del coeficiente de almacenamiento estimado para todas las familias de fracturas

Finalmente, en la Figura 3-11 se presenta la evolución y la comparación de la prueba de bombeo en la red 10, a través de los trabajos anteriores. Se puede concluir, que la calibración mejoró con las redes percoladas y la implementación de la metodología de calibración.

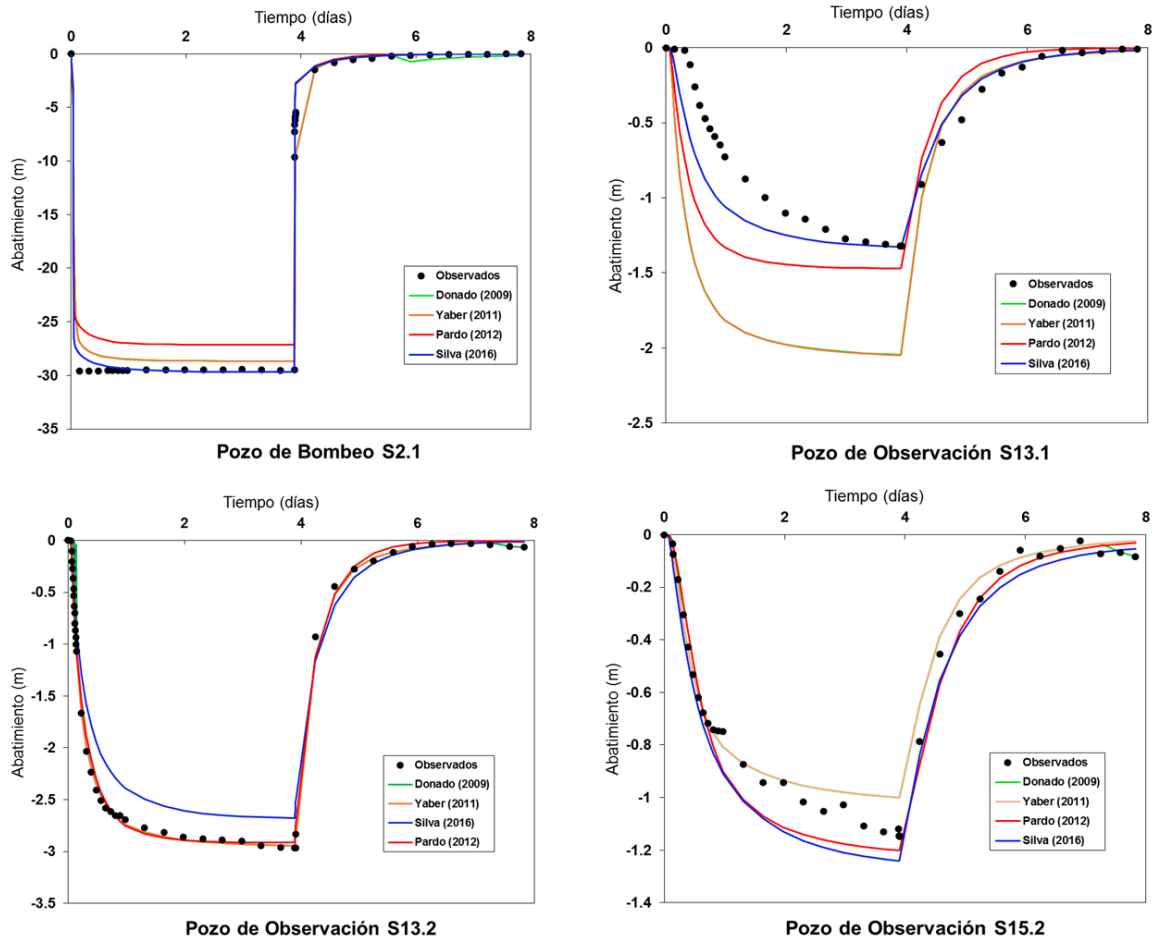

Figura 3-11. Diferentes ajustes de trabajos anteriores para la prueba de bombeo en la red 10.

3.3 Simulación de transporte

Para resolver el problema inverso de transporte, primero se simuló el flujo en régimen estacionario con los caudales utilizados en el ensayo (bombeo y extracción), para generar el campo de velocidades en el cual fueron inyectados los trazadores. Posteriormente, se analizó el problema de transporte en régimen transitorio con la implementación de un modelo de doble porosidad, involucrando los procesos de transporte de advección, dispersión y difusión en la matriz dependiendo del trazador (ADE +MD).

Los parámetros asociados al transporte de solutos en cada red de fracturas, son: la dispersividad longitudinal (como es un elemento 1D, conceptualmente no existe dispersividad transversal), porosidad (una para cada familia y una para la zona inmóvil o matriz rocosa) y el coeficiente de difusión (para la zona móvil o fracturas y otro para la inmóvil o matriz rocosa). Es decir, que el número de parámetros calibrados en cada de red de fracturas es 10.

Para el análisis numérico del ensayo de trazadores, se debe garantizar que las condiciones de frontera no afecten la zona influenciada por el bombeo y la inyección del trazador (por ejemplo, abatimiento nulo y concentración nula en todas las fronteras). Con base en lo anterior para definir el dominio de modelación, también se utilizó una geometría externa (Cubo) que contenía toda la red de fracturas. En la Figura 3-12, se presentan las condiciones de frontera aplicadas al cubo en el problema de flujo estacionario y transporte.

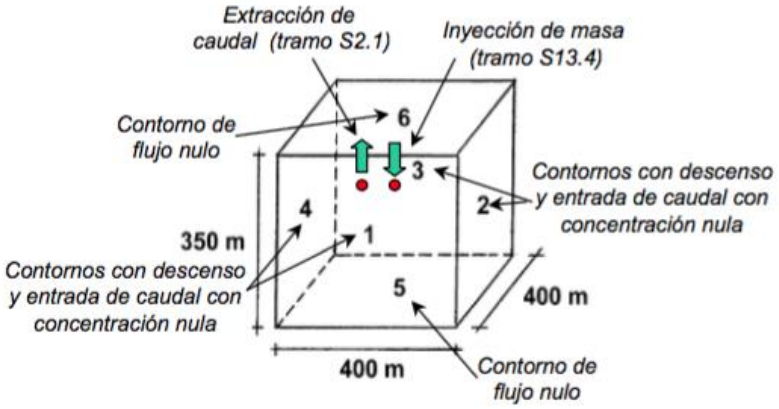

Figura 3-12. Condiciones de contorno empleadas para la interpretación numérica del ensayo de trazadores entre los tramos de sondeo S2.1 (de extracción) y S13.4 (de inyección) [*Ruiz*, 2002]

Los nodos que intersectan las caras de arriba y de abajo del cubo (dominio), se les asignó una condición de flujo nulo; mientras que a los nodos que intersectan las caras laterales, se les asignó una condición de nivel fijo con descenso nulo y una concentración nula [*Ruiz*, 2002]. Además, en los nodos donde se encuentran los tramos de los sondeos S2 y S13, se les asignó el valor del caudal de extracción e inyección respectivamente.

Como primera medida se simuló el flujo en estado estacionario (con los parámetros de flujo calibrados anteriormente), con el fin de obtener el campo de velocidades del macizo. Posteriormente, se simuló el transporte de solutos en el macizo durante los 9 días que duró el ensayo de trazadores y se obtuvieron los datos de concentraciones en el tramo obturado del pozo S13.4, donde se tenían registros de

campo, esto con el fin de comparar los datos simulados con los medidos utilizando una función objetivo. Así, se realizó la calibración de los parámetros de transporte a través de los diferentes algoritmos de optimización.

Según la forma de las curvas de llegada de los trazadores que se presentan Figura 2-10 (Uranina) y la Figura 2-11 (Deuterio), se deduce que los dos solutos se pueden considerar conservativos, pero presentan un comportamiento diferente, a pesar de ser inyectados simultáneamente y en el mismo medio.

Para el análisis de la curva de llegada del deuterio y la calibración de los parámetros se aplicó el modelo de transporte clásico advección-dispersión (ADE), mientras que para la Uranina que presenta una cola más marcada, se utilizó el modelo de transporte advección-dispersión incluyendo difusión en la matriz (ADE+MD), donde el dominio de modelación se trata como la superposición de dos medios. El primero de ellos, una zona móvil o de flujo, que representa las fracturas (por donde fluye el agua) y los mecanismos de transporte que se dan en esta zona incluyen advección, dispersión y reacciones químicas. El segundo medio, es la zona inmóvil que representa la matriz rocosa donde el flujo de agua es despreciable, y como consecuencia, no hay advección y la dispersión se reduce a la difusión molecular [*Carrera et al.*, 1998].

3.3.1 Resultados

Como en el problema de flujo, se optó por realizar una metodología de calibración en serie, combinando los algoritmos de optimización. Primero, se optimizó cada red con el Algoritmo de máxima verosimilitud (Método de Levenberg-Marquardt) y el SCE-UA (obteniendo los valores semilla de los resultados de trabajos anteriores), los cuales arrojan un conjunto único de parámetros óptimos. Seguido a esto, se compararon los resultados de cada algoritmo y se definió un intervalo de búsqueda en cada parámetro, para finalmente implementar la metodología GLUE y realizar un análisis de sensibilidad.

Sin embargo, al calibrar los parámetros de transporte para las 36 redes de fracturas percoladas donde se obtuvieron resultados aceptables en flujo, ninguna red presentó resultados satisfactorios en términos del valor de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). En la Figura 3-13 y en la Figura 3-14, se presentan los ajustes de la curva de llegada de Uranina para la red 10 (mejor calibración en flujo), teniendo cada uno valores extremos de los parámetros de transporte. En ningún escenario llegó todo el trazador, esto puede ser resultado del no cumplimiento del criterio de Pléclét debido a elementos muy largos o debido a la baja conectividad de la red de

fracturas, es posible que la densidad de fracturas de la red esté por debajo del umbral de percolación.

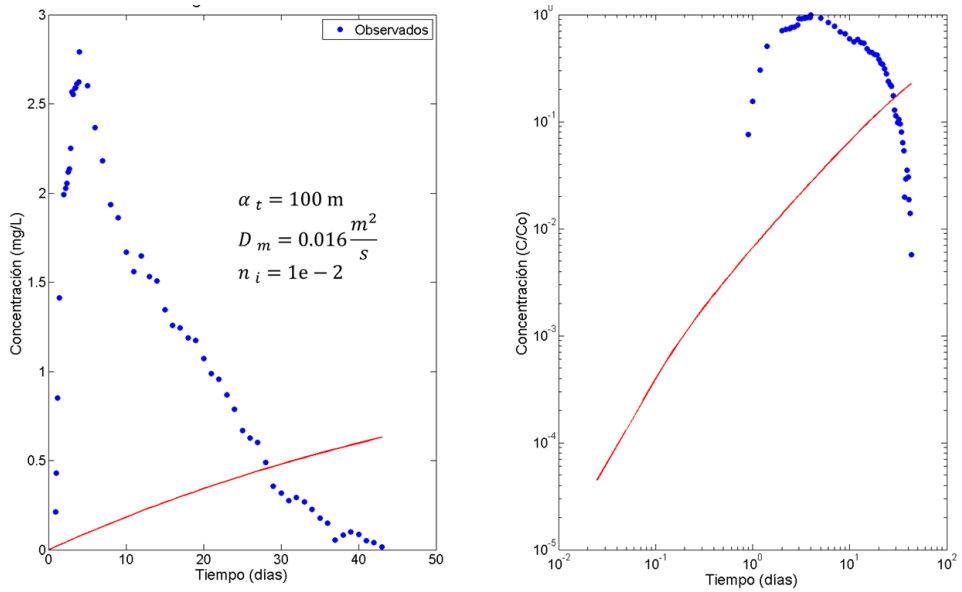

Figura 3-13. Ajuste de la curva de llegada de Uranina en la red 10, valores extremos I

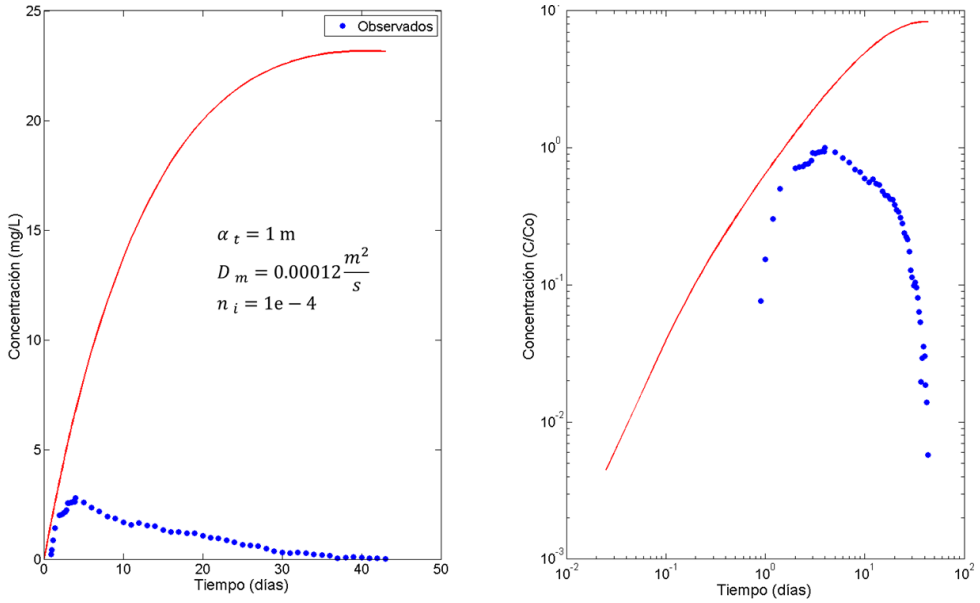

Figura 3-14. Ajuste de la curva de llegada de Uranina en la red 10, valores extremos II

Debido a los malos resultados obtenidos con la calibración de los parámetros de transporte en las redes percoladas, se decidió implementar la metodología de calibración a las 6 redes sin percolar utilizadas por *Donado* [2009] para los dos trazadores (Deuterio y Uranina), en las cuales se obtuvó resultados satisfactorios.

- **Deuterio**

De las 6 redes utilizadas por *Donado* [2009] en la calibración de los parámetros de transporte, solo 5 obtuvieron resultados aceptables en términos del valor mínimo de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). La Tabla 3-5, presenta el resumen de los parámetros de transporte obtenidos para las 5 redes calibradas con la curva de llegada del Deuterio.

RED	Coeficiente de Dispersión Longitudinal (m)	Difusión Molecular (m^2/d)		Porosidad					
		Fracturas	Matriz	1	2	3	4	5	Matriz
10	88.800	2.83E-02	9.03E-07	2.66E-03	3.89E-12	3.95E-04	3.06E-14	3.05E-04	3.50E-04
04	81.565	1.67E-03	2.97E-05	1.22E-03	2.24E-09	4.15E-09	1.01E-12	3.56E-09	1.03E-04
17	70.000	1.00E-01	1.00E-05	1.32E-03	4.55E-04	4.12E-03	5.15E-02	6.27E-06	7.07E-04
02	75.114	9.15E-03	8.08E-04	2.90E-02	5.07E-06	7.66E-03	9.02E-06	2.43E-06	1.01E-02
08	81.408	1.00E-01	1.00E-05	2.11E-09	3.42E-04	1.12E-09	9.97E-12	3.99E-09	9.33E-04

Tabla 3-5. Parámetros de transporte óptimos para cada red - Deuterio

En la Figura 3-15 se presentan el mejor ajuste de la curva de llegada del Deuterio obtenido con la red 10, en ella se puede observar que se ajustó muy bien la cola de la curva, pero no se logró obtener la concentración máxima.

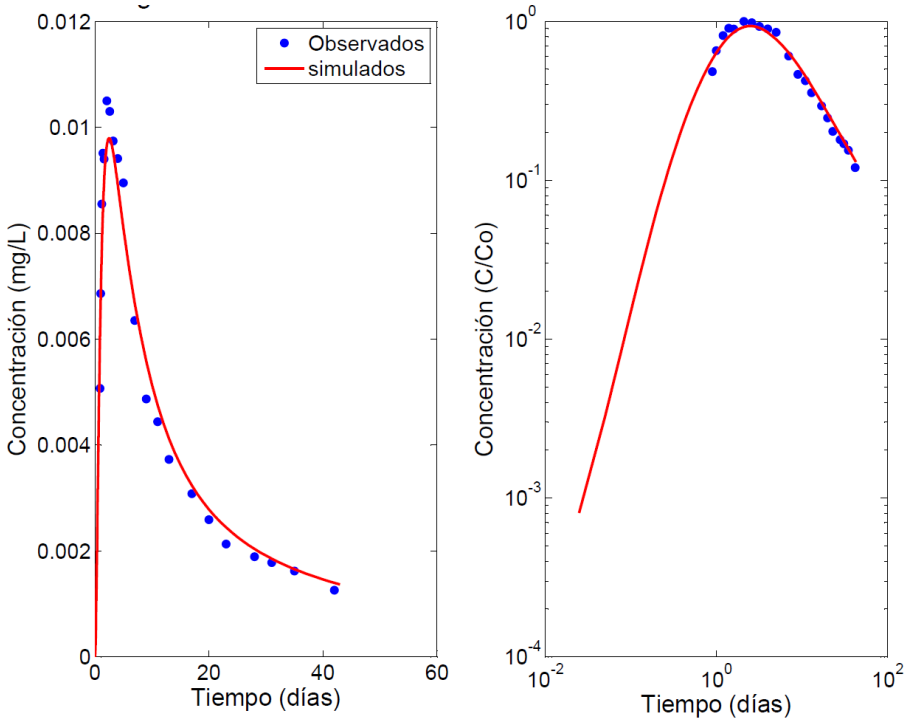

Figura 3-15. Ajuste de la curva de llegada del Deuterio en la red 10

Observando el diagrama de dispersión o de puntos (Figura 3-16), arrojado por la metodología GLUE (utiliza MCAT), se puede concluir que el parámetro más sensible e identificable para el modelo, es la porosidad de las fracturas que pertenecen a la familia 1.

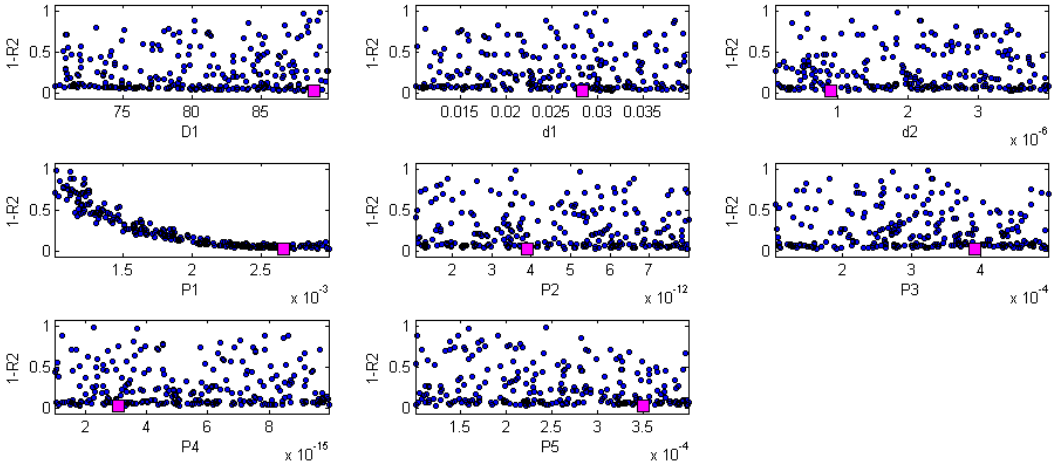

Figura 3-16. Diagrama de dispersión para los parámetros de transporte de la red 10 utilizando la metodología GLUE - Deuterio

Esto se confirma con el análisis de sensibilidad, que evalúa el comportamiento de los parámetros de transporte en la red 10. En la Figura 3-17 a) se presenta el gráfico de la distribución de probabilidad acumulada (basado en la función objetivo), el gradiente más alto se encuentra en la barra más oscura y representa el valor de ese parámetro en la mejor corrida. Y, la Figura 3-17 b) presenta el gráfico de sensibilidad regional, donde las curvas de color magenta corresponden al grupo con mejor (H) Función Objetivo y la de color cian los peores (L) valores de la Función Objetivo. En ambas gráficas se puede concluir que el parámetro con mayor grado de identificabilidad y más sensible, es la porosidad de las fracturas de la familia 1.

Sin embargo, al analizar los resultados de las otras 5 redes, se encontró que el parámetro de transporte más sensible e identificable en todas las redes para el Deuterio, es la porosidad de alguna de las familias de fracturas. Para cada red, la familia que controla los procesos de transporte (cuenta con el parámetro más sensible) es diferente, debido a que la generación de las redes de fracturas discretas, no fue condicionada.

No se realizó análisis estadístico debido a la poca cantidad de redes que se ajustaron a la curva de llegada de este trazador; sin embargo, los valores de los parámetros de transporte para cada red son similares, con excepción de la

porosidad que tiene variaciones de hasta 5 o 6 órdenes de magnitud en cada familia y por supuesto de red a red (Tabla 3-5).

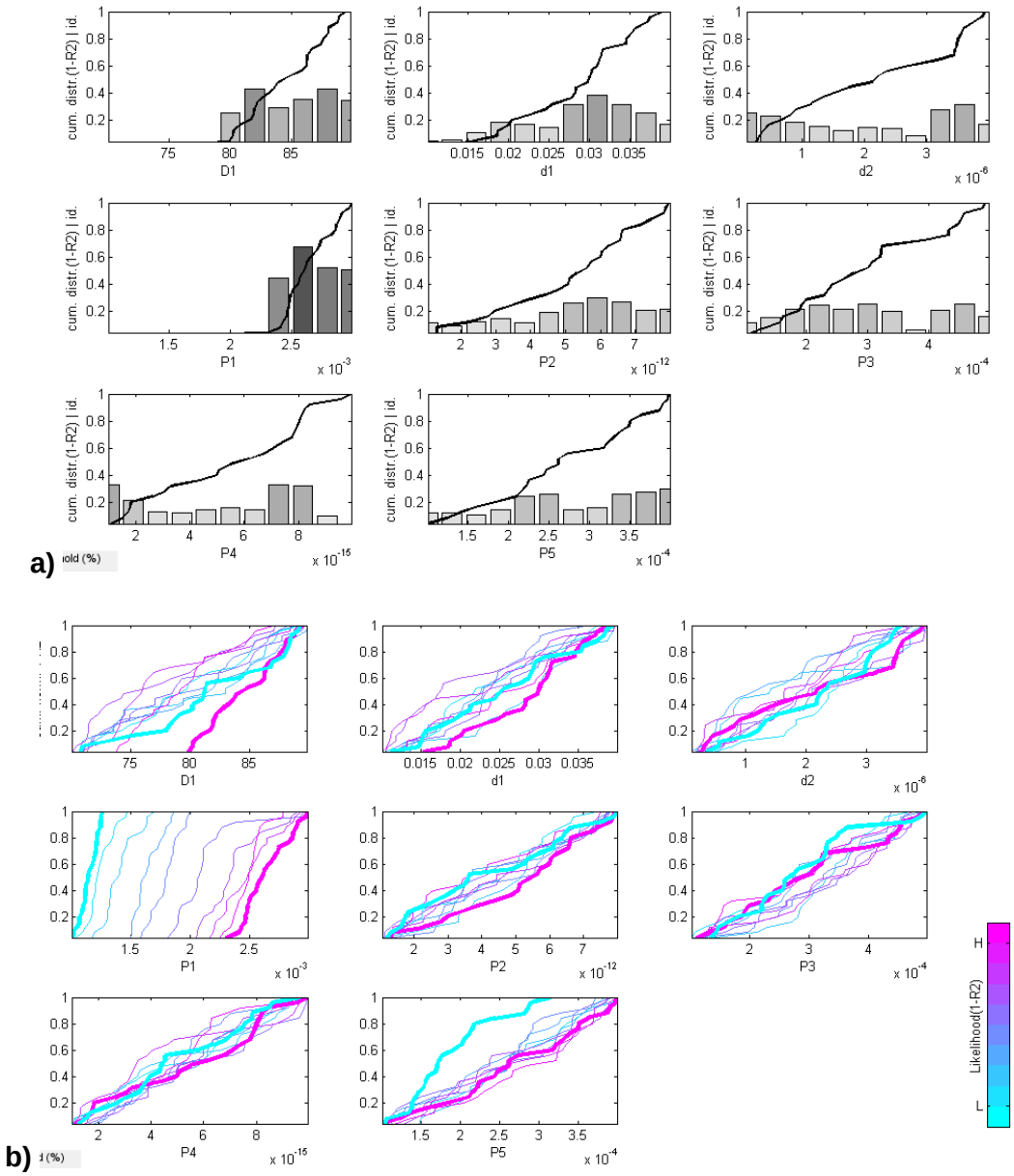

Figura 3-17. ***a)*** **Gráfico de distribución de probabilidad acumulada para los parámetros de transporte en la red 10.** ***b)*** **Análisis de sensibilidad regional para los parámetros de transporte en la red 10 - Deuterio**

Finalmente, en la Figura 3-18 se presenta la evolución y la comparación de la curva de llegada del Deuterio en la red 10 y la red 02, a través de los trabajos anteriores. Se puede concluir que la calibración mejoró con el ajuste de las colas de las curvas, es decir, se modeló con éxito el proceso de difusión en la matriz con la

implementación de la metodología de calibración. Sin embargo, en ningún caso se logró ajustar el pico de concentración en las curvas.

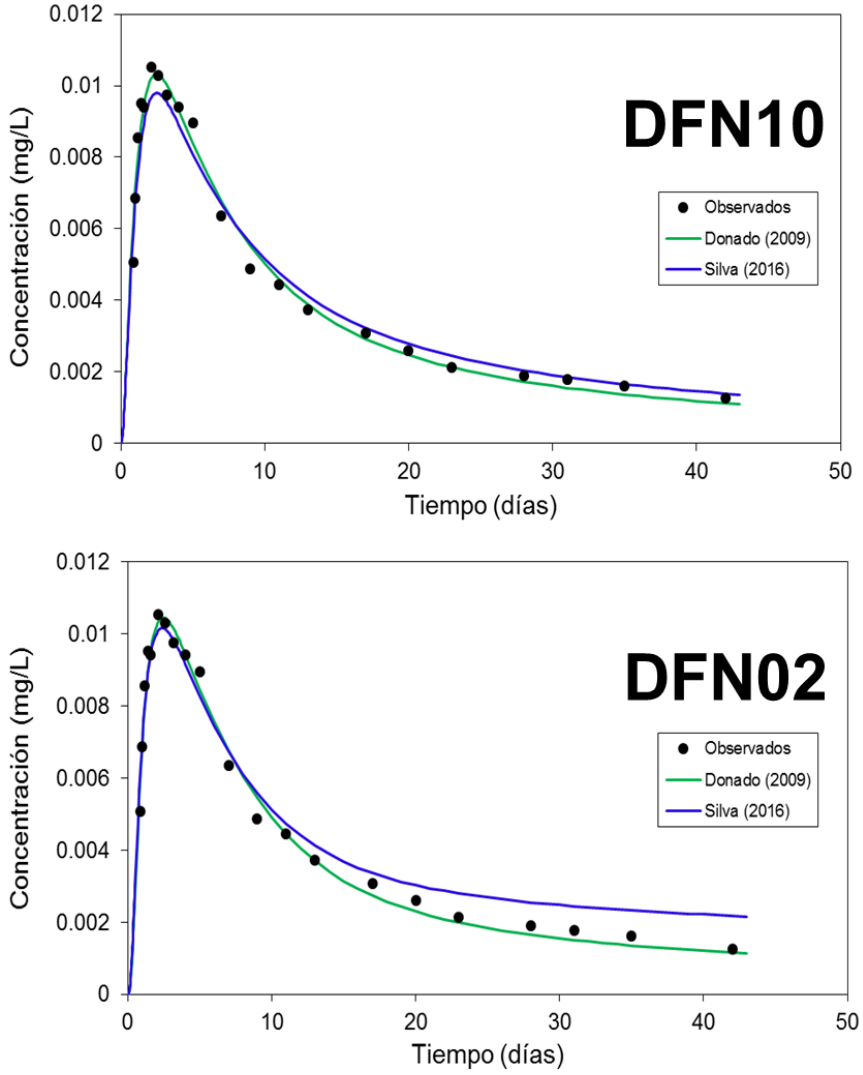

Figura 3-18. Diferentes ajustes de trabajos anteriores para la curva de llegada del Deuterio en la red 10 y la red 02.

- **Uranina**

De las 6 redes utilizadas por *Donado* [2009] en la calibración de los parámetros de transporte, solo 5 obtuvieron resultados aceptables en términos del valor mínimo de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). En la Tabla 3-6, se presenta el resumen de los parámetros de transporte obtenidos para las 5 redes calibradas con la curva de llegada de la Uranina.

RED	Coeficiente de Dispersión Longitudinal (m)	Difusión Molecular (m^2/d)	Porosidad				
		Fracturas	1	2	3	4	5
10	16.308	3.10E-02	2.37E-03	5.03E-12	2.07E-04	6.31E-15	1.76E-05
04	17.481	1.00E-01	1.63E-03	2.68E-09	1.18E-09	9.97E-12	4.74E-09
17	18.590	1.00E-01	1.32E-03	4.55E-04	4.12E-03	5.15E-02	6.27E-06
02	15.840	5.05E-02	1.49E-04	5.75E-06	3.85E-05	9.97E-06	3.15E-06
08	20.590	1.00E-01	2.11E-09	3.42E-04	1.12E-09	9.97E-12	3.99E-09

Tabla 3-6. Parámetros de transporte óptimos para cada red - Uranina

La Figura 3-19 presenta el mejor ajuste de la curva de llegada de la Uranina obtenido con la red 10, en ella se puede observar que se ajustó bien el tiempo al pico. Sin embargo, no se logró obtener la concentración máxima ni modelar correctamente la cola de la curva.

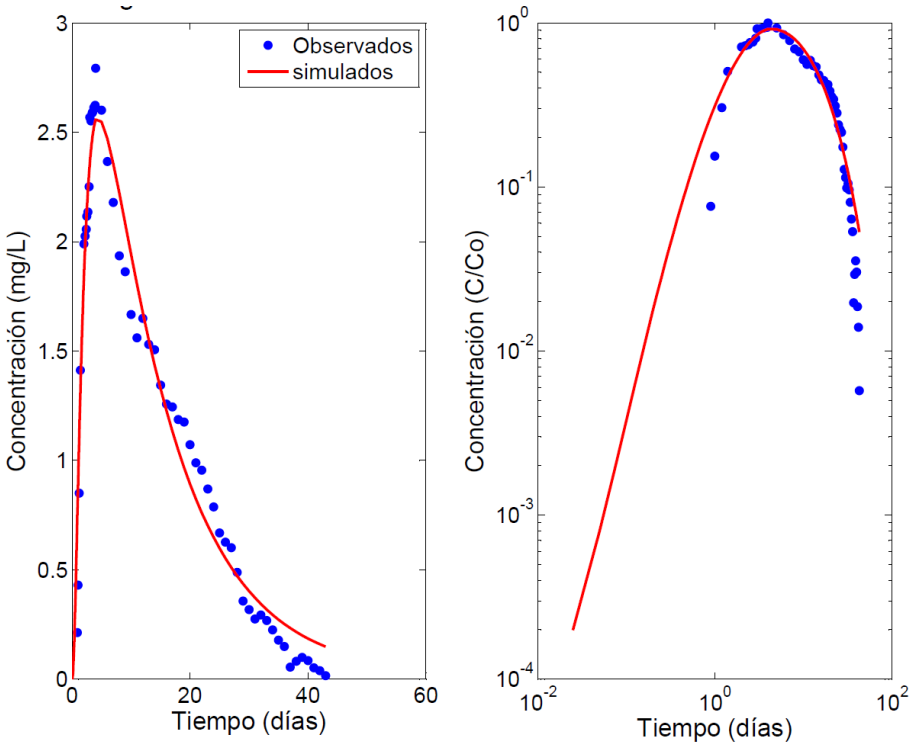

Figura 3-19. Ajuste de la curva de llegada de la Uranina en la red 10

Observando el diagrama de dispersión o de puntos (Figura 3-20), arrojado por la metodología GLUE (utiliza MCAT), se puede concluir que el parámetro más sensible e identificable para el modelo es el coeficiente de dispersión longitudinal, resultado esperado para un modelo de transporte típico de Advección-Dispersión.

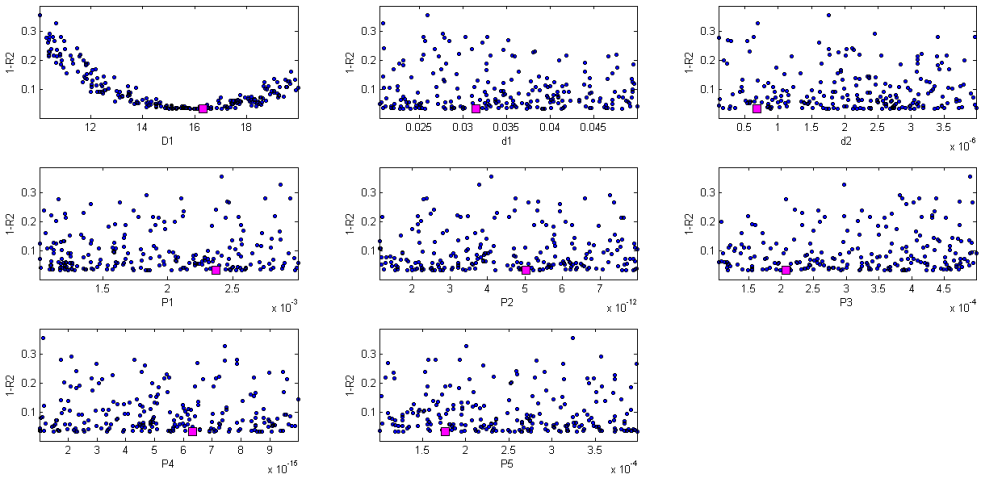

Figura 3-20. Diagrama de dispersión para los parámetros de transporte de la red 10 utilizando la metodología GLUE - Uranina

Esto se confirma con el análisis de sensibilidad, que evalúa el comportamiento de los parámetros de transporte en la red 10. En la Figura 3-21 a) se presenta el gráfico de la distribución de probabilidad acumulada (basado en la función objetivo), el gradiente más alto se encuentra en la barra más oscura y representa el valor de ese parámetro en la mejor corrida. Y, la Figura 3-21 b) presenta el gráfico de sensibilidad regional, donde las curvas de color magenta corresponden al grupo con mejor (H) Función Objetivo y la de color cian los peores (L) valores de la Función Objetivo. En ambas gráficas se puede concluir que el parámetro con mayor grado de identificabilidad y más sensible, es el coeficiente de dispersión longitudinal.

Al analizar los resultados de las otras 5 redes, el parámetro más sensible también es el coeficiente de dispersión longitudinal.

No se realizó análisis estadístico, debido a la poca cantidad de redes que se ajustaron a la curva de llegada de este trazador; sin embargo, los valores de los parámetros de transporte para cada red son similares, con excepción de la porosidad que tiene variaciones de hasta 5 o 6 órdenes de magnitud en cada familia y por supuesto de red a red (Tabla 3-6).

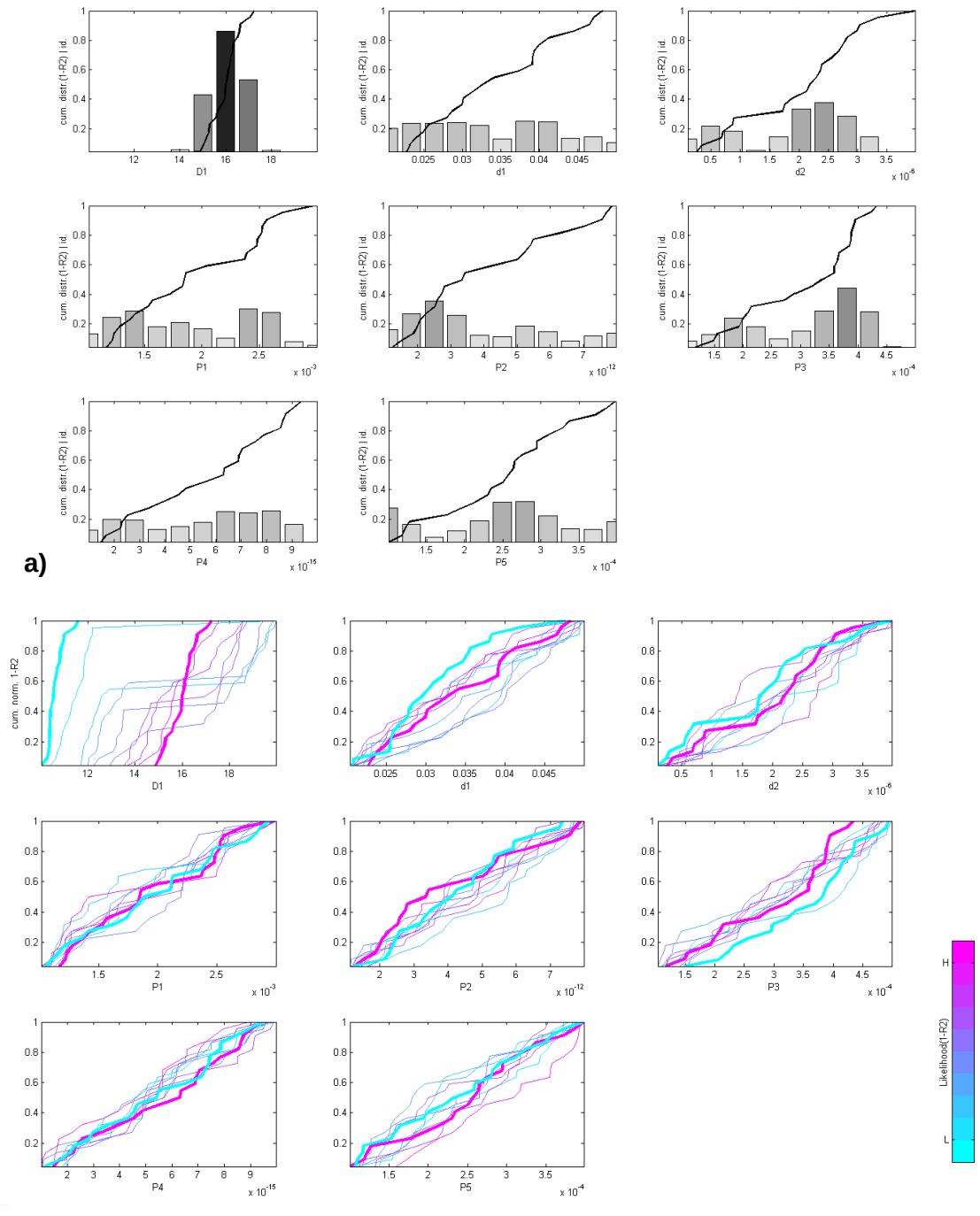

Figura 3-21. ***a)*** **Gráfico de distribución de probabilidad acumulada para los parámetros de transporte en la red 10.** ***b)*** **Análisis de sensibilidad regional para los parámetros de transporte en la red 10 - Uranina**

Finalmente, en la Figura 3-22 se presenta la evolución y la comparación de la curva de llegada del Deuterio en la red 10 y la red 02, a través de los trabajos anteriores. Se puede concluir, que la calibración no mejoró con la implementación de la

metodología de calibración; lo anterior debido a que en ningún caso, se logró ajustar el pico de concentración en las curvas y ni la cola de la curvas.

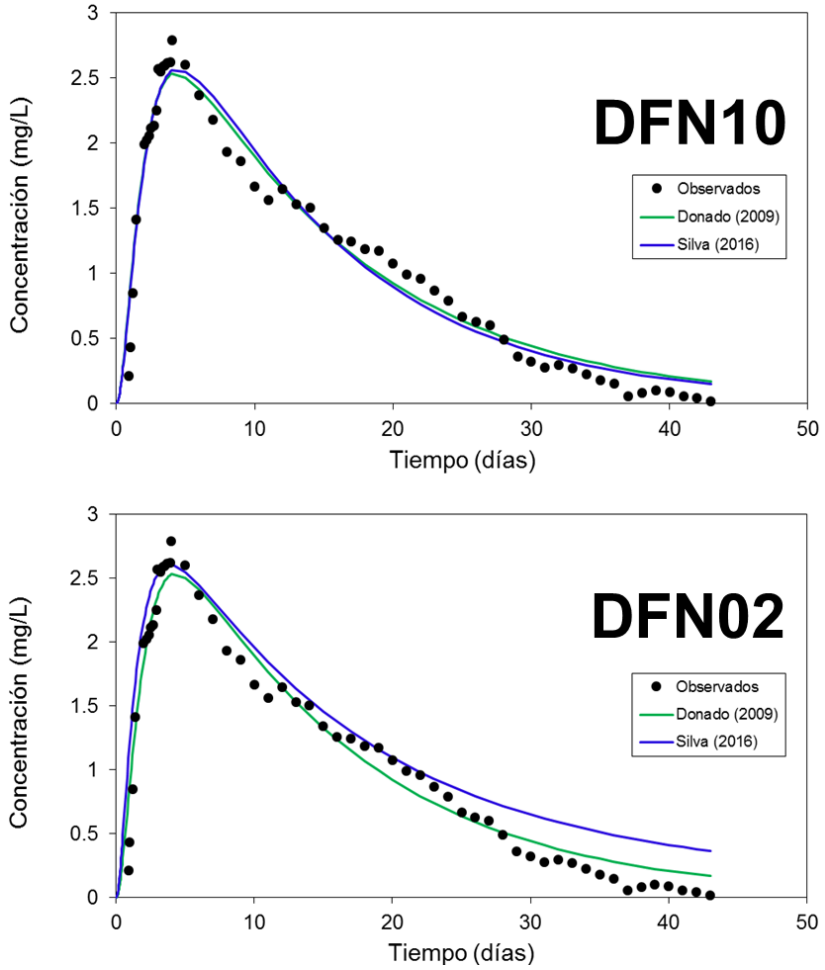

Figura 3-22. Diferentes ajustes de trabajos anteriores para la curva de llegada de la Uranina en la red 10 y la red 02.

Una vez presentados los resultados de la optimización de los parámetros de flujo y transporte y el análisis de sensibilidad y estadísticos de los mismos, se dará paso a las conclusiones de la presente investigación.

4. Conclusiones

Los modelos hidrogeológicos utilizados en medios fracturados, presentan múltiples dificultades para analizar los procesos de flujo y de transporte; principalmente en la representación mediante un modelo conceptual, y cómo se acopla numéricamente. La aproximación por DFN asume un grado de isotropía, modela los procesos de flujo y de transporte de forma individual en cada fractura, lo cual es un gran adelanto en la caracterización hidrogeológica de este tipo de formaciones.

Ante la dificultad de calibrar los parámetros de flujo y transporte en la redes de fracturas discretas, se optó por desarrollar una metodología de calibración en serie, combinando los algoritmos de optimización. Primero, se optimizó cada red con el Algoritmo de máxima verosimilitud (Método de Levenberg-Marquardt) de TRANSIN IV y el SCE-UA (obteniendo los valores semilla de los resultados de trabajos anteriores), los cuales arrojan un conjunto único de parámetros óptimos. Seguido a esto, se compararon los resultados de cada algoritmo y se definió un intervalo de búsqueda en cada parámetro, para finalmente implementar la metodología GLUE y realizar un análisis de sensibilidad. Esto permitió, obtener los resultados deseados de manera ágil y sin mucha intervención del modelador.

Al solucionar el problema inverso de flujo con la metodología de calibración en las 77 redes a las cuales *Pardo* [2012] aplicó con éxito la teoría de la percolación, solo 36 obtuvieron resultados aceptables en términos del valor mínimo de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). Sin embargo, en todas las redes se mejoró el ajuste de la curva de abatimiento en el pozo de bombeo y en los 3 pozos de observación.

Al realizar el análisis de sensibilidad con la metodología GLUE (utilizando MCAT), se encontró que el parámetro de flujo más sensible e identificable en todas las redes, es la conductividad hidráulica de alguna de las familias de fracturas. Sin embargo para cada red, la familia que controla el flujo (cuenta con el parámetro más sensible) es diferente, debido a que la generación de las redes de fracturas discretas, no fue condicionada.

Con el análisis estadístico de los parámetros de flujo, se encontró una variación tanto de la conductividad hidráulica, como del coeficiente de almacenamiento específico para cada familia, y en la red entera de entre 5 y 6 órdenes de magnitud. Además, los estadísticos de estos parámetros en cada familia y para toda la red, son muy similares. Como resultado el intervalo del valor de los parámetros estimados, tiene sustento físico y es coherente con los resultados de trabajos anteriores.

Al solucionar el problema de transporte para las 36 redes de fracturas percoladas donde se obtuvieron resultados aceptables en flujo, ninguna red presentó resultados satisfactorios en términos del valor de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$), tanto para Deuterio como para Uranina. En las curvas de llegada se puede apreciar, que en ningún escenario llegó todo el trazador, como si este se quedará en la red de fracturas y no llegara al punto de observación. Esto puede ser resultado del no cumplimiento del criterio de Pléclét, debido a que con la percolación las redes quedaron con elementos muy largos, o debido a la baja conectividad de la red de fracturas; además, es posible que la densidad de fracturas de la red esté por debajo del umbral de percolación.

Debido a los malos resultados en la calibración de los parámetros de transporte con las redes percoladas, se decidió implementar la metodología de calibración a las 6 redes sin percolar utilizadas por *Donado* [2009] para los dos trazadores (Deuterio y Uranina), las cuales arrojaron resultados satisfactorios.

Para el Deuterio, al solucionar el problema inverso de transporte en las 6 redes utilizadas por *Donado* [2009], en 5 redes se obtuvieron resultados aceptables en términos del valor mínimo de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). Se puede concluir que la calibración mejoró el ajuste de las colas en las curvas, es decir, que se modeló con éxito el proceso de difusión en la matriz con la implementación de la metodología de calibración. Sin embargo, en ningún caso se logró ajustar el pico de concentración en las curvas.

Al realizar el análisis de sensibilidad con la metodología GLUE (utilizando MCAT), se encontró que el parámetro de transporte más sensible e identificable en todas las redes para el Deuterio, es la porosidad de alguna de las familias de fracturas. Sin embargo para cada red, la familia que controla los procesos de transporte (cuenta con el parámetro más sensible) es diferente, debido a que la generación de las redes de fracturas discretas, no fue condicionada.

Para la Uranina, al solucionar el problema inverso de transporte en las 6 redes utilizadas por *Donado* [2009], en 5 redes se obtuvieron resultados aceptables en términos del valor mínimo de la función objetivo ($J_h \leq 10$ o $E \leq 1$). De lo cual se concluye, que la calibración no mejoró con la implementación de la metodología de calibración, debido a que en ningún caso, se logró ajustar el pico de concentración ni la cola de la curvas.

Al realizar el análisis de sensibilidad con la metodología GLUE (utilizando MCAT), se encontró que el parámetro de transporte más sensible e identificable para la Uranina es el coeficiente de dispersión longitudinal, resultado esperado para un modelo de transporte típico de Advección-Dispersión, y que según *Donado* [2009], es el parámetro más difícil de calibrar y fuente de inestabilidad numérica.

La optimización de los parámetros de flujo y transporte del modelo, resultó exitosa si se tiene en cuenta el elevado nivel de complejidad geométrico. Esta metodología de calibración para las redes de fracturas discretas que se propuso en el presente trabajo, genera una buena aproximación para la simulación de los procesos de flujo y transporte en este tipo de medios geológicos complejos.

A. ANEXO I

Anexo digital de los resultados de las calibraciones de todas las redes para problemas de flujo y transporte

Bibliografía

Alcolea, A., J. Carrera, and A. Medina (2000), A Hybrid Marquardt-Simulated Annealing method for solving the groundwater inverse problem, in *Proceedings of the ModelCARE 99* edited, IAHS, Zurich, Switzerland.

Alder, P., and J.-F. Thover (1999), *Fractures and fracture networks, theories and applications of transport in porous media*, 442 pp.

Andersson, J., A. M. Shapiro, and J. Bear (1984), A Stochastic Model of a Fractured Rock Conditioned by Measured Information, *Water Resources Research*, *20*(1), 79-88, doi:10.1029/WR020i001p00079.

Bear, J., C. Tsang, and G. d. Marsily (1993), *Flow and contaminant transport in fractured media*, San Diego, California.

Berkowitz, B. (2002), Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review, *Advances in Water Resources*, *25*(8–12), 861-884, doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0309-1708(02)00042-8.

Berkowitz, B., J. Bear, and C. Braester (1988), Continuum Models for Contaminant Transport in Fractured Porous Formations., *Water Resources Res 24*(8), 1225-1236.

Beven, K., and A. Binley (1992), The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction, *Hydrological Processes*, *6*(3), 279-298, doi:10.1002/hyp.3360060305.

Bodin, J., F. Delay, and G. de Marsily (2003a), Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 1. fundamental mechanisms, *Hydrogeology Journal*, *11*(4), 418-433, doi:10.1007/s10040-003-0268-2.

Bodin, J., F. Delay, and G. de Marsily (2003b), Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 2. mathematical formalism, *Hydrogeology Journal*, *11*(4), 434-454, doi:10.1007/s10040-003-0269-1.

Bourke, P. (1987), Channeling of flow through fractures in rock, *Geoval*.

Cacas, M. C., E. Ledoux, G. de Marsily, B. Tillie, A. Barbreau, E. Durand, B. Feuga, and P. Peaudecerf (1990), Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation: 1. The flow model, *Water Resources Research*, *26*(3), 479-489, doi:10.1029/WR026i003p00479.

Carrera, J. (2006), A methodology to interpret cross-hole tests in a granite block. , *Hydrogeology Journal*, *325*(1-4), 222-240.

Carrera, J., A. Alcolea, A. Medina, J. Hidalgo, and L. J. Slooten (2005a), Inverse problem in hydrogeology, *Hydrogeology Journal*, *13*(1), 206-222, doi:10.1007/s10040-004-0404-7.

Carrera, J., A. Alcolea, A. Medina, J. Hidalgo, and L. J. Slooten (2005b), Inverse problema in hydrogeology, *Hydrogeology Journal*, *13*(1), 206 - 222.

Carrera, J., X. Sánchez-Vila, I. Benet, A. Medina, G. Galarza, and J. Guimerà (1998), On matrix diffusion: formulations, solution methods and qualitative effects, *Hydrogeology Journal*, *6*(1), 178-190, doi:10.1007/s100400050143.

Committee on Fracture Characterization and Fluid Flow, U. N. (1996), Rock Fractures and Fluid Flow: Contemporary Understanding and Applications*Rep.*, National Academy Press, Washington, USA.

D'Alessandro, M., F. Mousty, G. Bidoglio, J. Guimera, I. Benet, X. Sánchez-Vila, M. G. Gutiérrez, and A. Y. De Llano (1997), Field tracer experiment in a low permeability fractured medium: results from El Berrocal site, *Journal of Contaminant Hydrology*, *26*, 189-201, doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0169-7722(96)00068-X.

Donado, L. D. (2009), On reactive transport in heterogeneous media: form the natural complixity to analytical Solution, Technical University of Catalonia., Barcelona.

Duan, Q. Y., V. K. Gupta, and S. Sorooshian (1993), Shuffled complex evolution approach for effective and efficient global minimization, *Journal of Optimization Theory and Applications*, *76*(3), 501-521, doi:10.1007/bf00939380.

Durlofsky, L. J. (1991), Numerical Calculation of Equivalent Grid Block Permeability Tensors for Heterogeneous Porous Media, *Water Resour. Res 27*(5), 699-708.

ENRESA, E. n. d. r. r. (1996), Berrocal Project: characterization and validation of natural radionuclide migration processes under real conditions on the fissured granitic environment*Rep.*, European Commission - Nuclear Science and Technology.

Faybishenko, B., and S. Benson (2013), Dynamics of Fluids in Fractured Rock, edited, pp. i-x, American Geophysical Union, doi:10.1002/9781118669662.fmatter.

GIREH, G. d. I. e. R. H.-. (2009), valuación del Impacto de la Construcción de los Túneles Viales del Sumapaz y de la Línea en los Hidrosistemas Circunvecinos: Informe de Análisis y Recopilación de Información, Túnel de la Línea.*Rep.*, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

Guimerá, J., M. García, M. W. Saaltink, A. Yllera, J. Carrera, and J. Bueno (1996), Ensayo de trazadores en medios fracturados de baja permeabilidad Ejemplos del Proyecto El Berrocal, *GEOGACETA*, *20*(7), 1634 - 1637.

Hernández, J. (2014), Análisis de la capacidad predictiva de un modelo dinámico de calidad del agua aplicando técnicas de computación evolutiva, optimización multiobjetivo y procesamiento recursivo de datos, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia.

Hudson, J. A., and P. R. Lapointe (1980), Printed-Circuits for Studying Rock Mass Permeability, *Int. J. Rock Mech. Min. Sci*, *17*(5), 297-301.

Kurtzman, D., R. Nativ, and E. Adar (2007), Flow and transport predictions during multi-borehole tests in fractured chalk using discrete fracture network models, *Hydrogeology Journal*, *15*(8), 1629-1642, doi:10.1007/s10040-007-0205-x.

Long, J. C. S., and D. M. Billaux (1987), From field data to fracture network modeling: An example incorporating spatial structure, *Water Resources Research*, *23*(7), 1201-1216, doi:10.1029/WR023i007p01201.

Long, J. C. S., J. S. Remer, C. R. Wilson, and P. A. Witherspoon (1982), Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures, *Water Resources Research*, *18*(3), 645-658, doi:10.1029/WR018i003p00645.

Martinez, L. (2004), Metodología para la modelación hidrogeológica de medios fracturados, Escola Técnica Superior DÉnginyeres de Camins, Canals i Ports, Barcelona, España.

Medina, A., A. Alcolea, and J. Carrera (2004), TRANSIN IV. FORTRAN code for solving for coupled non-linear flow and transport inverse problem., 182 pp, University of Catalunia, Barcelona.

Medina, A., G. Garlaza, and J. Carrera (1996), *TRANSIN - II, Fortran code for solving the copuled flow and transport invers problem in satured condition*, Topical Report.

Molinero, J. (2001), Testing and validation of numerical models of groundwater flow, solute transport and chemical reactions in fractured granites: A quantitative study of the hydrogeological and hydrochemical impact produced*Rep.*, 253 pp, ENRESA, Madrid, España.

Nash, J. E., and J. Sutcliffe (1970), River flow forecasting through conceptual models, Part I A discussions of principles, *Journal of Hydrology*, *10*, 282 - 290.

Neretnieks, I. (1993), Solute transport in fracture rock- Applications to radionuclide waste repositories, in *Flow and contaminant transport in fractured rock*, edited by T. C. Bear J, de Marsily G, pp. 39 - 127, Academic Press, San Diego.

Neretnieks, I. (2002), A stochastic multi-channel model for solute transport—analysis of tracer tests in fractured rock, *Journal of Contaminant Hydrology*, *55*(3–4), 175-211, doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0169-7722(01)00195-4.

Neretnieks, I., T. Eriksen, and P. Tähtinen (1982), Tracer movement in a single fissure in granitic rock: Some experimental results and their interpretation, *Water Resources Research*, *18*(4), 849-858, doi:10.1029/WR018i004p00849.

Neuman, S. (2005), Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks, *Hydrogeology Journal*, *13*(1), 124-147, doi:10.1007/s10040-004-0397-2.

Neuman, S. P., and J. S. Depner (1988), Use of variable scale pressure test data to estimate the log hydraulic conductivity covariance and dispersivity of fractured granites near Oracle, Arizona, *Journal of Hydrology*, *102*(1-4), 475-501.

Pardo, Y. A. (2012), Optimización de un modelo de flujo en un medio fracturado, usando teoría de percolación, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.

Reeves, D. M., R. Parashar, and Y. Zhang (2012), Hydrogeological Characterization of Fractured Rock Masses Intended for Disposal of Radioactive Waste*Rep.*, Desert Research Institute.

Rivas, P., L. P. d. Villar, B. d. l. Cruz, P. Gómez, M. Tunero, A. Hernández, C. Marín, M. García, M. Pelayo, and J. Pardillo (1993), *El proyecto de El Berrocal: síntesis preliminar%B 1993*.

Ruiz, E. (2002), Metodología de simulación de flujo y transporte de solutos en medios fracturados de baja permeabilidad, Technical University of Catalonia, Barcelona.

Sahimi, M. (2011), *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*, 483 pp., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, doi:10.1002/9783527636693.fmatter.

Selroos, J.-O., D. D. Walker, A. Ström, B. Gylling, and S. Follin (2002), Comparison of alternative modelling approaches for groundwater flow in fractured rock, *Journal of Hydrology*, *257*(1–4), 174-188, doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0022-1694(01)00551-0.

Thyer, M., G. Kuczera, and B. C. Bates (1999), Probabilistic optimization for conceptual rainfall-runoff models: A comparison of the shuffled complex evolution and simulated annealing algorithms, *Water Resources Research*, *35*(5), 767 - 773.

Tsang, C. F., and I. Neretnieks (1998), Flow channeling in heterogeneous fractured rocks, *Rev. Geophys*, *36*(2), 682-691.

Vives, L., X. Sánchez-Vila, E. Ruiz, J. Carrera, F. Elorza, C. Bajos, and A. Guzmán (2004), Aplicación del problema inverso en la simulación del flujo de agua subterránea y el transporte de solutos en modelos discretos de fracturas, in *Mecánica Computacional*, edited, pp. 1375 - 1389, Bariloche, Argentina.

Wang, M. Y., and P. Kulatilake (2008), Understanding of hydraulic properties from configurations of stochastically distributed fracture networks, *Hydrological Processes*, *22*(8), 1125-1135.

Warren, J. E., and P. J. Root (1963), The Behavior of Naturally Fractured Reservoirs, doi:10.2118/426-PA.

Yaver, N. B. (2011), Optimización de parámetros de flujo en medios fracturados, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.

Zang, X., and D. Sanderson (2002), *Numerical modelling and analysis of fluid flow and deformation of fractured rock masses*, 300 pp.

Zhou, H., J. J. Gómez-Hernández, and L. Li (2014), Inverse methods in hydrogeology: Evolution and recent trends, *Advances in Water Resources*, *63*, 22-37, doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.10.014.