

MODELIZACION ESTOCASTICA
DE
ACUIFEROS

Juan C. Mayor
Ingeniero de Minas

Madrid, Octubre 1991

INDICE

Pags.-

1. <u>INTRODUCCION</u>	3
2. <u>PLANTEAMIENTO DEL CASO DE ESTUDIO</u>	5
3. <u>SIMULACION SECUENCIAL CONDICIONAL</u>	7
3.1. Introducción	7
3.2. Modelos de incertidumbre de variables de respuesta	7
3.3. Simulación secuencial	10
3.3.1. Simulación secuencial no condicional	10
3.3.2. Algoritmo para la simulación secuencial	12
3.3.3. Simulación secuencial condicional	13
3.4. Cálculo de las probabilidades condicionales	13
4. <u>APLICACION AL CASO DE ESTUDIO</u>	17
4.1. Introducción	17
4.2. Simulación secuencial condicional de la permeabilidad	18
4.3. Cuantificación de la conectividad espacial	18
4.4. Determinación del tiempo de viaje mínimo	20
5. <u>REFERENCIAS</u>	24
<u>FIGURAS</u>	25

1. INTRODUCCION

Los medios geológicos suelen ser con frecuencia heterogéneos, con propiedades que varían ampliamente de una localización a otra. La heterogeneidad es un importante aspecto de los sistemas geológicos que necesita ser tratado debidamente al realizar su modelización matemática. Es esencial reconocer que la heterogeneidad produce falta de conocimiento o incertidumbre acerca de los parámetros del sistema geológico; incertidumbre que sólo parcialmente podría paliar una toma de datos de campo más exhaustiva y costosa. Es por otra parte preciso incorporar dicha incertidumbre a los resultados obtenidos en la modelización; en otras palabras, evaluar la incertidumbre dentro del proceso de toma de decisiones que el gestor realiza con el modelo matemático.

El presente trabajo tiene por objeto la presentación de una nueva técnica numérica, la simulación secuencial condicional, para el tratamiento de la heterogeneidad en la permeabilidad (o en la transmisividad) en problemas hidrodinámicos y de contaminación de aguas subterráneas.

Como alternativa a la comúnmente aceptada modelización determinística, en este trabajo se adopta una aproximación estocástica para modelizar la heterogeneidad de la permeabilidad. Por lo tanto la variación de la permeabilidad (k) se considera que corresponde a una realización (o muestra) de un conjunto (o colección) de realizaciones que tienen la misma estructura espacial estadística. Puesto que sólo existe una realización física de k de la que puede deducirse la estructura estadística del conjunto es necesario invocar la hipótesis de ergodicidad, que esencialmente implica que la estructura estadística del conjunto es la misma que la estructura estadística encontrada en la única realización disponible en la naturaleza. Es necesario además invocar la hipótesis de estacionaridad que implica que la estructura espacial estadística no varía con la posición, de forma que dicha estructura pueda obtenerse de medidas en diferentes localizaciones.

Hay dos formas en que la heterogeneidad puede tratarse en un modelo estocástico, que son conocidas usualmente como estimación (o interpolación) y simulación respectivamente. La

estimación consiste en buscar la mejor estima de la propiedad de interés k en localizaciones donde no ha sido medida. Sin embargo, la estima (o interpolación) de la propiedad variará generalmente mucho más suavemente con la posición que la propiedad misma. Por lo tanto, si bien un modelo que utilice la propiedad k interpolada puede tratar alguno de los efectos de la heterogeneidad, será preciso realizar los cálculos sobre todo el conjunto de realizaciones de k si se quiere tratar en detalle las implicaciones de la heterogeneidad de cara al flujo y transporte de contaminantes (Figura 1). En concreto si se quiere identificar y modelizar correctamente la existencia de valores extremos de k que darán lugar a barreras o caminos preferenciales al flujo de agua subterránea, y que el procedimiento de estimación (interpolación) enmascararía por su citado efecto de suavizado sobre k . El procedimiento de simulación adopta pues una aproximación de simulación de Monte-Carlo, en donde los cálculos pertinentes se efectúan sobre varias realizaciones de la propiedad k (y no sobre una sola realización como es el caso de la modelización determinística), que presentan la estructura espacial estadística requerida.

La técnica de simulación secuencial condicional puesta a punto por A. Journel (Universidad de Stanford, 1.988) y comenzada a aplicar en minería y evaluación de yacimientos petrolíferos, se presenta aquí aplicada a un caso de estudio teórico de contaminación de aguas subterráneas. El trabajo fué realizado por el autor durante la realización de sus estudios de Master of Science en Recursos Hidráulicos en la Universidad de Stanford en 1.989, siendo presentado en la reunión anual del Stanford Center for Reservoir Forecasting en Mayo de 1.990.

2. PLANTEAMIENTO DEL CASO DE ESTUDIO

El acuífero en estudio cuya geometría y condiciones de contorno se presentan en la Figura 2, sufrió la inyección accidental de una sustancia química tóxica con una concentración de 300 ppm. El soluto en estudio puede considerarse como no reactivo y que no afecta apreciablemente las propiedades físicas del agua. Por otra parte el límite máximo tolerable para esta sustancia particular es de 50 ppm.

La presencia del río que constituye el límite este del acuífero, y en conexión hidráulica con él, plantea al gestor de recursos hídricos las siguientes cuestiones de forma que pueda decidir si es preciso o no tomar medidas de remedio en el sistema río-acuífero:

- Cuál es el tiempo de viaje de la pluma contaminante desde la fuente de contaminación puntual al río.
- Cuál es la concentración máxima en dicho contaminante del agua del acuífero al alimentar al río.
- Donde alcanzará la pluma contaminante al río.

Adicionalmente, y teniendo en cuenta que el contaminante es calificado de muy peligroso para la población potencialmente afectada, será necesario tomar una decisión conservadora para la resolución del problema. En otras palabras, será necesario determinar el mínimo tiempo de viaje posible desde la fuente contaminante al río.

El acuífero, compuesto de materiales carbonatados, está caracterizado a partir de 64 datos de permeabilidad (Figura 3). Un análisis estadístico preliminar indica un valor de 56.2 m Darcy con unos valores máximo y mínimo de 101 y 21 m Darcy, respectivamente, y una distribución univariante muy próxima a ser gaussiana (Figuras 4 y 5).

El acuífero es, además de heterogéneo, anisótropo con respecto a la permeabilidad como

indican los variogramas direccionales obtenidos a partir de los 64 datos. (Figura 6 a). Los correspondientes modelos de variograma ajustados se indican en la Figura 6b.

Otros parámetros que completan la caracterización del acuífero son un espesor saturado uniforme de 75 m y un valor de porosidad eficaz del 20% sobre todo el acuífero. La dispersividad longitudinal presenta un valor de 40 m y la transversal de 5 m.

3. SIMULACION SECUENCIAL CONDICIONAL

3.1. Introducción

En este trabajo se entiende por simulación, en términos geoestadísticos, la generación de campos (mapas) de permeabilidad condicionales a los datos y que presentan unos patrones de variabilidad equivalentes a los observados en la realidad. Desde un punto de vista estadístico cualquiera de los campos generados podría corresponder a la realidad puesto que los datos medidos son reproducidos debidamente y los valores simulados entre datos tienen la variabilidad espacial mostrada en la realidad.

Como se explica más adelante, estos campos de permeabilidad son construídos de manera que los valores simulados en los puntos donde no se dispone de medidas sean coherentes no sólo con los datos medidos sino con el resto de valores simulados.

La curva de función de densidad de probabilidad (fdp) de una cierta variable de respuesta del modelo matemático (por ejemplo, el tiempo de viaje de un contaminante entre dos ciertas posiciones) se obtendrá evaluando dicha variable en cada uno de estos campos. Obtenida la pdf podría asociarse pues un valor de probabilidad a cada valor de la variable de respuesta. Por ejemplo, podría saberse cual es el tiempo de viaje que es rebasado con un 10% de probabilidad o, inversamente, con qué probabilidad es rebasado un prefijado tiempo de paso t_0 .

3.2. Modelos de incertidumbre de variables de respuesta

El objetivo de la simulación es pues la obtención de modelos de incertidumbre (fdp) de variables de respuesta cuya relación con la permeabilidad siendo estimada es complicada y no lineal.

La primera posibilidad es obtener el tiempo de viaje (variable de respuesta) que corresponde a un mapa de permeabilidades estimado por kriging. El problema con

este tiempo de viaje es que no se le puede asociar una medida de incertidumbre (probabilidad) ni se sabe dónde, dentro del posible rango de variabilidad acorde con los datos medidos, se encuentra. No se sabe si el valor resultante es el tiempo de viaje medio, o el que tiene una probabilidad del 90% de ser superado, o el tiempo de viaje máximo, ni tampoco se sabe cuál es la confianza que se puede depositar en ese estimador.

Para resolver estas cuestiones se recurre a la simulación desde el punto de vista geoestadístico. El procedimiento de trabajo es el siguiente: (1) se genera un número suficientemente largo de campos de permeabilidad condicionales a los datos y que presenten la misma variabilidad espacial que la inferida bien de los datos, bien del conocimiento de la variabilidad espacial en formaciones semejantes situadas en otra zona mejor muestreada; (2) se evalúa el tiempo de viaje en cada uno de los campos lo que equivale a resolver los modelos matemáticos de flujo y transporte para cada campo de permeabilidad; (3) con los valores de la variable de respuesta se construye una fdp que constituye el modelo de incertidumbre de la variable de respuesta. Es este modelo de incertidumbre el que se utilizará para el análisis de riesgos ligados al comportamiento de un cierto acuífero: por ejemplo se determinará el valor medio del tiempo de viaje, el más probable, o aquél que tiene una cierta probabilidad de ser superado; asimismo, este modelo también nos dará una incertidumbre del rango de variabilidad de la variable de respuesta y consecuentemente del grado de fiabilidad que se puede depositar en los valores así estimados. Esta manera de elaborar un modelo de incertidumbre está esquematizada en la figura 7.

El tiempo de viaje se ha elegido como variable de respuesta ejemplo en este trabajo porque es una variable de respuesta sencilla de calcular y con un claro significado físico. Esto no quiere decir que otras variables de respuesta no pueden ser utilizadas, como por ejemplo el nivel piezométrico, el caudal de alimentación acuífero-río o la concentración de un cierto contaminante en una cierta localización.

En el caso de estimación, la distribución espacial de la permeabilidad (desconocida

excepto en unos pocos puntos) $\{z(x), x \in A\}$ es sustituida por un conjunto único de valores estimados $\{z^*(x), x \in A\}$. En el caso de simulación, la incertidumbre sobre la distribución espacial de la permeabilidad es caracterizada por un conjunto de campos simulados $\{z_l(x), x \in A\}$, $l = 1, \dots, L$.

En el caso de estimación, tras resolver la función de transferencia Ψ (modelos de flujo y transporte) en el campo estimado se obtiene una respuesta única sin ninguna medida sobre la incertidumbre asociada:

$$t^* = \Psi(z^*(x), x \in A)$$

El conocimiento de la varianza de la estimación o incluso el de la función de densidad de probabilidad del parámetro $z(x)$ no proporciona ninguna medida de la incertidumbre asociada a t^* a no ser que la función de transferencia sea lineal.

En el caso de simulación, la resolución de la función de transferencia en todas los campos generados proporciona una distribución de posibles variables de respuesta:

$$t_l = \Psi(z_l(x), x \in A), l = 1, \dots, L$$

De esta distribución de valores $\{t_l, l = 1, \dots, L\}$ puede obtenerse una medida de incertidumbre y más concretamente estimar probabilidades de que un valor t_0 sea excedido como $\text{Prob}\{T > t_0\}$. Esta probabilidad será estimada por la proporción de valores observados de t que superen el umbral t_0 .

Es importante indicar que el valor medio de las respuestas, $\bar{t}$, no tiene por qué aproximarse a la respuesta basada en el campo estimado:

$$\bar{t} = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L t_l \neq t^* = \Psi(z^*(x), x \in A)$$

3.3. Simulación secuencial

La simulación secuencial es una técnica de generación de campos aleatorios que puede utilizarse tanto para la generación de campos con una distribución gaussiana como para campos con una distribución no gaussiana. El único requisito es que la fdp del parámetro en estudio en un punto, condicional a los datos de alrededor, pueda calcularse (ver 3.4).

Los requisitos que se exigirán a un campo generado mediante cualquier técnica de simulación serán:

- que reproduzca localmente la información disponible, es decir, que los datos medidos sean reproducidos en todos los campos generados.
- que reproduzca globalmente la información disponible, es decir, que la variabilidad observada en los datos - y posiblemente en zonas con una estructura similar - y que es cuantificada a través del variograma aparezca en los mapas generados.

La primera de estas condiciones es la que hace que los campos generados se denominen campos condicionales y la segunda condición es la que hace que la variabilidad que muestran estos campos sea similar a la variabilidad real y siempre mucho mayor que la variabilidad que se observa en un campo obtenido mediante estimación.

3.3.1. Simulación secuencial no condicional

En la simulación no condicional sólo se debe satisfacer el segundo de los dos requisitos apuntados arriba es decir reproducir la variabilidad espacial observada en los datos. Desde un punto de vista puramente teórico, esto se obtiene reproduciendo la función de densidad de probabilidad (fdp) multivariada de todos los puntos de que

consta el campo. En la descripción que sigue se comienza intentando reproducir exactamente esta fdp multivariada para finalmente introducir una serie de simplificaciones que permitan atacar el problema desde un punto de vista práctico.

La fdp $f(z_1, z_2; x_1, x_2)$ de las variables $Z(x_1)$ y $Z(x_2)$ puede escribirse como el producto de la fdp de $Z(x_1)$ condicionada a $Z(x_2)$ y la fdp univariada de $Z(x_2)$.

$$f(z_1, z_2; x_1, x_2) = f(z_1; x_1 | z_2; x_2) \cdot f(z_2; x_2)$$

Aplicando recursivamente esta expresión a la fdp multivariada de los N puntos de que consta el campo que va a simularse se puede descomponer esta fdp multivariada en el producto de $N - 1$ fdp condicionales univariadas y una fdp marginal como sigue:

$$f_{(N)}(z_i; x_i : i \in (N)) \tag{1}$$

$$\begin{aligned} &= f_{N | (N-1)}(z_N; x_N | z_i; x_i : i \in (N-1)) f_{(N-1)}(z_i; x_i : i \in (N-1)) \\ &= f_{N | (N-1)}(z_N; x_N | z_i; x_i : i \in (N-1)) f_{(N-1) | (N-2)}(z_{N-1} | z_i; x_i : i \in (N-2)) \\ &\quad f_{(N-2)}(z_i; x_i : i \in (N-2)) \\ &= (\dots) \\ &= f_{N | (N-1)}(z_N; x_N | z_i; x_i : i \in (N-1)) f_{(N-1) | (N-2)}(z_{N-1} | z_i; x_i : i \in (N-2)) \\ &\quad \dots f_{2 | 1}(z_2; x_2 | z_1; x_1) f(z_1; x_1) \end{aligned} \tag{2}$$

donde los subíndices que se utilizan con f indican si ésta es una fdp condicionada o no, así como, en el caso de probabilidades condicionadas, cuáles son las variables condicionantes. Por ejemplo, $f_{(n)}$ representa una fdp multivariada de orden n mientras que $f_{n | (n-1)}$ es la fdp de probabilidad condicionada de la variable $Z(x_n)$ dado el

conjunto de $(n - 1)$ valores.

Esta descomposición es importante porque permite concluir que la caracterización de la variabilidad espacial de los N valores en que se ha discretizado el campo a generar puede hacerse tanto a través de la fdp multivariada como a través de las N fdp univariadas (condicionales o no) que aparecen en (1). En consecuencia, y al menos en teoría, la generación de una realización puede llevarse a cabo escogiendo aleatoriamente de la función de $Z(x_i)$ y secuencialmente escogiendo valores aleatorios de las $N - 1$ funciones de densidad de probabilidad condicional.

3.3.2. Algoritmo para la simulación secuencial

La generación de una realización por simulación secuencial se llevaría a cabo de la siguiente manera:

1. Escoger aleatoriamente el valor z_1 de la función de densidad de probabilidad marginal de $Z(x_1)$.
2. Determinar la función de densidad de probabilidad de $Z(x_2)$ condicionada a que $Z(x_1) = z_1$ y escoger de ésta aleatoriamente un valor z_2
3. Determinar la función de distribución de $Z(x_3)$ condicionada a que $Z(x_1) = z_1$ y $Z(x_2) = z_2$, y escoger aleatoriamente de ésta un valor para z_3 .
-
-
-
- N. Determinar la función de distribución de $Z(x_N)$ condicionada a que $Z(x_i) = z_i$: $i \in (N - 1)$, y escoger aleatoriamente de ésta el valor z_N .

Este procedimiento tal y como se ha descrito es completamente general y puede utilizarse para la generación de cualquier tipo de campo siempre y cuando sea posible el cálculo de las probabilidades condicionales que se requieren.

Para la generación de una segunda realización simplemente hay que repetir los pasos 1 a N.

3.3.3. Simulación secuencial condicional

La extensión del algoritmo anterior a la generación de campos condicionales es inmediato. Si son N_0 los datos de que se dispone, el algoritmo anterior comenzará en el paso $N_0 + 1$ determinando la función de probabilidad de $Z(x_{(N_0+1)})$ condicionada a los datos $Z(x_j; z_j : j \in (N_0))$. Los N_0 primeros pasos se limitan a forzar que los valores en las N_0 posiciones que corresponden a los datos sean iguales a los valores medidos.

3.4. Cálculo de las probabilidades condicionales

El único problema es por tanto determinar las probabilidades condicionales que aparecen en la ecuación (1). En esta sección se muestra cómo calcular dichas probabilidades en el caso gaussiano.

La función de densidad de probabilidad multivariada multigaussiana tiene la característica de que queda totalmente definida por un valor medio m y una covarianza $C(h)$ (Anderson, 1958). Esta sencillez en su descripción hace que el modelo multigaussiano sea el modelo preferido y en concreto para modelizar la incertidumbre derivada de la heterogeneidad de la permeabilidad.

Puede demostrarse (Anderson, 1958) que la función de probabilidad de $Z(x)$ condicional al conjunto de datos $\{z_i; x_i : i \in (n)\}$ es una función de probabilidad

gausiana univariada con media:

$$E\{Z(x) \mid Z(x_i) = z_i : i \in (n)\} = (1 - \sum_{i \in (n)} \lambda_i(x))m + \sum_{i \in (n)} \lambda_i(x)z_i$$

y varianza

$$\text{Var}\{Z(x) \mid Z(x_i) = z_i : i \in (n)\} = C(0) - \sum_{i \in (n)} \lambda_i(x)C(x-x_i)$$

donde los coeficientes $\lambda_i(x)$ son la solución del siguiente sistema de ecuaciones conocidas como ecuaciones normales o ecuaciones de kriging simple.

$$\sum_{i \in (n)} \lambda_i(x)C(x_i-x_j) = C(x-x_j) \quad \forall j \in (n)$$

Nótese que los coeficientes son funciones de la posición en la que se está evaluando la función de densidad de probabilidad condicional. Desde un punto de vista operacional, las probabilidades condicionales que aparecen en la ecuación (1) tienen que ser aproximadas de manera que sólo un subconjunto de todos los datos en los que se condiciona sea usado con el fin de facilitar su cálculo.

La probabilidad condicionada de $Z(x_N)$ dado el conjunto de datos $(N-1)$.

$$f_{N \mid (N-1)}(z_N; x_N \mid z_i; x_i : i \in (N-1))$$

será aproximada por

$$f_{N|(n)}(z_N; x_N | z_j; x_j : j \in (n) \subset (N - 1))$$

donde del conjunto $(N - 1)$ se ha elegido el subconjunto (n) , siendo $n \ll N - 1$. De todos los posibles subconjuntos de $(N - 1)$ de tamaño n hay que seleccionar aquél que aproxime mejor la fdp condicionada $f_{N|(N-1)}(z_N; x_N | z_i; x_i : i \in (N - 1))$.

En la mayoría de los casos, el subconjunto de n datos que proporciona la mejor aproximación de la fdp condicional $f_{N|(N-1)}(z_N; x_N | z_i; x_i : i \in (N - 1))$ está constituido por los puntos más "próximos" a $Z(x_N)$, donde la proximidad está medida en términos del variograma. En la selección de estos puntos también hay que tener en cuenta si están agrupados en cuyo caso es mejor retener un sólo punto de cada grupo y buscar otros puntos en zonas donde no hay grupos aunque estén más alejadas.

En la práctica se seleccionan los puntos que caen dentro de un vecindario de búsqueda. Este vecindario se define como el elipsoide homotético al elipsoide de anisotropía del variograma centrado en el punto x_N en el que se está efectuando la estimación. Los puntos más "próximos" se definen en función del variograma $\gamma(h)$, en lugar de en función de la distancia euclídea $|h|$. Al mismo tiempo se define un máximo de puntos a retener por cada octante del elipsoide (cuadrante de elipse si la simulación es en dos dimensiones). Un ejemplo de este procedimiento puede observarse en la figura 8, en el que se define un máximo de dos puntos retenidos por cuadrante. En el cuadrante I, es preferible elegir el dato a al dato b (más próximo en el espacio euclídeo) porque el valor del variograma $\gamma(x_a - x_N)$ es menor que el de $\gamma(x_b - x_N)$. En el cuadrante II, hay sólo un dato que es retenido. En el cuadrante III, los datos más próximos a x_N son elegidos. Y en el cuadrante IV hay un grupo de datos de los que sólo los dos más próximos son elegidos. Nótese que debido a la redundancia entre los datos del cuadrante IV, es preferible elegir el único dato en el cuadrante II aunque esté a una distancia superior que el resto de los no elegidos del cuadrante IV.

El uso de un vecindario de búsqueda implica que el conjunto de realizaciones generadas sólo reproducirán los variogramas hasta una distancia igual a las dimensiones del elipsoide de búsqueda. Por esto se recomienda que las dimensiones del elipsoide de búsqueda sean mayores o iguales que los rangos de los variogramas.

4. APLICACION AL CASO DE ESTUDIO

4.1. Introducción

De acuerdo al procedimiento de trabajo establecido en el capítulo anterior, se tendrían los siguientes pasos:

1. Generación de un número N suficientemente largo de campos de permeabilidad condicionales a los datos. Por ejemplo $N = 100$.
2. Evaluación del tiempo de viaje mediante la resolución de los modelos matemáticos de flujo y transporte en cada campo de permeabilidad.
3. Construcción de la fdp del tiempo de viaje a partir de los 100 valores obtenidos. Obtención del tiempo de viaje mínimo.

El paso 2 es claramente el más tedioso y aquél que encarece el procedimiento de trabajo. Una posible simplificación consistirá en definir una cierta función de conectividad o conexión espacial Θ de los valores altos de permeabilidad; es evidente entonces que un valor alto de Θ debe ir necesariamente asociado a un valor bajo del tiempo de viaje. Por tanto el procedimiento quedaría:

1. Generación de $N = 100$ campos de permeabilidad.
2. Obtención del "peor" campo de permeabilidad: es decir, aquél que presenta una mayor conectividad Θ de valores altos de permeabilidad y por tanto un tiempo de viaje mínimo.
3. Obtención del tiempo de viaje mínimo, resolviendo un sólo modelo de flujo y transporte sobre el campo de permeabilidad obtenido en 2.

Este es el procedimiento que se adoptó en el presente trabajo y que se detalla a continuación. Una simplificación adicional, no necesaria en la práctica real, consistió en reducir el número $N = 100$ a $N = 9$ en el paso 1.

4.2. Simulación secuencial condicional de la permeabilidad

Un número $N = 9$ de campos de permeabilidad fueron finalmente generados con un total de 40×40 valores simulados en cada campo. (Figuras 9 a 17). Todos los mapas cumplen los requisitos establecidos en 3.3.:

- Los datos de permeabilidad medidos son reproducidos.
- La variabilidad espacial observada en los datos y cuantificada por el variograma es reproducida.
- La función de distribución acumulativa es suficientemente bien reproducida.

En particular, es interesante observar que todas las realizaciones o mapas reproducen perfectamente el bandeo en la dirección $N 57^\circ W$ de máxima continuidad espacial. Asimismo el área de alta permeabilidad en el borde NE del acuífero (Fig. 3) ha sido también reproducido en las 9 realizaciones.

4.3. Cuantificación de la conectividad espacial

Para la cuantificación de la conectividad espacial de valores altos de permeabilidad se diseñó un procedimiento similar formalmente al descrito para valores bajos de permeabilidad por Journel y Alabert (1987).

Esencialmente el procedimiento hace uso de las propiedades de la variable indicador $I(u; Z_h)$ descrita como sigue:

$$I(u; Z_h) \begin{cases} = 1 & \text{si } z > Z_h \\ = 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

De esta forma la conectividad entre dos puntos se definiría como:

$$E \{ I(u; Z_h) \cdot I(u+h; Z_h) \} = P(Z(u) > Z_h, Z(u+h) > Z_h)$$

De manera similar la conectividad entre n puntos en una dirección particular vendrá descrita por el valor esperado del producto de n variables indicador:

$$\Theta(h; n) = E \{ \cap_{j=1}^n (u + (j-1)h; Z_h) \} \quad (3)$$

La dirección en que la conectividad de valores altos Θ debe ser determinada es la dirección del flujo de agua subterránea. Esta dirección es determinada aproximadamente como perpendicular al río en el caso de estudio, teniendo en cuenta el gradiente hidráulico y los ejes principales del tensor permeabilidad.

El valor umbral Z_h utilizado para definir lo que se entiende por valor alto de permeabilidad es el valor cuya probabilidad de no ser rebasado es el 90%. (Fig. 4 y 5). Dicho valor resultó ser $Z_h = 75$ mD.

La evolución de Θ de acuerdo a (3) se efectuó para valores de n desde 1 a 10, esto es, se evaluó la probabilidad de encontrar hasta 10 celdas contiguas con valor de permeabilidad superior a 75 mD en la dirección del flujo. La Figura 18 muestra como la realización 9 es la de mayor conectividad de valores altos de permeabilidad y por tanto la que proporcionará un tiempo de viaje mínimo.

4.4. Determinación del tiempo de viaje mínimo

Una vez identificado el mapa de permeabilidad que proporcionará el tiempo de viaje mínimo, es necesario calcularlo por medio del correspondiente modelo matemático de flujo y transporte.

El modelo matemático empleado en este trabajo es el USGS - 2D (Konikow y Bredehoeft, 1978) descrito sucintamente a continuación, pues es suficientemente conocido por la comunidad hidrogeológica. El modelo utiliza el método de las características para resolver la ecuación diferencial de advección-dispersión en dos dimensiones (2D).

El modelo resuelve en primer lugar la ecuación de flujo en 2D:

$$\frac{\partial}{\partial X_i} \left(T_{ij} \frac{\partial h}{\partial X_j} \right) = S \frac{\partial h}{\partial t} + W \quad ij = x, y \quad (4)$$

donde T_{ij} es el tensor de transmisividad, h es el nivel piezométrico, S el coeficiente de almacenamiento y W el volumen de agua por unidad de área, en fuentes o sumideros del acuífero.

Una vez resuelta esta ecuación, la velocidad es calculada en cada celda como:

$$V_x = - \frac{K_{xx}}{n} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right); V_y = - \frac{K_{yy}}{n} \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right) \quad (5)$$

Para la resolución de (4) y (5) el modelo emplea fórmulas en diferencias finitas. A continuación se acomete la resolución de la ecuación de advección - dispersión en 2D:

$$\frac{\partial}{\partial t} (bC) = \frac{\partial}{\partial X_i} (bD_{ij} \frac{\partial C}{\partial X_j}) - \frac{\partial}{\partial X_i} (bCV_i)$$

$$-C'W/n \quad i, j = x, y \quad (6)$$

donde C es la concentración del soluto en estudio, D_{ij} el coeficiente de dispersión, n la porosidad y $C'W/n$ representa el término correspondiente a fuentes/sumideros.

Para la resolución de (6), se introducen al comienzo de la simulación un cierto número de partículas de concentración dada en cada celda. Para representar la componente advectiva de (6) estas partículas son movidas con la velocidad del flujo dada por (5) en cada paso de tiempo.

Se calcula así una nueva concentración en cada celda al final de cada paso tiempo, por simple media aritmética de la concentración de las partículas presentes en la celda. A continuación se resuelve una ecuación de transporte puramente dispersivo, empleando una fórmula en diferencias finitas explícita. Finalmente se obtiene la nueva concentración de cada partícula al final de un paso de tiempo como suma del valor previo (al final del proceso colectivo) y el cambio en concentración calculado en la celda en consideración durante el proceso dispersivo.

A continuación se hace mención de los parámetros del acuífero y modelo más relevantes, así como de la condición inicial empleada:

Parámetros del acuífero

Porosidad = 20% ; Espesor Saturado = 75 m

$\alpha_L = 40$ m ; $\alpha_T = 5$ m

Permeabilidad: Los valores obtenidos por simulación secuencial condicional (Fig. 18), multiplicados por 10^3 .

Parámetros del modelo

Tamaño de celda = $500 \times 500 \text{ m}^2$; N° de celdas = 40×40 .

N° de partículas por celda = 4.

Máxima distancia viajada por paso de tiempo: 50% del tamaño de la celda.

Condición Inicial

Al asumirse un régimen permanente para el problema de flujo, no es preciso especificar un nivel piezométrico inicial. Por el contrario (6) precisa de una concentración inicial sobre todo el acuífero al comienzo de la simulación, para ser resuelta. Esencialmente, se define una distribución de concentración simétrica alrededor de la celda ($x=2$, $y=12$) en donde la fuente contaminante está localizada. En esta celda se define un valor de 300 ppm.

Para la obtención del tiempo de viaje del soluto contaminante así como su concentración máxima y la localización donde alcanzará al río, se disponen en el modelo cinco sondeos de observación ficticios a lo largo del río ($y=4, 12, 20, 28$ y 36 ; $x=38$).

El modelo proporciona una histórica concentración/tiempo en cada celda. El análisis de estas históricas pone de manifiesto que la pluma contaminante alcanzará al río (figura 20):

- En un tiempo de viaje mínimo de prácticamente un año (348 días).
- Cerca de la localización $x = 38$ y $y = 12$ (No se detectó soluto en ninguna otra de las localizaciones de control).

- Con una concentración máxima de 110 ppm, superior por tanto al límite aceptable.

De acuerdo a estos resultados, el gestor de recursos hídricos deberá diseñar una estrategia con medidas correctoras (por ejemplo, establecimiento de pozos de extracción, etc) que palíen la contaminación producida en el acuífero.

5. REFERENCIAS

- Anderson, T., 1958. An Introduction to Multivariate Statistical Analysis. Wiley and Sons, 374 p.
- Gómez, J.J., 1991. Geoestadística para el Análisis de Riesgos. ENRESA. Publicación Técnica Num. 04/91.
- Journel, A., 1989. Fundamentals of Geostatistics in Five Lessons. Volume 8 of Short Courses in Geology. AGU, Washington D.C.
- Journel, A. y F. Alabert, 1987. Non-Gaussian Data Expansion in the Earth Sciences. Terra Nova 1 (2): p. 123-134.
- Konikow, L.F. y J.D. Bredehoeft, 1978. Computer Model of Two Dimensional Solute Transport and Dispersion in Groundwater. Techniques of Water Res. Inv. Book 7, Chapter C-2.
- Mayor, J.C., 1990. Selecting an Unfavourable Aquifer Model. Stanford Center for Reservoir Forecasting. Report 3. Stanford University.

FIGURAS

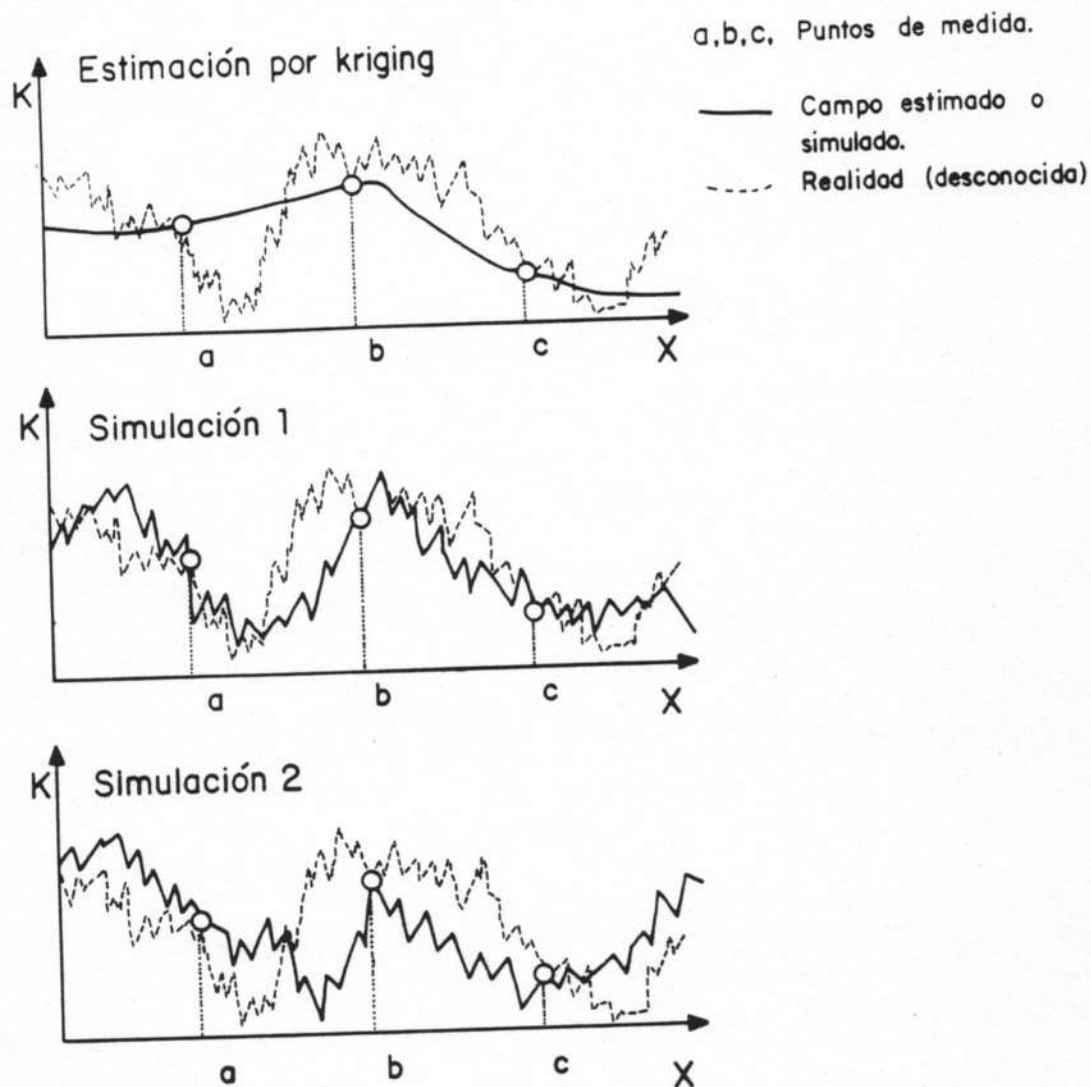


Fig. 1. Estimación frente a simulación. Dados tres valores de permeabilidad en las posiciones a, b y c, la figura muestra un campo obtenido por Kriging y dos campos simulados. Las tres figuras tienen en común que reproducen los datos, ahora bien el campo estimado por Kriging muestra una variabilidad muy pequeña y lejana de la variabilidad que tiene el campo de permeabilidad real; en cambio, los campos generados por simulación guardan un mayor parecido a la realidad.

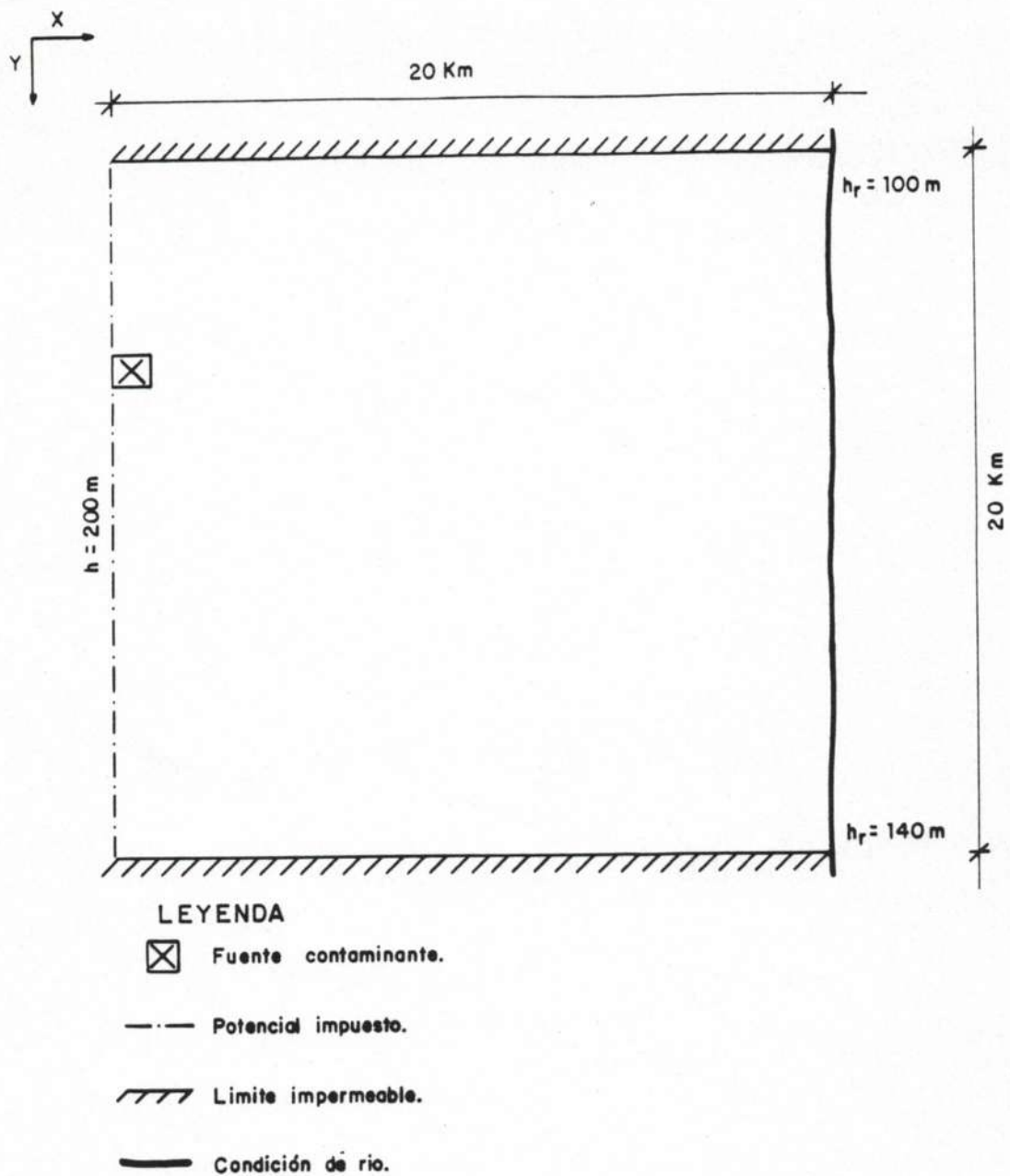


Fig. 2. Geometría y condiciones de contorno del acuífero.

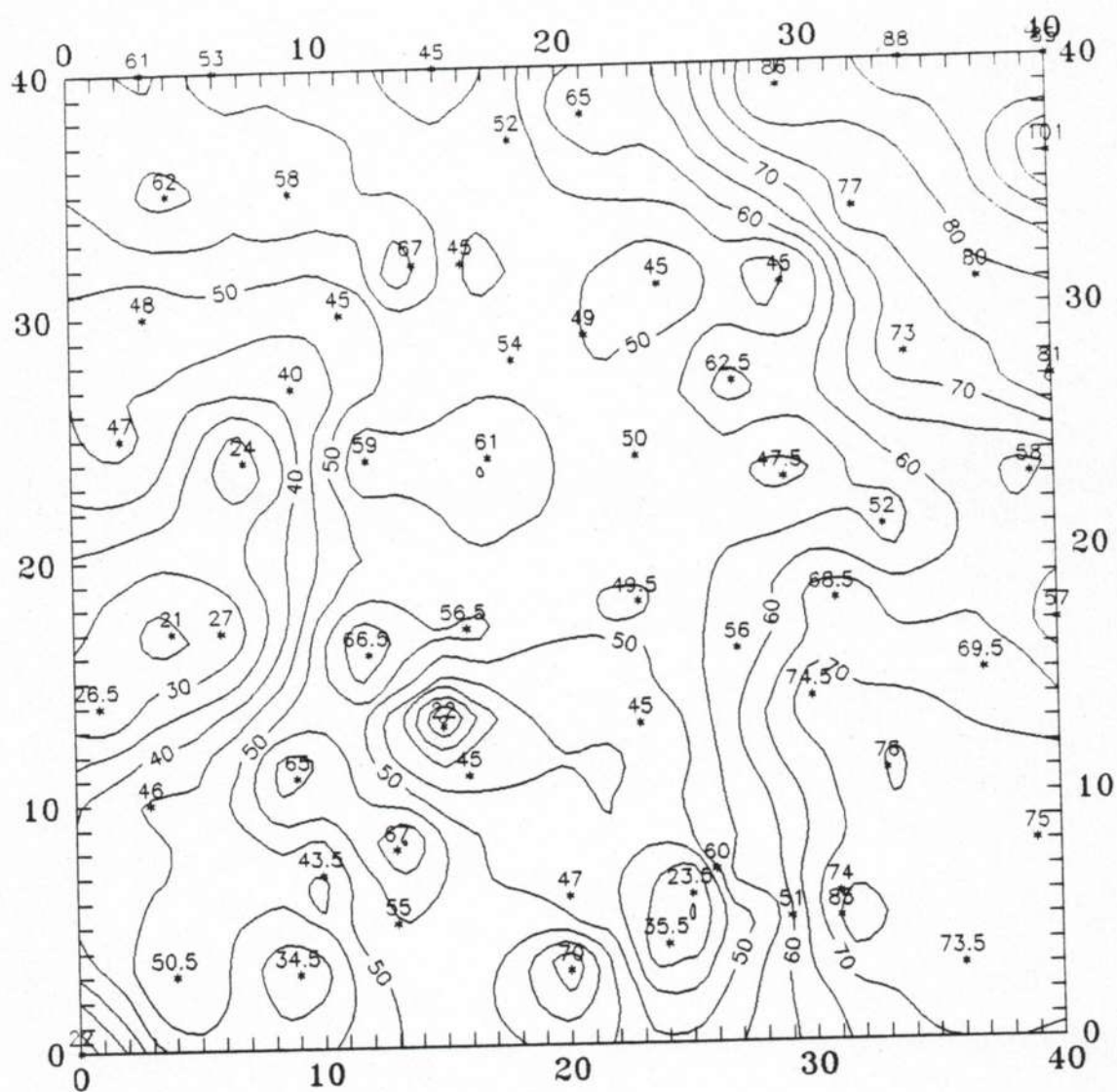


Fig. 3. Mapa de permeabilidad (mDarcy).

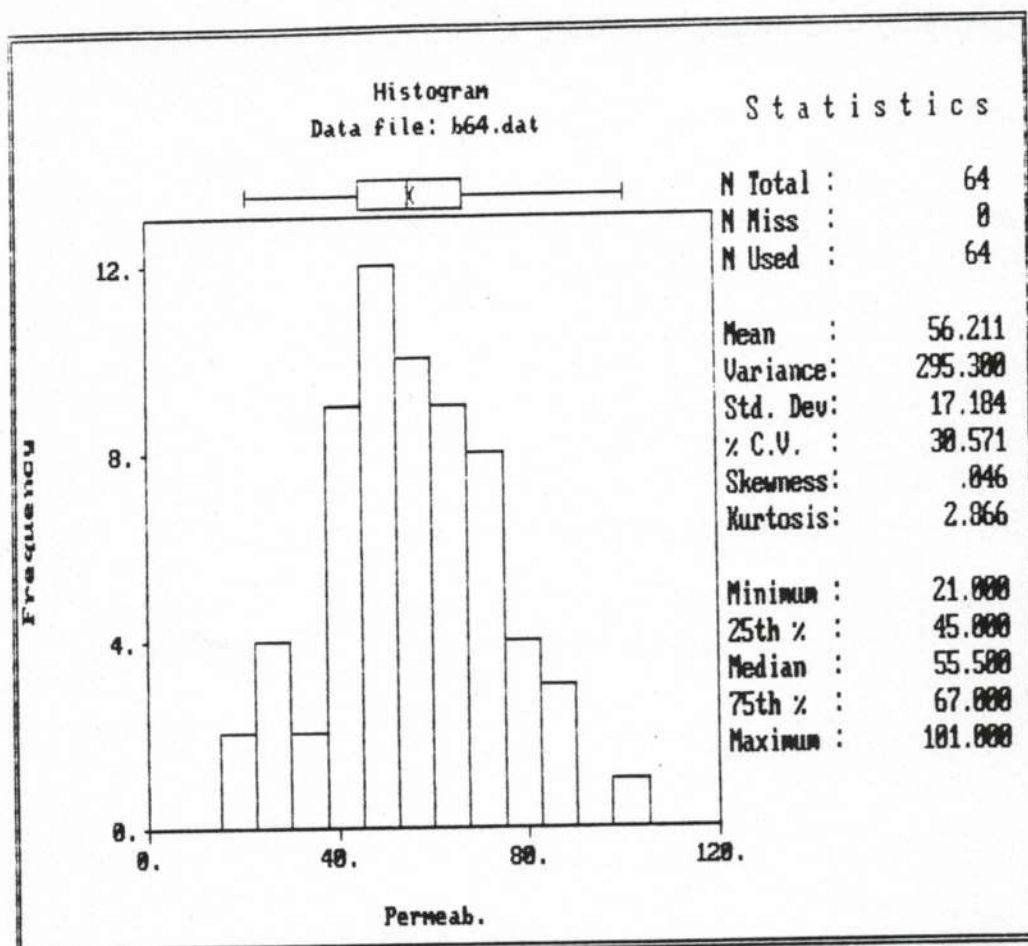


Fig. 4. Histograma de la permeabilidad (mDarcy).

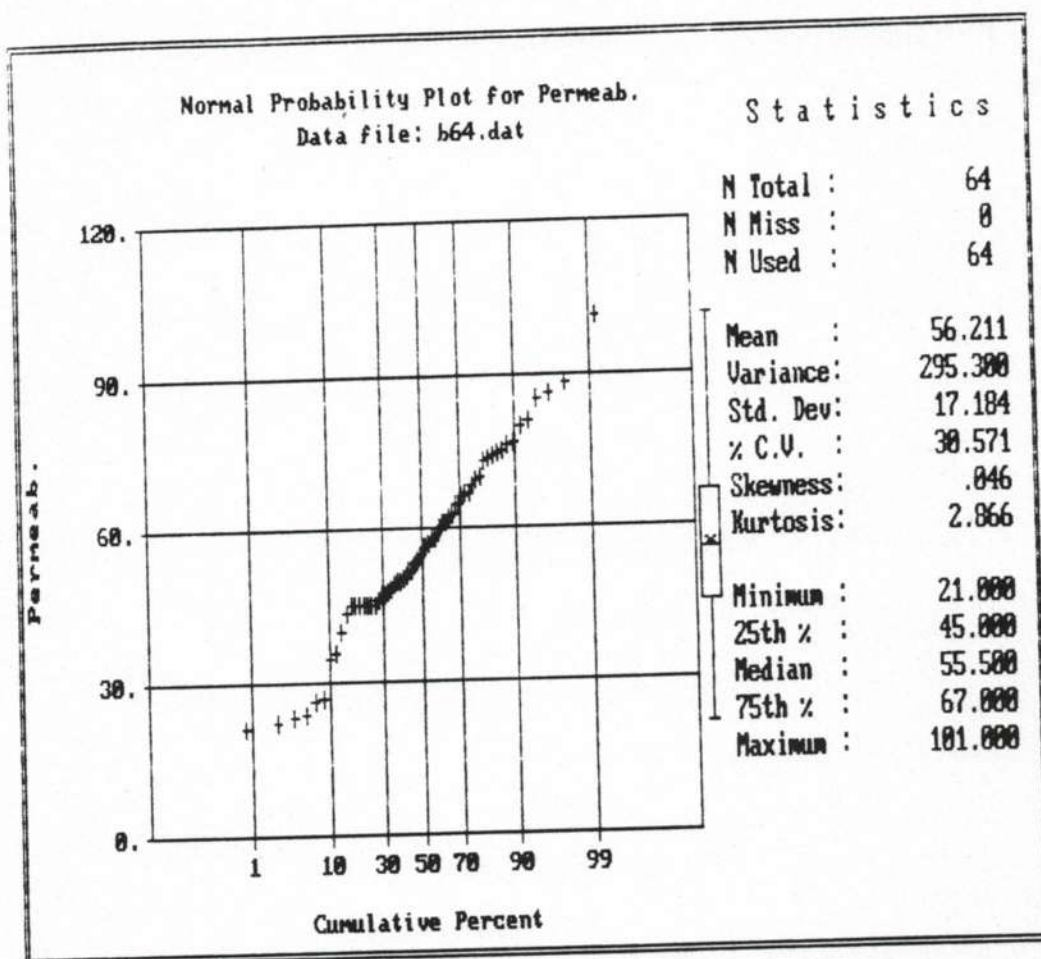


Fig. 5. Función de distribución acumulada de la permeabilidad (mDarcy).

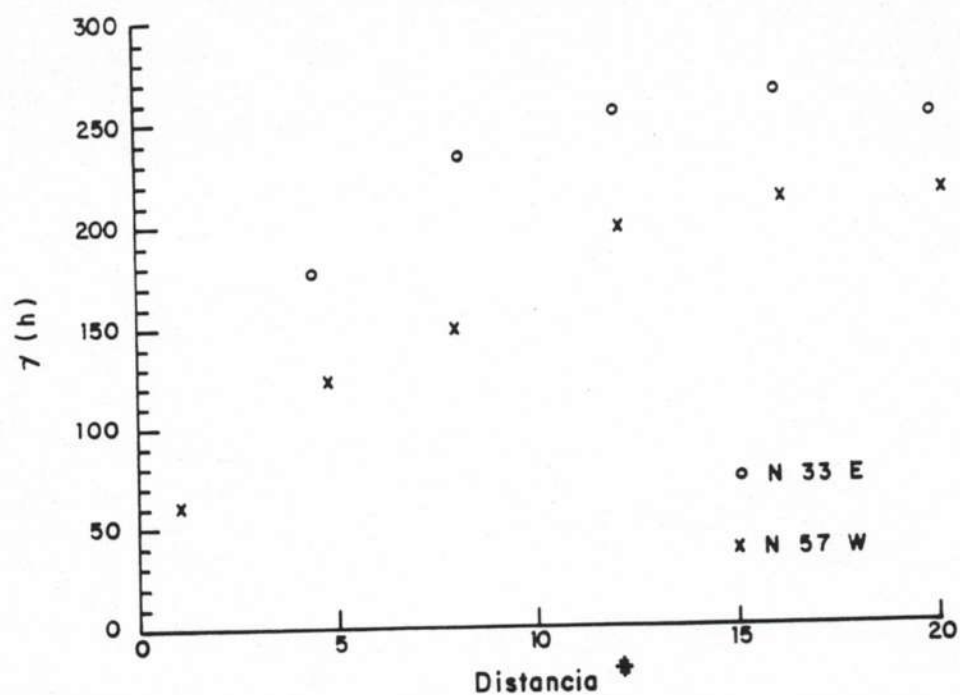


Fig. 6a. Variogramas direccionales experimentales (64 datos).

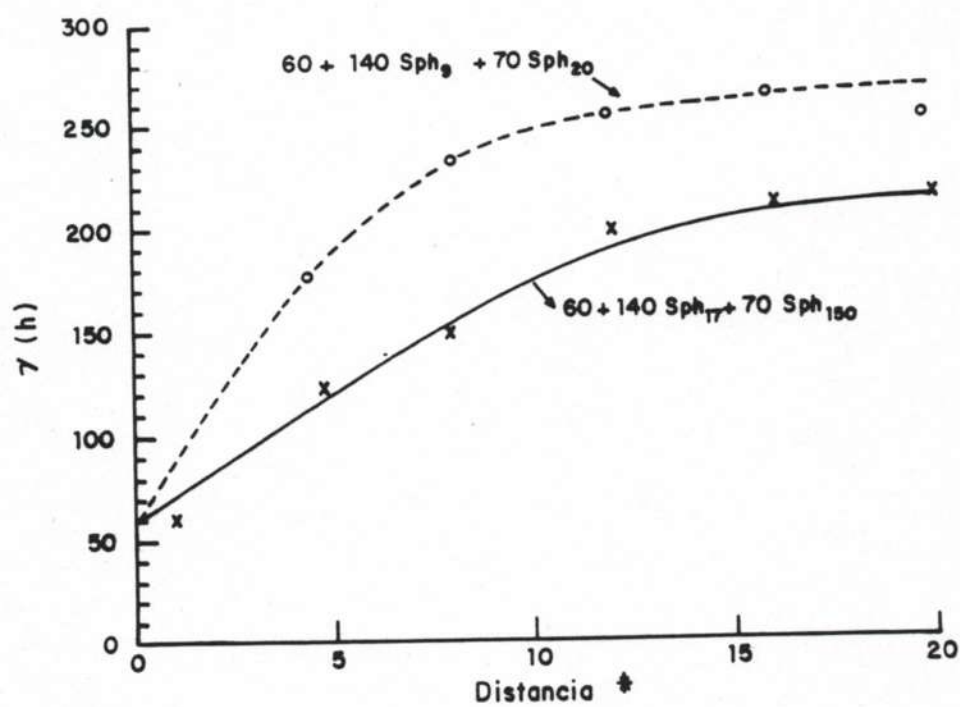


Fig. 6b. Modelos de variogramas direccionales ajustados.

* Distancia en unidades equivalentes a celdas del modelo matemático de flujo y transporte (longitud celda = 500 m.).

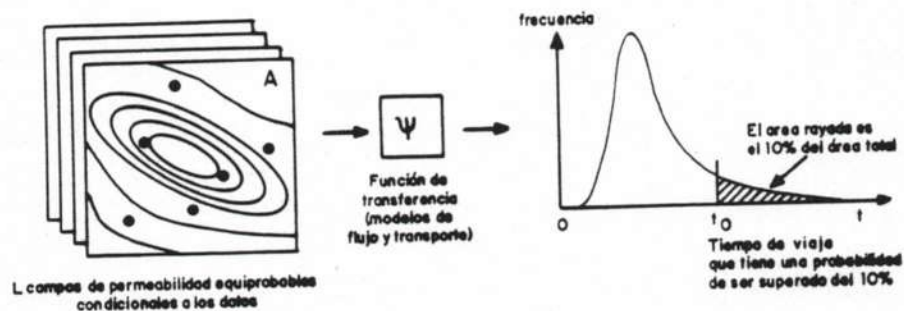


Fig. 7. Modelo de incertidumbre de una variable de respuesta compleja.

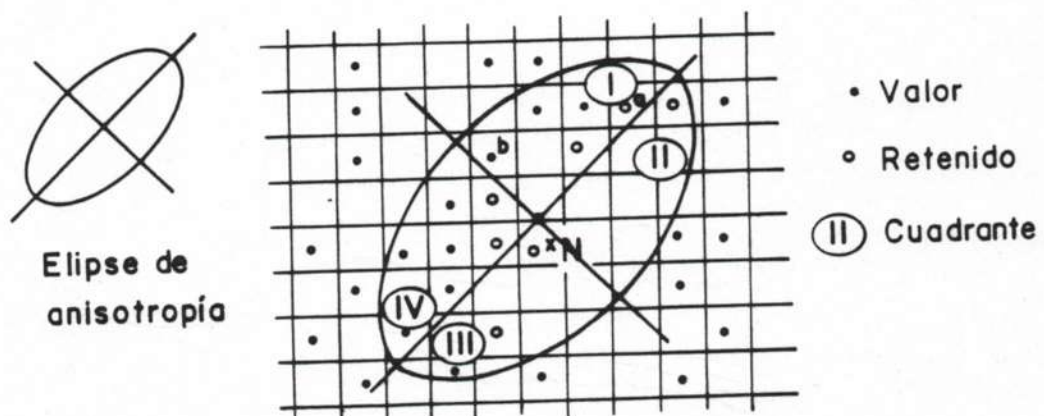


Fig. 8. Vecindario de búsqueda. Ejemplo de cómo seleccionar los puntos que hay que retener para estimar la función de probabilidad condicionada de $Z(X_N)$ cuando el número de puntos disponibles es grande.

Fig. 9. SIMULACION 1.

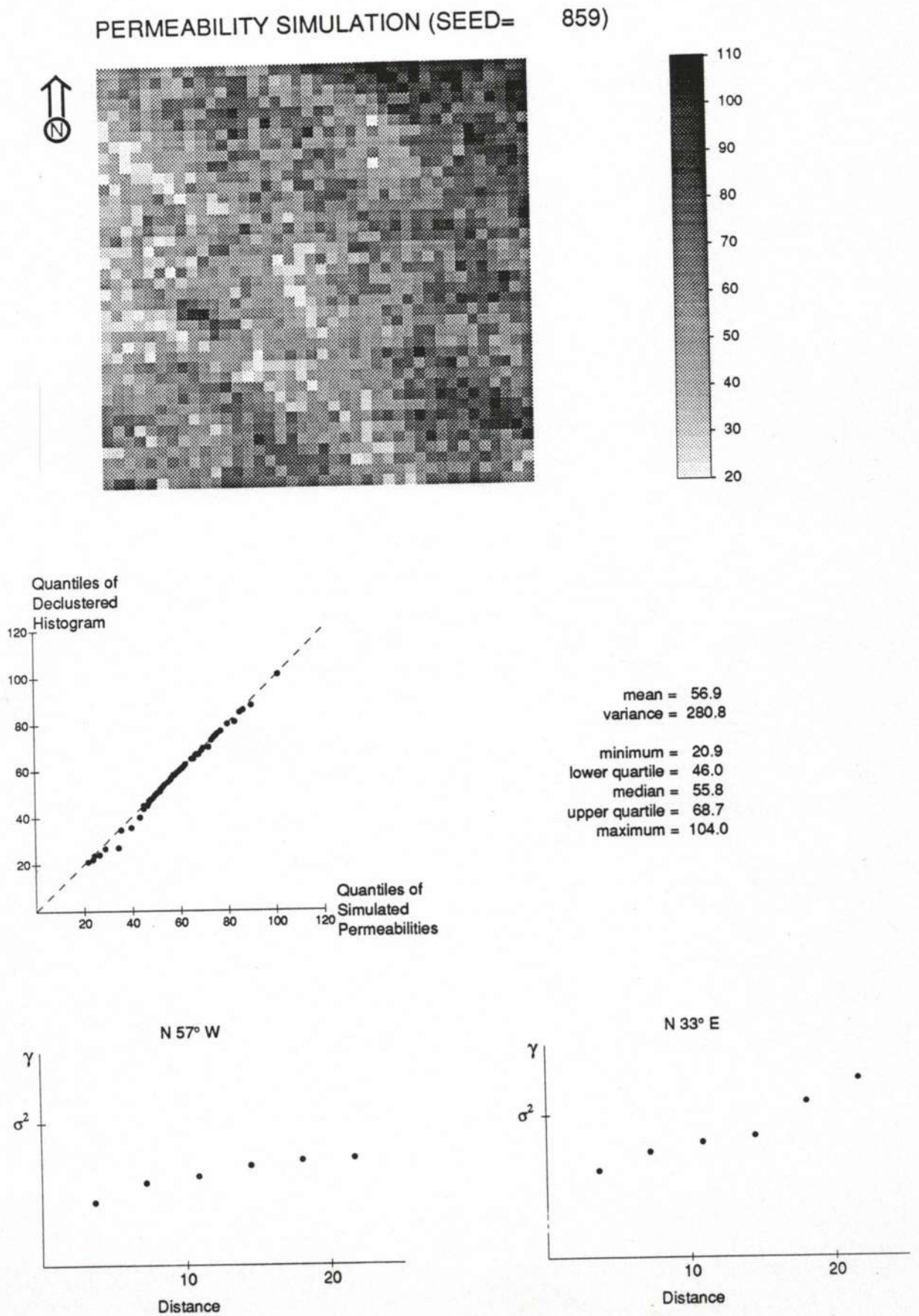


Fig. 10. SIMULACION 2.

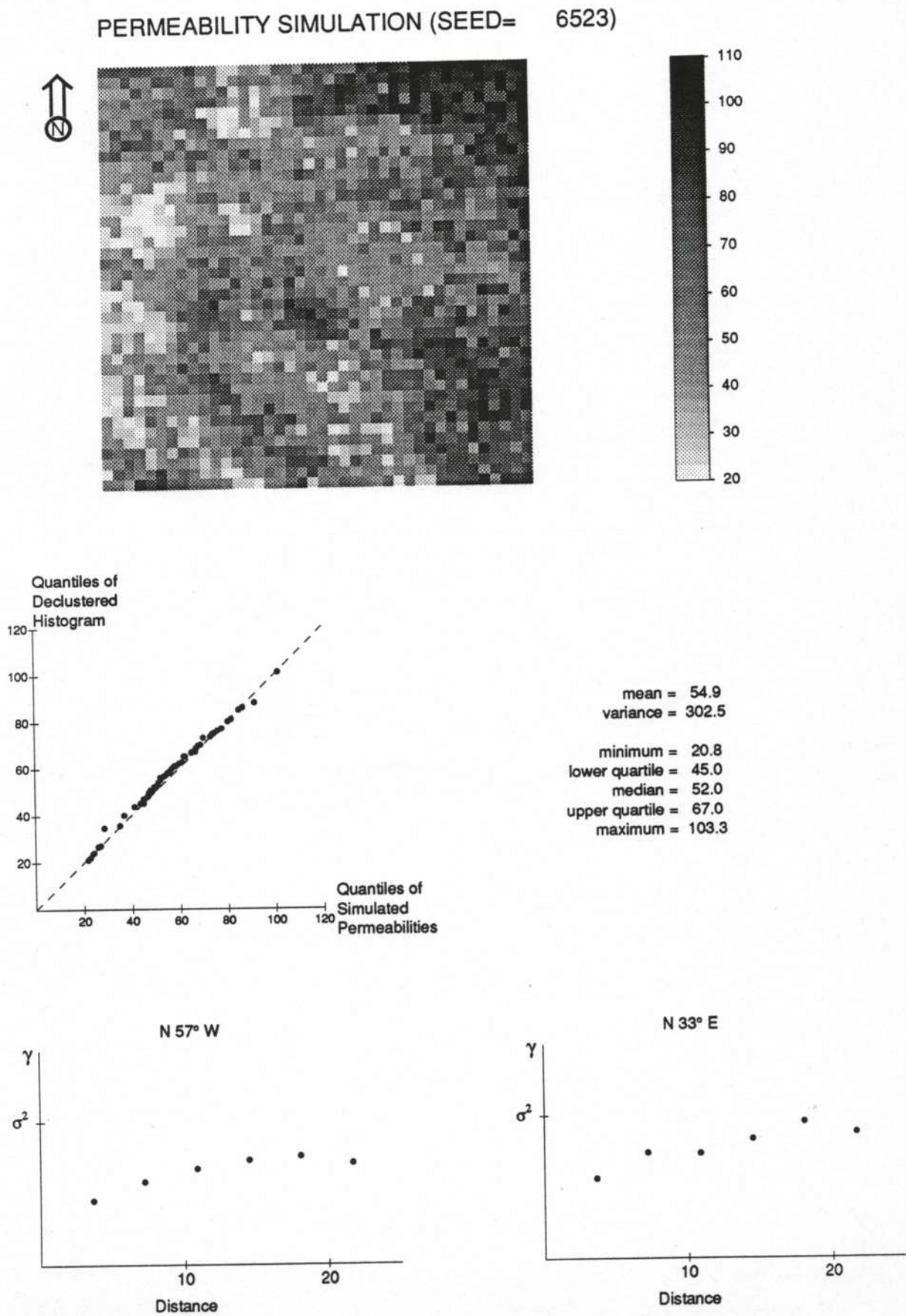
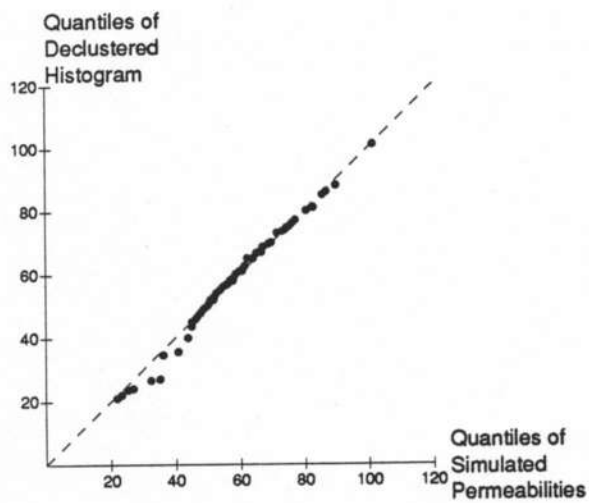
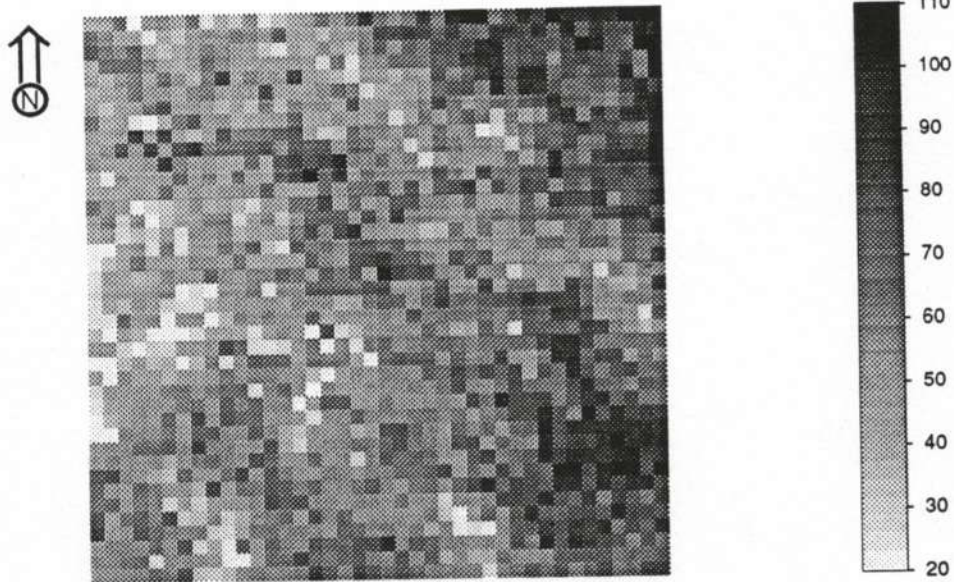


Fig. 11. SIMULACION 3.

PERMEABILITY SIMULATION (SEED= 4531)



mean = 56.4
variance = 269.0
minimum = 21.0
lower quartile = 45.0
median = 54.1
upper quartile = 67.0
maximum = 105.3

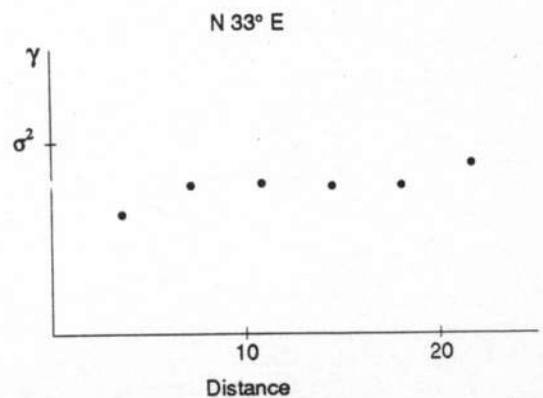
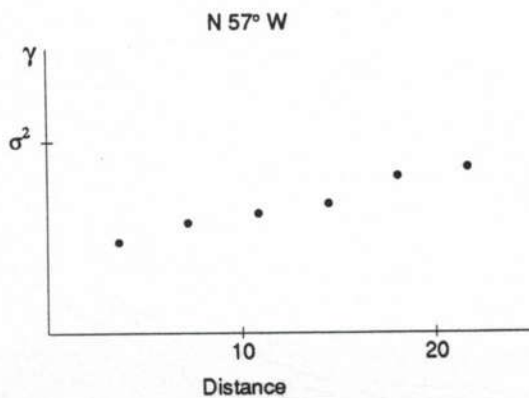
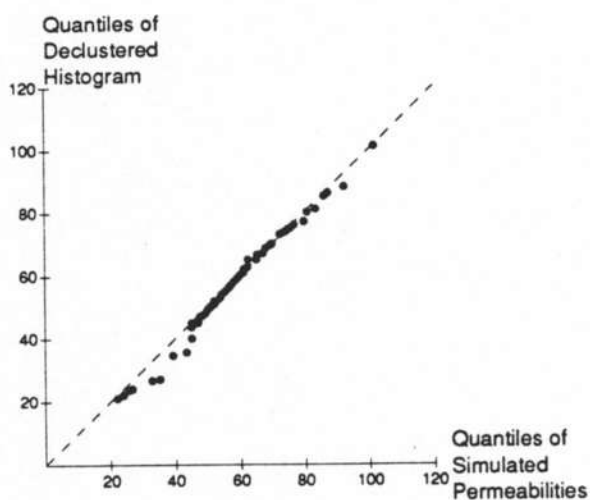
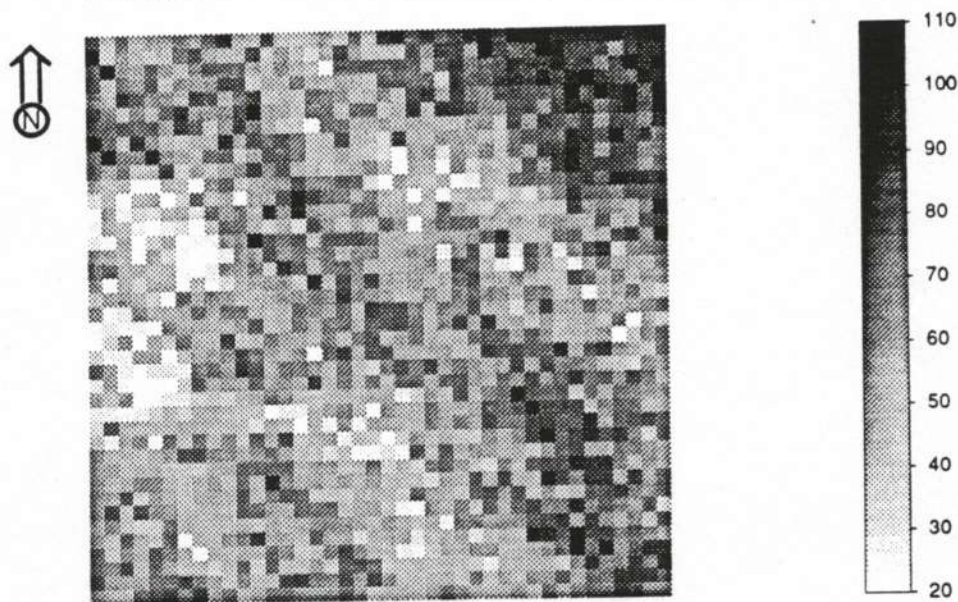


Fig. 12. SIMULACION 4.

PERMEABILITY SIMULATION (SEED= 8906)



mean = 57.1
variance = 267.7

minimum = 20.9
lower quartile = 46.5
median = 55.8
upper quartile = 67.0
maximum = 102.8

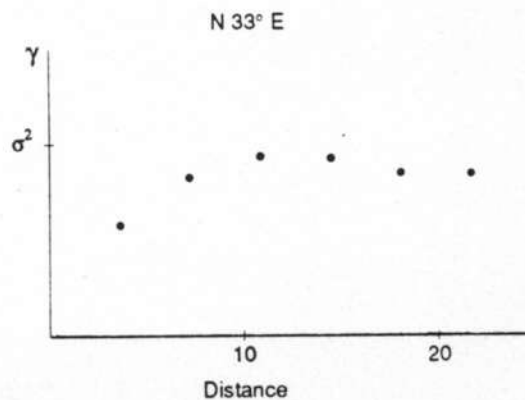
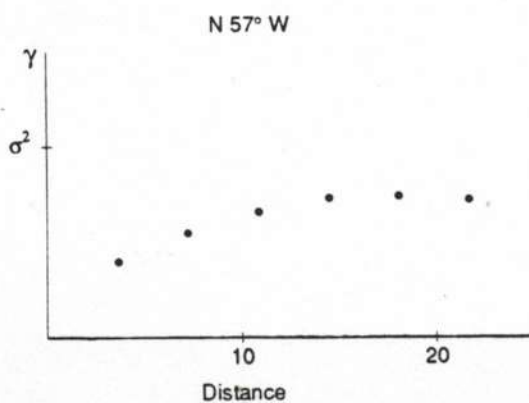
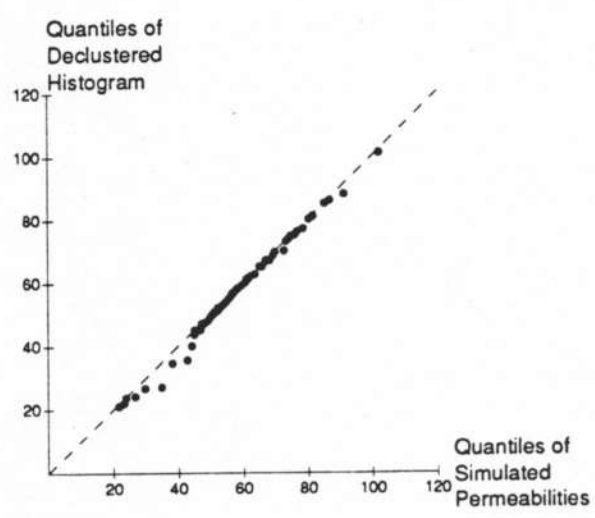
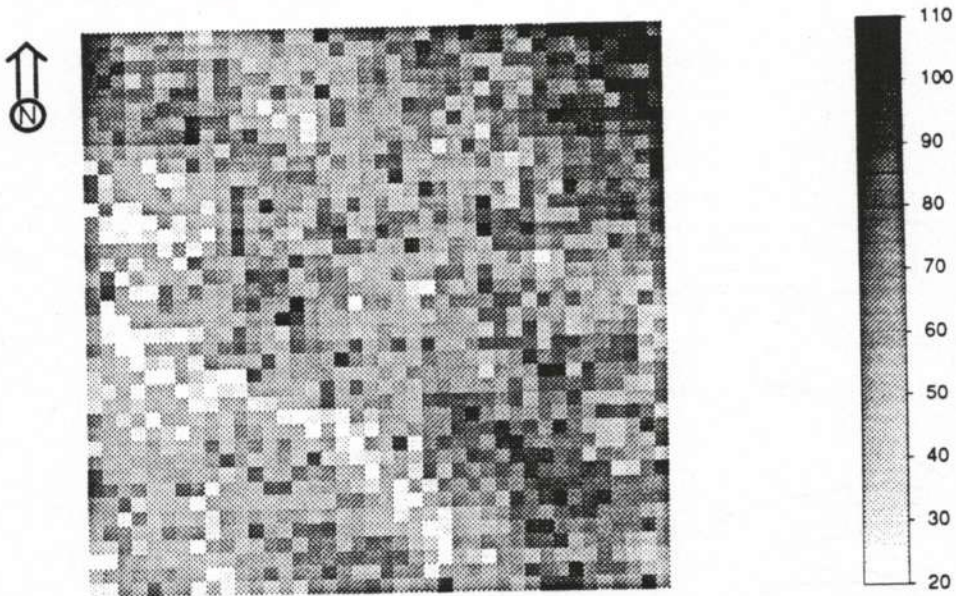


Fig. 13. SIMULACION 5.

PERMEABILITY SIMULATION (SEED= 8945)



mean = 57.2
 variance = 277.5

 minimum = 20.9
 lower quartile = 46.1
 median = 56.1
 upper quartile = 68.8
 maximum = 104.5

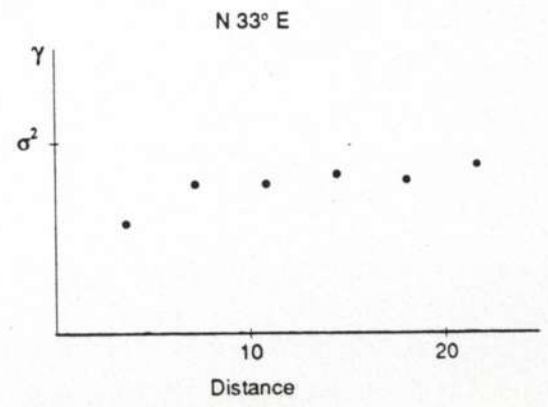
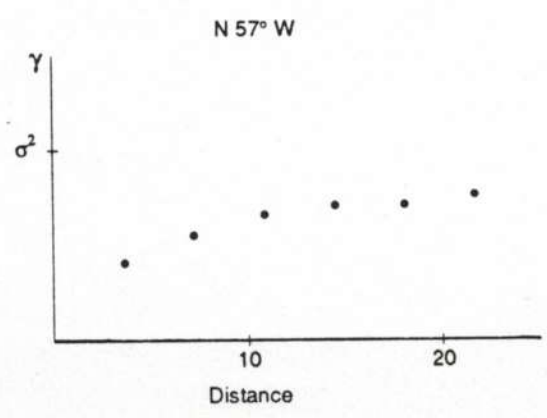
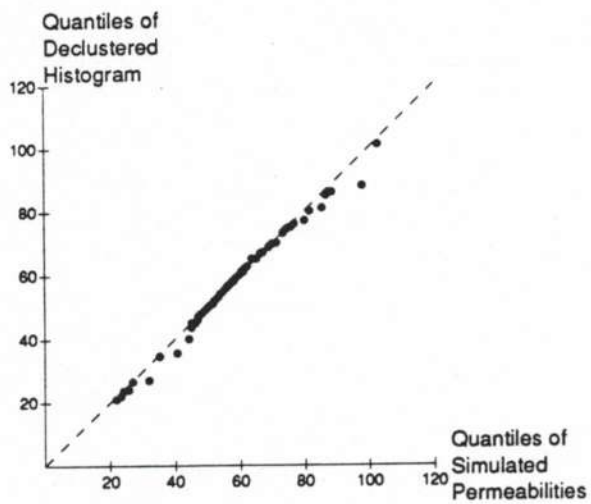
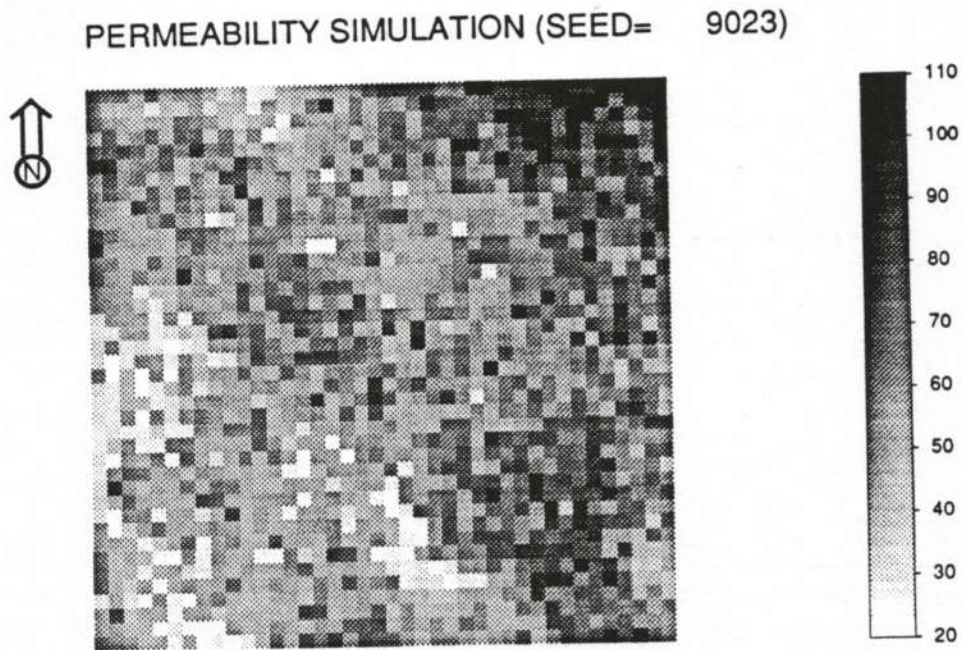


Fig. 14. SIMULACION 6.



mean = 57.0
variance = 300.7

minimum = 20.9
lower quartile = 46.0
median = 55.3
upper quartile = 67.6
maximum = 103.8

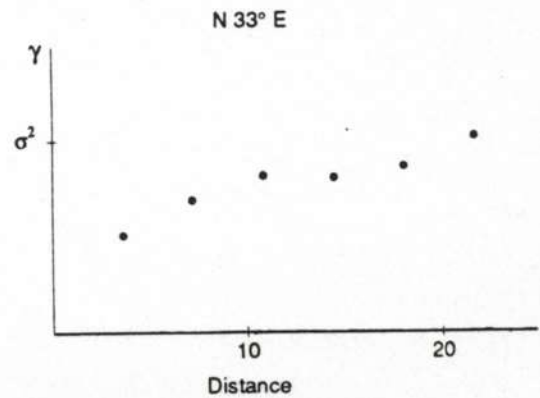
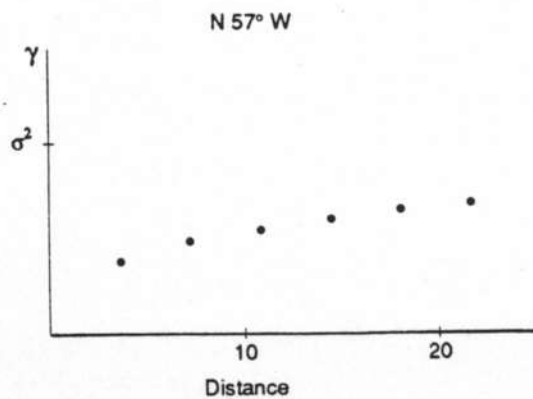
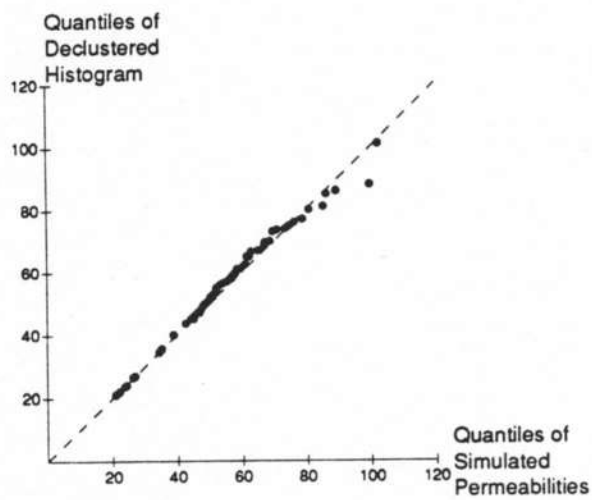
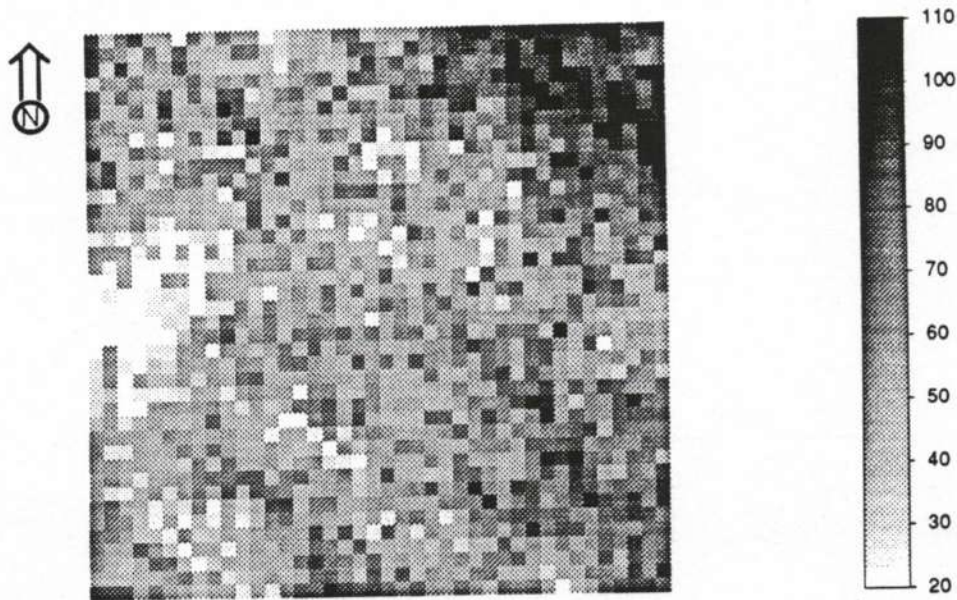


Fig. 15. SIMULACION 7.

PERMEABILITY SIMULATION (SEED= 9101)



mean = 55.5
variance = 310.0

minimum = 20.7
lower quartile = 45.0
median = 52.7
upper quartile = 66.1
maximum = 106.2

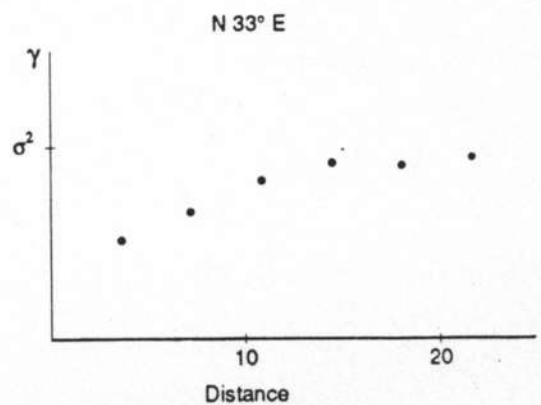
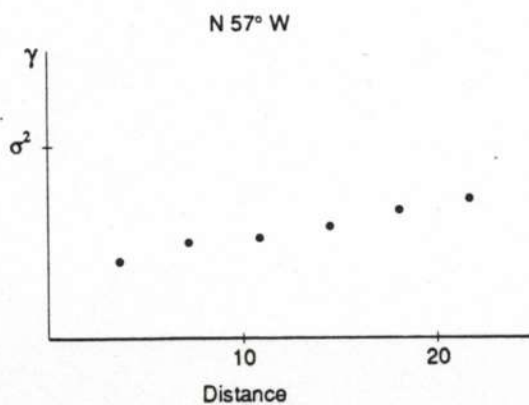


Fig. 16. SIMULACION 8.

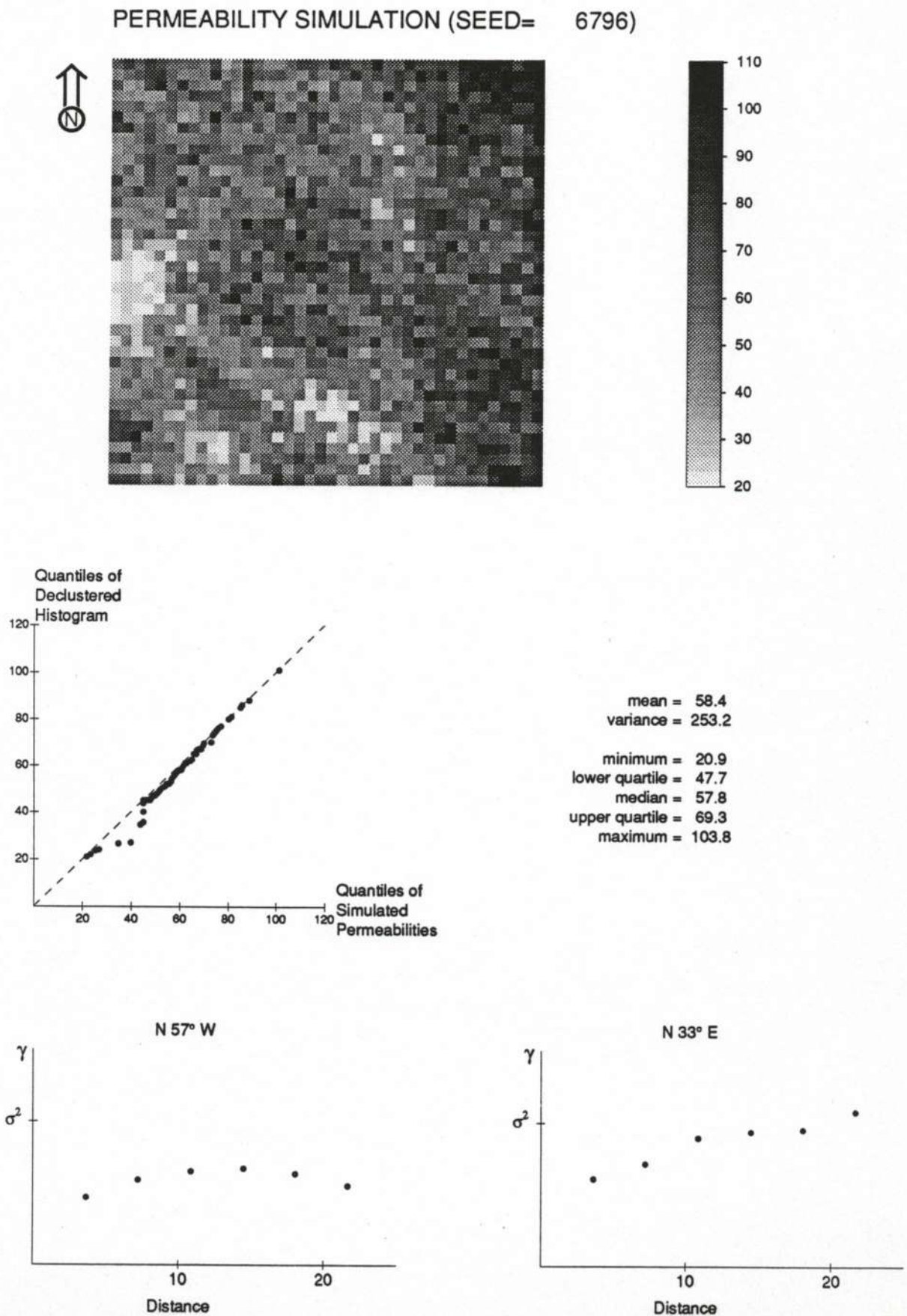
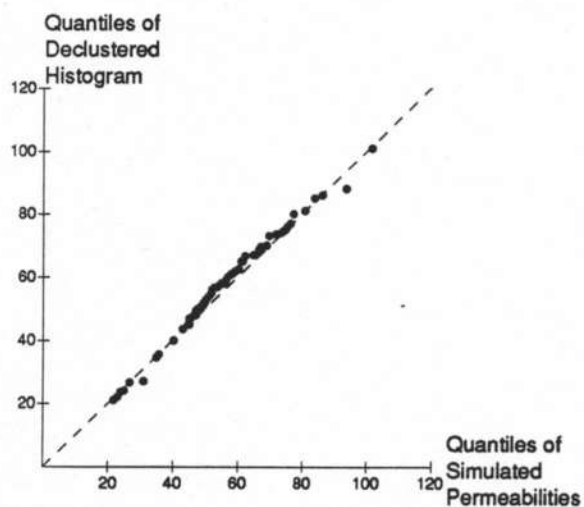
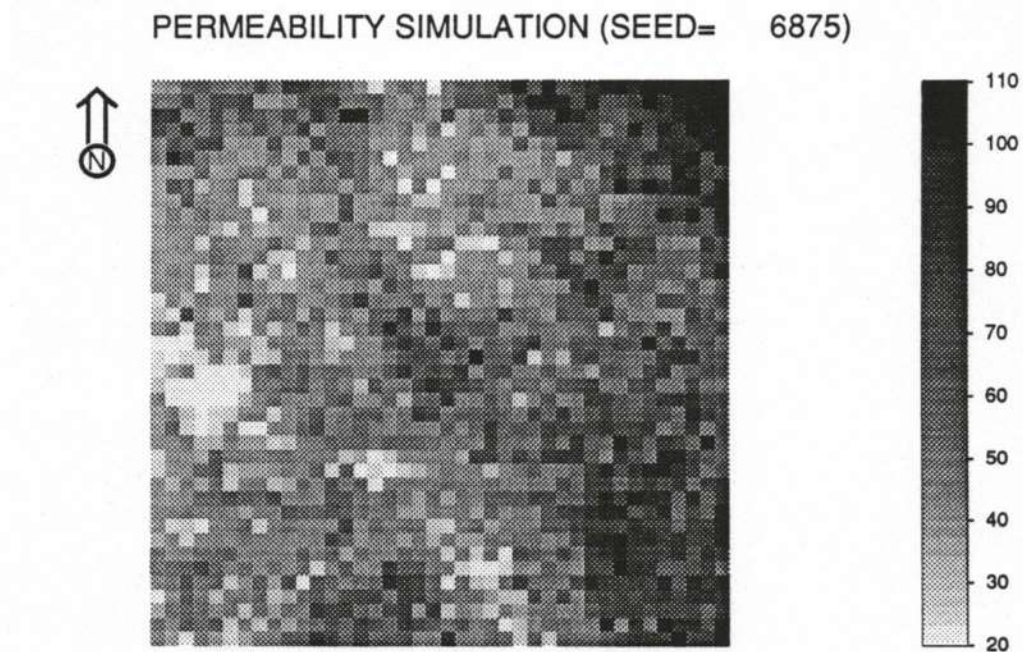
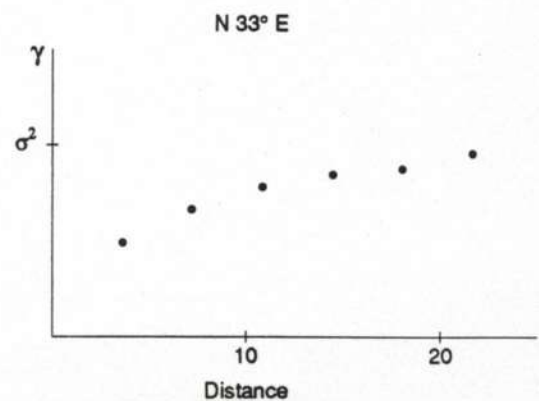
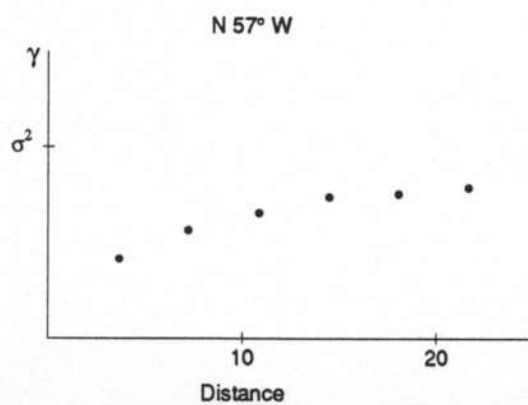


Fig. 17. SIMULACION 9.



mean = 54.9
variance = 283.1

minimum = 20.9
lower quartile = 45.0
median = 52.0
upper quartile = 65.7
maximum = 104.6



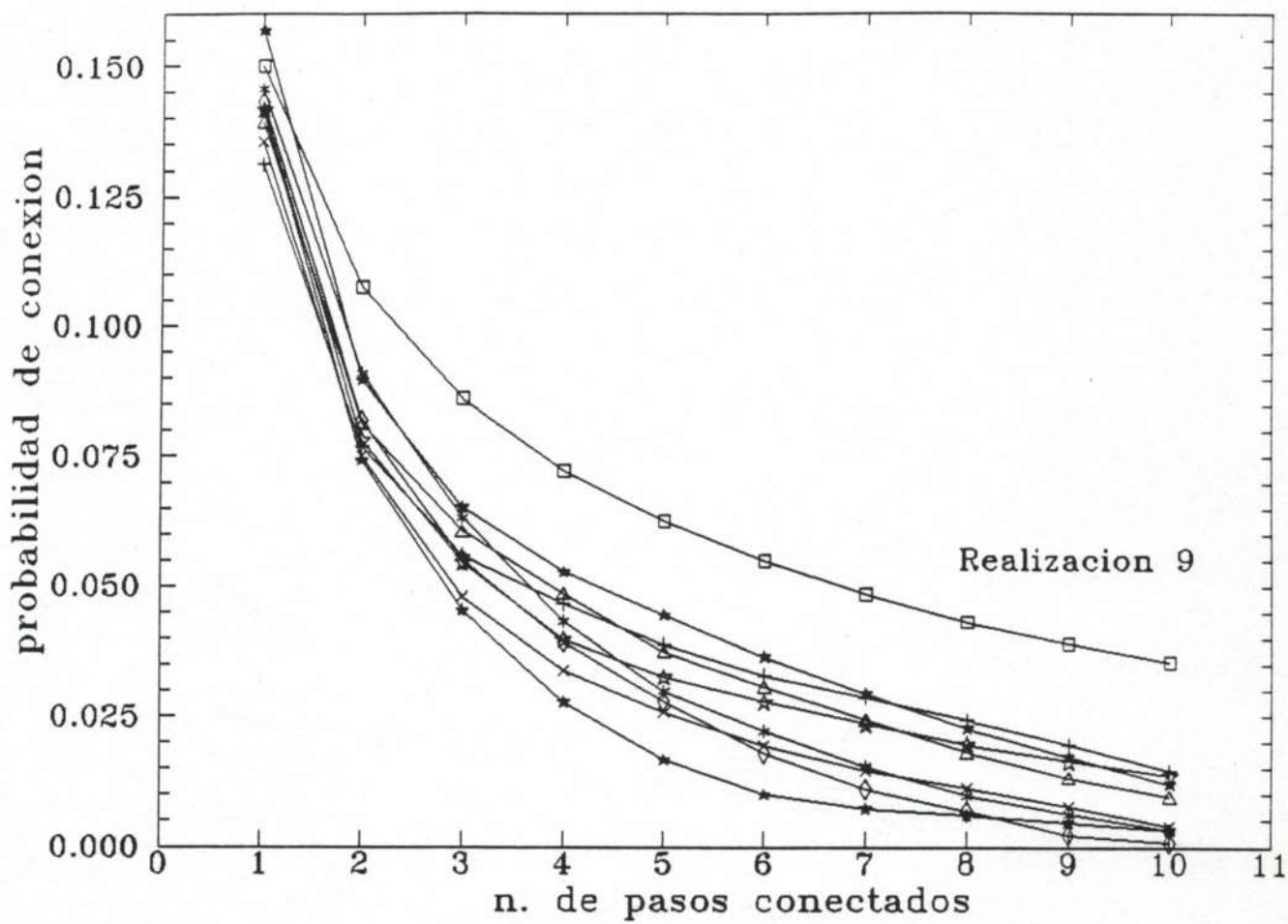


Fig. 18. Evaluación de la conectividad.

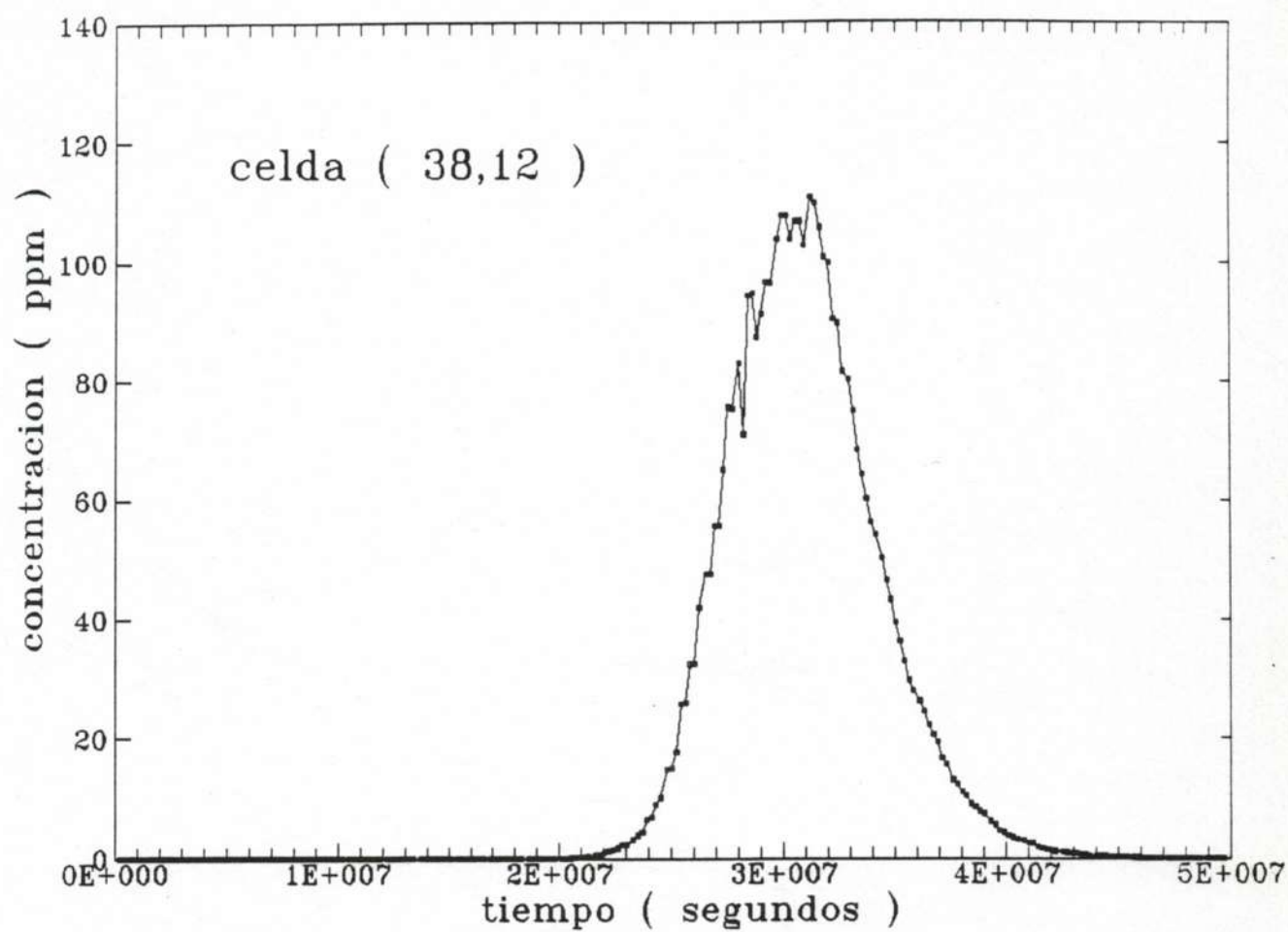


Fig. 19. Evolución de la concentración.

