

Estado del arte sobre la representación numérica de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable

J. Heredia y J.M. Murillo Díaz

Instituto Geológico y Minero de España. Sede Central. Ríos Rosas, 23. 28003-Madrid.
E-mail: j.heredia@igme.es - jm.murillo@igme.es

RESUMEN

La representación numérica de sistemas hidrogeológicos considerando la variabilidad de la densidad del fluido es un aspecto que no puede soslayarse tanto en estudios de acuíferos costeros como en muchos casos de almacenamiento profundo de residuos tóxicos peligrosos (RTP). El desarrollo de estos modelos numéricos es una labor compleja y ardua, cuyos resultados no están exentos de una apreciable incertidumbre. Ésta tiene su origen en las limitaciones numéricas de la que adolecen los distintos métodos, en la escasez de datos y en la incertidumbre característica de la información de estos sistemas. Un adecuado conocimiento del código numérico a aplicar, permitirá a los técnicos optimizar los recursos racionalizando debidamente las tareas del estudio. En el presente trabajo se realizó un estado del arte actualizado de la modelización numérica de sistemas hidrogeológicos bajo condiciones de densidad variable. Se ha realizado una revisión general de los métodos de representación, atendiendo especialmente a las técnicas numéricas y presentando los aspectos particulares que deben ser atendidos al desarrollar estos modelos numéricos. Se describieron sucintamente los códigos numéricos más destacados y se listaron los ejercicios internacionales de validación de los códigos más importantes de las dos últimas décadas, reflexionando sobre las limitaciones que arrojan sus resultados.

Palabras clave: acuíferos profundos, flujo bajo densidad variable, intrusión marina, modelos numéricos hidrogeológicos

State of the art of the numerical modelling of density-dependent hydrogeological systems

ABSTRACT

The numerical representation of hydrogeological systems, taking into account the variability of fluid density, is an aspect that should not be elude in studies of coastal aquifers or in many cases of deep-level storage of toxic waste. Developing such numerical models is a complex and demanding task, the results of which are subject to considerable uncertainty. This is due to the numerical limitations affecting the various methods applied, to the scarcity of data and to the uncertainty characteristic of the information regarding such systems. Adequate knowledge of the numerical code to be applied would enable technicians to optimise resources and rationalise study procedures. The present paper presents an updated state of the art of the numerical modelling of hydrogeological systems under variable density conditions. An overview is provided of methods of the representation, with special attention paid to numerical techniques and particular aspects involved in developing numerical models. A brief description is made of the most noteworthy numerical codes and of the leading international projects carried out over the last two decades to validate such codes, together with some comments on the inherent limitations of the obtained results.

Key words: deep aquifers, density-dependent flow, groundwater numerical modelling, sea-water intrusion

Introducción

Históricamente, la gran mayoría de los estudios hidrogeológicos han considerado que el flujo subterráneo era gobernado exclusivamente por diferencias de presiones, al considerar la densidad del fluido como constante en el dominio estudiado. Ello se podía asumir debido a que en la mayor parte de los sistemas hidrogeológicos tratados la variación de la densidad del agua en el espacio y el tiempo era tan

pequeña que podía despreciarse. Por otro lado, asumir que la densidad era constante -válida en muchos casos- simplificaba la derivación matemática del problema, introducía el concepto de un potencial de campo que gobierna el flujo y el uso de superficies potenciométricas como herramienta para analizar, representar y simular diversos procesos y fenómenos hidrogeológicos (Bachu, 1995). Sin embargo, distintos requerimientos socioeconómicos y medioambientales -algunos de los cuales se reseñarán más

adelante- han llevado a abordar los estudios de sistemas hidrogeológico sumamente complejos. En estos las propiedades más relevantes del fluido, como la densidad y la viscosidad son marcadamente variables, debido a los cambios en la salinidad, temperatura y presión. Este hecho afecta grandemente a la aproximación clásica en que el flujo estaba gobernado por la diferencia de carga hidrostática entre un punto y otro del sistema de flujo. Así, para el caso de un medio poroso, resulta pertinente la generalización que realiza de Marsily (1983) del flujo de Darcy y al término relacionado estrictamente con el gradiente hidráulico –expresado por la ley de Darcy-, agrega otros que reflejan la incidencia sobre el flujo de los gradientes de concentraciones, temperatura y del potencial eléctrico del fluido.

La inyección profunda de salmueras, aguas residuales urbanas o industriales u otros residuos tóxicos peligrosos, RTP, es una alternativa de gestión de residuos compleja y relativamente reciente pero ampliamente difundida. La técnica de inyección en sondeos profundos, ISP, comenzó a practicarse en la industria petrolífera, para eliminar las salmueras y otros desechos producto de la misma. Los sondeos de inyección presentan características similares a los sondeos petrolíferos y, en general, alcanzan profundidades entre los 250 m y los 2000 m. De la formación receptora se demanda que posea ciertos rasgos hidrogeológicos, que deben permanecer invariables en el tiempo, tales como que contenga agua cuya mineralización la revista de un interés nulo para su eventual aprovechamiento; que el volumen de huecos, la interconexión entre estos, su potencia, extensión y comportamiento elástico permitan caudales de inyección y una capacidad de almacenamiento suficiente o que se encuentre confinado y completamente aislado de recursos acuíferos aprovechables.

El abastecimiento de agua en muchas zonas costeras depende total, o parcialmente, de las aguas subterráneas. Esta demanda suele corresponder a una población que se caracteriza por una alta densidad y una fuerte fluctuación estacional, con un pico estival. En muchos casos, estos escenarios se hallan agravados por explotaciones agrícolas intensivas o la presencia de industrias, que ejercen una doble presión sobre los recursos hídricos, tanto por explotación como por retornos con fuerte contaminación. El verano es el período estacional más crítico, pues en él concurren las mayores demandas de abastecimiento y agrícolas con las menores recargas del sistema, conformando el escenario más propicio para la intrusión marina. Este fenómeno implica una severa limitación en la explotación de los recursos, comprometiendo seriamente con ello el desarrollo

socio-económico de las regiones costeras, además de implicar un serio impacto medioambiental sobre el sistema.

La inyección en sondeos profundos, ISP, y la intrusión marina son problemas en los que el flujo se produce bajo condiciones de densidad variable. Este tipo de problemas representan uno de los procesos de flujo físicamente más complicados. Esta complejidad se acrecienta notoriamente si también se está en presencia de condiciones de temperatura variable, lo cual no es excepcional al abordar estudios de ISP. Por otro lado, la ISP y la intrusión marina si bien aparecen como los casos arquetípicos de sistemas de flujo bajo densidad variable, no son los únicos. Así, en un sistema de flujo regional profundo en una cuenca sedimentaria, no son sólo las condiciones topográficas el único factor que gobierna el flujo; el conocimiento de las estructuras geológicas y la variabilidad de la densidad del fluido es esencial para entender al sistema (Gupta y Bair, 1997). En este tipo de cuencas se pueden producir errores apreciables en la dirección y magnitud del flujo si no se considera la influencia del gradiente de densidades al establecer el modelo conceptual. Ello no sólo afecta a los estudios de seguridad de ISP, sino también a la valoración de la penetración de la recarga y a los tiempos de residencia (Ophori, 1997, 1998a y b) o a la evaluación del impacto de una fuerte disminución regional de la carga hidráulica de un sistema (Lahm y Bair, 1997a).

La casi totalidad de los casos referidos corresponden a problemáticas que demandan una gestión cuidadosa de los recursos hídricos, dado los graves riesgos que entrañan las actuaciones que se emprenden sobre el sistema. Esta gestión debe basarse en un estudio detallado del medio, una capacidad para evaluar su impacto para horizontes futuros, con una incertidumbre aceptable, y un control riguroso de las acciones emprendidas y sus efectos. En todas estas tareas, y aún en las de control, la modelación numérica se presenta como una herramienta de indudable atractivo. Sin embargo, la representación numérica de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable es compleja y no se halla exenta de limitaciones (Oude Essink y Boekelman, 1998).

La representación numérica de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable se puede abordar con diversos códigos numéricos, desarrollados bajo distintos métodos de resolución de los problemas directos de flujo y de transporte. No obstante, esta representación numérica se puede abordar a partir de dos aproximaciones: reduciendo todo el sistema a un fluido equivalente –usualmente agua dulce- o representando de forma discriminada las distintas densidades del sistema de flujo. En esta última

aproximación los códigos se agrupan entre los que representan al sistema mediante modelos de interfaz neta y los que lo hacen como modelos de densidad variable. La selección de la herramienta a utilizar dependerá como en muchos problemas de modelación del objetivo del estudio, las simplificaciones que se adopten, el conocimiento, los datos disponibles y el presupuesto, entre otros.

Actualmente existe una gran difusión de códigos numéricos de modelización hidrogeológica, encontrándose a disposición de los profesionales del sector diversos programas que permiten representar sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable. Los programas se comercializan a través de distintos distribuidores y, en particular, sus páginas *web* mantienen actualizada la oferta de *software*. Sin embargo, la modelización numérica de estos sistemas dista de ser una tarea sencilla tanto desde el punto de vista fenomenológico -influencia de la viscosidad, dependencia de ésta y de la densidad con la temperatura, concentración de solutos y presión, variación de la permeabilidad en función de la densidad y la viscosidad-, como numérico -idoneidad de la técnica numérica de representación, problemas de dispersión numérica, adecuación de las condiciones de contornos a adoptar- (Jousma *et al.*, 1988; Oude Essink y Boekelman, 1998). En este sentido, las simplificaciones conceptuales que se adoptan en el desarrollo del modelo numérico deben ser claramente identificadas, con el fin de evitar que una interpretación estricta de los resultados ofrezca explicaciones reduccionistas de sistemas con un alto grado de complejidad (Groen *et al.*, 2000). Este hecho no resulta en absoluto banal, dada la delicada gestión que demandan estos acuíferos.

La modelación de los sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variables requieren un elevado conocimiento del medio. En particular, en lo referido a información cuantificable: piezometría, salinidad del agua, parámetros hidrogeológicos (permeabilidad, porosidad eficaz, dispersión hidrodinámica, etc.). Asimismo, esta información debe tener una adecuada cobertura espacial y temporal, aunque la variación de algunos de los parámetros ejerce una influencia sobre los resultados del modelo que queda enmascarada por las incertidumbres físicas y numéricas del mismo. Por otro lado, mucho de estos estudios tienen como marco formaciones hidrogeológicas profundas, de geología compleja y que, en general, no suelen haber despertado previamente gran interés en cuanto a su aprovechamiento. En estas razones reside la tradicional falta de datos que suele enfrentar el modelista al abordar este tipo de estudios.

La captura de datos en estos sistemas resulta particularmente exigente por la especificidad de las técnicas que demandan. Algunos investigadores al abordar la modelación de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable destacan la necesidad de usar un modelo desde el inicio del estudio. Aducen que ello permitiría al modelista estimar la importancia relativa de los distintos parámetros y, en consecuencia, optimizar su tiempo y esfuerzo para obtener los datos apropiados (Jousma *et al.*, 1988). La necesidad de definir al comienzo de un proyecto cual será el código a aplicar en exclusiva para modelar, puede considerarse un requerimiento un tanto extremo. Sin embargo, en este sentido, sí resulta fundamental que el técnico tenga un conocimiento de las posibilidades, limitaciones y requerimientos de los códigos disponibles, ya que, conjuntamente con las características particulares del proyecto, permitirá una planificación coherente con las tareas de adquisición de información.

El presente trabajo se estructura de la siguiente forma: inicialmente se presentan las ecuaciones de estado y algunas de las principales relaciones algebraicas que resuelven este tipo de modelos; posteriormente se comentan los métodos para estudiar sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable; luego se abordan aspectos particulares que se deben considerar en el desarrollo de la modelización numérica de estos sistemas; se realiza una breve reseña de los códigos más destacados en este tipo de estudios, para a continuación comentar los principales ejercicios de contraste de códigos y exponer algunas reflexiones sobre los mismos. Por último, se ofrece una valoración final sobre el desarrollo de estos modelos.

Ecuaciones de estado

Ley de Darcy

La Ley de Darcy permite describir el movimiento de un fluido a través de un medio poroso. Su ecuación en tres dimensiones para el caso de flujo bajo condiciones de densidad variable -restringiendo la generalización de Marsily (1983)-, se expresa como:

$$\mathbf{v} = -\frac{k}{\mu} \bullet (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \quad (1)$$

Donde: \mathbf{v} es la velocidad de Darcy, de componentes v_x , v_y y v_z (LT^{-1}); k es el tensor de la permeabilidad intrínseca del medio poroso (L^2); μ es la viscosidad dinámica del fluido ($ML^{-1}T^{-1}$); ∇p es el gradiente de

presiones de componentes $\partial p/\partial x$, $\partial p/\partial y$ y $\partial p/\partial z$ ($ML^{-2}T^{-2}$); r es la densidad del fluido (ML^{-3}) y g , $9.81 ms^{-2}$, es la aceleración de la gravedad (LT^{-2}).

Ecuación de flujo

El balance de masa de un fluido para un volumen unitario en una sección dada de un acuífero en régimen transitorio, si se considera la densidad del fluido, es descrita por la siguiente ecuación:

$$\nabla \left(k \frac{\rho g}{\mu} \nabla h \right) + \rho^* Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2)$$

Donde: Q es el caudal de recarga (L^3T^{-1}); ρ^* es la densidad del fluido inyectado; h es el potencial piezométrico y S_s es almacenamiento específico

El potencial piezométrico, h , se define como:

$$h = \frac{p}{\rho g} + z \quad (3)$$

El almacenamiento específico, S_s , se define (Freeze y Cherry, 1979, en Shikaze *et al.*, 1998) como:

$$S_s = \rho g(\alpha + \theta\beta) \quad (4)$$

Donde: α y θ son la compresibilidad ($L^2T^2M^{-1}$) y la porosidad de la matriz porosa, respectivamente, y β es la compresibilidad del fluido ($L^2T^2M^{-1}$).

El ámbito de estudio de los problemas de densidad variable en muchos casos suele ser el medio fracturado. La ecuación de flujo en régimen transitorio para fracturas discretas unidimensionales tiene la expresión siguiente (Shikaze *et al.*, 1998):

$$(2b) \left[\frac{\partial}{\partial l} \left(K_f \frac{\partial h_f}{\partial l} \right) \right] + q_{n|_+} - q_{n|_-} = (2b) S_{sf} \frac{\partial h_f}{\partial t} \quad (5)$$

Donde: $2b$ es la apertura de la fractura (L); l es la distancia a lo largo de la fractura (L); h_f es el potencial piezométrico en la fractura; K_f es la conductividad hidráulica de la fractura; S_{sf} es el coeficiente de almacenamiento específico de la fractura y $q_{n|_+}$ y $q_{n|_-}$ representan al flujo normal a la fractura que percolan desde y hacia, respectivamente, la matriz rocosa.

La conductividad hidráulica, K_f , y el coeficiente de almacenamiento específico, S_{sf} , de la fractura se definen (Freeze y Cherry, 1979 en Shikaze *et al.*, 1998) como:

$$S_{sf} = \rho_0 g \alpha \quad (6)$$

$$K_f = \frac{(2b)^2 \rho_0 g}{12\mu} \quad (7)$$

Ecuación de transporte

El balance de masa de un soluto conservativo para un volumen unitario en una sección dada de un acuífero en régimen transitorio, si se considera la variabilidad de la densidad del fluido, es descrita por la siguiente ecuación (Bear; 1979, en Voss y Souza, 1987):

$$-\theta \rho v \cdot \nabla C + \nabla [\theta \rho (D_m I + D) \cdot \nabla C] + Q_p (C^* - C) = \theta \rho \frac{\partial C}{\partial t} \quad (8)$$

Donde: C es la concentración de soluto como una fracción másica -masa de soluto/masa de fluido- (M_s/M); θ es la porosidad; v es la velocidad de Darcy (1); D_m es el coeficiente de difusión molecular del soluto en el flujo, incluye el efecto de tortuosidad a través del medio poroso (L^2T^{-1}); I es la matriz identidad (-); D es el tensor de dispersión hidrodinámica (L^2T^{-1}); Q_p es el caudal de recarga al acuífero dado en términos másicos ($ML^{-3}T^{-1}$); C^* es la concentración de soluto, dada como fracción másica del fluido del caudal de recarga (M_s/M).

La relación entre densidad, ρ , y concentración de soluto, C , en condiciones isotérmicas, se puede expresar mediante la relación lineal siguiente:

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial C} (C - C_0) \quad (9)$$

Donde: ρ_0 y C_0 son la densidad y la concentración del soluto en el fluido de referencia, respectivamente, usualmente agua dulce.

Los términos del tensor de dispersión hidrodinámica, más el término de la diagonal por difusión molecular, para un medio anisótropo se definen (Bear, 1979) como:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} + \tau D^* \quad (10.1)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} + \tau D^* \quad (10.2)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_y^2}{|v|} + \tau D^* \quad (10.3)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (11.1)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad (11.2)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad (11.3)$$

Donde: v_x , v_y y v_z son los componentes cartesianos de la velocidad de Darcy, v , (1) y $|v|$ su módulo; α_L , α_{TH} y α_{TV} son los coeficientes de dispersión longitudinal, transversal en el plano horizontal y transversal en el plano vertical, respectivamente, de la matriz porosa (L); τ es la tortuosidad del medio y D^* el coeficiente de difusión de la solución libre (L^2T^{-1}). En los elementos de la diagonal de la matriz D -(10.1) a (10.3)- el producto τD^* es el coeficiente D_m .

En fracturas discretas unidimensionales la ecuación de transporte se expresa (Shikaze *et al.*, 1998):

$$(2b) \left[\frac{\partial}{\partial l} \left(D_f \frac{\partial c_f}{\partial l} \right) - v_f \frac{\partial c_f}{\partial l} \right] + \Gamma_n|_{l+} - \Gamma_n|_{l-} = (2b) \frac{\partial c_f}{\partial t} \quad (12)$$

Donde: D_f es el coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal de la fractura (L^2T^{-1}); c_f es la concentración de soluto en la fractura en términos máxicos (M_s/M); v_f es la velocidad del fluido en el flujo por la fractura (LT^{-1}) y $\Gamma_n|_{l+}$ y $\Gamma_n|_{l-}$ representan la ganancia y la pérdida, respectivamente, de masa de soluto a través de la matriz porosa en la que se encuentra. En la fractura se supone que el soluto está completamente mezclado en el ancho de la fractura -apertura-.

El coeficiente de dispersión hidrodinámica de la fractura, D_f , se define como:

$$D_f = \alpha_f |v_f| + D^* \quad (13)$$

Donde: α_f es la dispersividad longitudinal de la fractura (L).

Aproximaciones de Ghyben-Herberg y de Hubbert

Esta aproximación se basa en el equilibrio hidrostático entre el agua dulce y el agua salada, consideradas como dos fluidos inmiscibles, y en la aproximación de Dupuit, que supone al flujo horizontal. La relación de equilibrio se basa en la relación de las densidades de ambos fluidos - $\rho_s = 1 \text{ kg dm}^{-3}$, para el agua dulce, y $\rho_d = 1.025 \text{ kg dm}^{-3}$, para el agua salada- y está dada por la expresión:

$$\rho_d (h + z) = \rho_s z \Rightarrow z = \frac{1}{0.025} h \quad (14)$$

Donde: h y z son el nivel piezométrico y la profundidad de la interfaz respecto al nivel de referencia en el punto de estudio, respectivamente (L) (Custodio y Llamas, 1982).

Hubbert introduce una corrección a la aproximación de Ghyben-Herberg, al considerar la intrusión desde un punto de vista hidrodinámico. Ello resulta una aproximación más cercana a la realidad, pues en las inmediaciones de la costa debido al estrechamiento de la cuña de agua salada se produce un incremento apreciable de la velocidad de descarga, apareciendo componentes verticales del flujo, dejando de ser válida la aproximación de Dupuit. La expresión de la aproximación de Hubbert es:

$$z = \frac{\rho_d}{(\rho_s - \rho_d)} h_d - \frac{\rho_s}{(\rho_s - \rho_d)} h_s \quad (15)$$

Donde: h_d y h_s son los niveles de agua dulce y agua salada sobre el nivel del mar, respectivamente -usualmente h_d es negativa-. El primer término de la expresión corresponde a la aproximación de Ghyben-Herberg y el segundo a la corrección a realizar. La corrección de Hubbert cobra peso proporcionalmente a la distancia a la línea de costa. Por otro lado, existen otras aproximaciones analíticas para el cálculo de la interfaz, tales como las fórmulas de Lusczynsky o la de Glover (Jousma *et al.*, 1988).

Métodos de resolución

El problema de densidad variable ha sido abordado mediante técnicas muy diversas. Cada una de las mismas ofrece distintos alcances, a la par de presentar diferentes atractivos.

Métodos analíticos

La resolución analítica de las ecuaciones de estado y su acoplamiento dista de ser un problema sencillo. La complejidad del mismo ha llevado que la mayoría de las soluciones analíticas alcanzadas respondan a problemas de flujo sencillos: acuíferos homogéneos, de espesor y permeabilidad constante, uni o bidimensionales, régimen permanente, interfaz neta (Ataie-Ashtiani *et al.*, 1998)-. Esta sencillez de los problemas tratados hace que tengan un interés práctico relativo, a excepción de alguna aproximación. No obstante, las soluciones analíticas resultan de gran interés para el contraste y validación de códigos numéricos, para el análisis de sensibilidad del sistema hidrogeológico con respecto a sus parámetros o para una primera aproximación en el estudio de problemas reales.

Algunas soluciones analíticas se basan en la aproximación de Ghyben-Herzberg, en las que la ecuación de flujo se resuelve sólo para el agua dulce, mientras que se considera constante el potencial de agua salada. Así, con este tipo de aproximaciones se han encontrado soluciones para acuíferos horizontales sencillos bajo régimen permanente. También se han encontrado soluciones para un régimen permanente, en un plano vertical, en niveles de agua salada aislados al lado del mar (Glover, 1959 y Van Der Veer, 1977).

Existen métodos semianalíticos, también basado en la aproximación de Ghyben-Herzberg, que ofrecen posibilidades de aplicación en régimen permanente en diversos casos prácticos, tales como acuíferos confinados, libres o multicapas. Así, en el método de los elementos analíticos el dominio de estudio se

modeliza mediante la composición de una gran variedad de funciones analíticas que representan las distintas influencias sobre el sistema de flujo de fuentes, sumideros, heterogeneidades, etc. Así, la superposición de estas funciones permite representar al sistema. En este método los parámetros de las funciones que describen el sistema deben calcularse iterativamente. Debido a ello, una desventaja del método es que al incrementarse el número de funciones utilizadas, y con ellos los parámetros a estimar, pierde consistencia el modelo (Strack, 1987, en Jousma *et al.*, 1988). Otras soluciones analíticas atienden a casos especiales de flujos en dos fases, basándose en el método de la hodógrafa y la teoría del vórtice (Josseling de Jong, 1965; en Jousma *et al.*, 1988).

Métodos analógicos

Estos modelos se basan en la analogía existente en la ecuación de flujo de las aguas subterránea y las ecuaciones de estado de otros procesos físicos, como es el caso de la electricidad o el calor. Así, si estos procesos físicos se pueden reproducir y medir, los mismos pueden emplearse para estudiar el flujo de las aguas subterráneas. La adecuada interpretación de estos fenómenos físicos requiere la conversión de los parámetros que los gobiernan a los correspondientes parámetros hidrogeológicos. Este tipo de modelo ha caído en desuso en los campos de la investigación y la ingeniería, habiendo quedado constreñido al campo docente. No obstante, debe señalarse, que por lo general, en la mayoría de los casos los modelos analógicos resultan de difícil aplicación para estudiar el transporte de solutos en el agua subterránea.

Métodos numéricos

Los métodos numéricos permiten resolver de forma discreta en el espacio y el tiempo las ecuaciones de flujo (5) y transporte (8). Estas ecuaciones diferenciales son sustituidas por sistemas de ecuaciones algebraicas obtenidas a partir de diversas técnicas de discretización e interpolación que se comentan seguidamente. En estos sistemas las incógnitas son los valores nodales de las variables de estado (niveles piezométricos, concentraciones).

Los métodos analíticos permiten describir algunos escenarios que se caracterizan por su homogeneidad y simplicidad, enfrentándose a serias limitaciones al tratar de representar sistemas heterogéneos y relativamente complejos, ello es un serio impedimento para una aplicación con carácter práctico. Los méto-

dos numéricos pueden superar estas restricciones aunque ello no les exime de presentar otras dificultades, que se acrecientan notablemente al abordar procesos de flujo y transporte bajo condiciones de densidad variable. No obstante, algunas de las dificultades en la representación se pueden evitar, o al menos controlar sus efectos, con una definición cuidadosa de las discretizaciones espacial y temporal.

Si se considera constante la densidad del fluido, la resolución numérica de la ecuación de flujo (5) no presenta mayor complejidad y se aborda usualmente tanto con el Método de los Elementos Finitos, MEF, como con el de las Diferencias Finitas, MDF. Las posibles dificultades pueden residir en los eventuales aspectos no lineales que entrañe el sistema a representar, tal como la presencia de una superficie libre.

Por el contrario, la resolución numérica de la ecuación de transporte (8), aún cuando la densidad del fluido es constante, presenta mayores dificultades. En general para su resolución se aplica alguno de los métodos siguientes:

- Diferencias Finitas, MDF, en el que se discretiza el dominio en n celdas y se realiza en cada una de ellas un balance de contaminantes para un intervalo de tiempo dado. Ello se realiza sustituyendo en cada nodo -generalmente situado en el centro de las celdas- los términos diferenciales de la ecuación de transporte por su aproximación. Así queda definido un sistema de n ecuaciones lineales con n incógnitas. Habitualmente su implementación difiere en la resolución temporal, según esta se aborde mediante un esquema "centrado" que ofrece mayor exactitud, al tener un menor error de truncamiento, aunque resulta numéricamente más inestable, o que sea "explícito" o "implícito", ofreciendo ambos esquemas distintos grados de economía de cálculo y estabilidad numérica frente al "centrado" pero también adoleciendo ambos de una menor precisión numérica.
- Elementos Finitos, MEF, el dominio se discretiza en elementos de geometría irregular uni, bi o tridimensionales. A diferencia del MDF, los Elementos Finitos calculan las variables de estado en todo el dominio de estudio, utilizando para ello funciones de interpolación, también llamadas de forma, definidas en cada elemento. Los comentarios realizados respecto a los esquemas de resolución temporal -explícito, centrado e implícitos- son válidos para este método.
- De las Características, MOC, en el que en el proceso de transporte se desacoplan los mecanis-

mos advectivos, que se representan mediante partículas que se desplazan a lo largo de las líneas de flujo, y los procesos dispersivos, que se calculan en la posición que alcanzan las partículas en cada tiempo de cálculo, esto es en un sistema coordinado referido al movimiento advectivo. La resolución secuencial de los términos advectivos y dispersivos de la ecuación contribuye a eliminar en gran medida la dispersión numérica, aunque presentan errores por acumulación de errores de truncamiento.

- Del Camino Aleatorio, es también un método de desplazamiento de partículas, pero en éste cada partícula representa un volumen fijo de soluto. El transporte advectivo se produce a lo largo de las líneas de flujo, mientras que el dispersivo corresponde a la suma de un movimiento aleatorio, cuyas características estadísticas dependen de los coeficientes de dispersión. El movimiento de una sola partícula no ofrece ninguna información, sólo la superposición de sus trayectorias y el recuento de las masas que las representan, permiten conocer la concentración de soluto en cada celda. Este método evita los problemas de dispersión numérica.

La resolución numérica de las ecuaciones de estado de Flujo y Transporte para un sistema de flujo bajo la condición de densidad variable es un problema de gran complejidad numérica, como ya se señalara anteriormente. Para abordarlo se han seguido distintas estrategias, algunas simplifican el cálculo -considerando al agua dulce y a la salobre como inmiscibles o considerando en el sistema un único fluido equivalente- pero limitan el alcance de los problemas a tratar y otras que mantienen la complejidad del problema pero demandan una mayor sofisticación de los códigos a emplear y una gran capacidad de los equipos informáticos que soportan el modelo.

Modelos de interfaz neta

Los modelos de interfaz neta se basan en considerar al agua dulce y al agua salada como dos fluidos inmiscible que se encuentran separados por una interfaz brusca. La posición de la interfaz en general es calculada mediante la aproximación de Ghyben-Herzberg, por lo que implícitamente se basan en la hipótesis de Dupuit -flujo preponderantemente horizontal, estratificado-. Sin embargo, dentro de este tipo de modelo también se inscribe el método de los elementos analíticos de Strack (1987,1995), en el que la ubicación de la interfaz se realiza mediante funcio-

nes especiales, aunque la implementación de este método presenta una capacidad de simulación limitada (Oude Essink y Boekelman, 1998).

Los métodos de interfaz neta se basan en suponer un equilibrio hidrostático, donde el flujo es de carácter estratificado y, fundamentalmente, en la inmiscibilidad del agua dulce y del agua salada. Sin embargo, en la realidad estos fluidos son miscibles y la zona de transición suele caracterizarse por estar sujeta a dispersión hidrodinámica (Bouzouf *et al.*, 2000). El hecho que los modelos de interfaz neta no consideren la mezcla por dispersión y difusión es una limitación particularmente restrictiva. Algunos autores señalan que este rasgo afecta particularmente a la simulación de actividades antrópicas, como la recarga artificial y la extracción o inyección de aguas con caudales altos y variables -por ejemplo en inyección en sondeos profundos o en almacenamiento subterráneo con recuperación- (Oude Essink y Boekelman, 1998). No obstante, esta limitación resulta restrictiva también para una simulación realista y detallada de procesos de intrusión, ubicación de la cuña marina o el estudio de descarga de acuíferos confinados. En estos casos no sólo no se representaría la zona de mezcla convectiva sino que al caracterizar la cuña se podría llegar a subestimar su penetración o, en el caso de la descarga mar afuera de acuíferos confinados, sobrestimar las descargas. Este último hecho ha sido cotejado tanto por mediciones en campo como por contraste con modelos de densidad variable (Groen *et al.*, 2000, Kooi y Groen, 2001). Asimismo, estos modelos no serían adecuados de aplicar en casos en que la dispersividad se viera acrecentada por la heterogeneidad del acuífero, flujos lentos del agua subterránea o efectos de marea (Ataie-Ashtiani *et al.*, 1998)

Los modelos de interfaz suelen ser más sencillos que los de densidad variable y requieren menos datos y tiempo de cálculo. El empleo de este tipo de método es adecuado para obtener soluciones rápidas y globales, tales como la obtención de unas primeras aproximaciones en estudios regionales o en estudios locales o de detalle en los que la disponibilidad de datos y recursos es limitada. Igualmente, en acuíferos en los que la zona de transición es relativamente pequeña comparada con la extensión y la potencia del acuífero resultan un escenario adecuado para aplicar estos modelos (Bouzouf *et al.*, 2000). En el *16th Salt Water Intrusion Meeting* se han presentado dos modelos similares basados en la hipótesis de la estratificación del flujo, en los que se identificaba la interfaz neta mediante la aplicación del método de los volúmenes finitos (Bouzouf *et al.*, 2000), en un caso, y las diferencias finitas en 3D (Bakker, 2000), en el otro.

Modelos de densidad equivalente

Los modelos de densidad equivalente se basan en la representación del sistema bajo un único fluido de referencia, el cual usualmente es el agua dulce. Debido a ello el fluido resulta continuo y sus propiedades son constantes en todo el dominio. Existen dos aproximaciones diferentes, en una las ecuaciones se resuelven en términos de función de corriente y, en la otra, en términos de potencial hidráulico. Sin embargo, debe observarse que contrastes realizados entre este tipo de modelos y los de densidad variable puso en evidencia que los resultados de los mismos pueden diferir notablemente al identificar las velocidades y direcciones de flujo (Kelly y Bair, 1988). En ambas aproximaciones, la franja de transición se puede simular definiendo escalones de variación de la densidad, representándose así de forma discreta la evolución de la densidad del fluido en este sector del sistema. Este tratamiento discreto de la evolución espacial del fluido lleva aparejado el asumir que se mantiene la conservación de la masa en los distintos escalones, no habiendo mezcla de fluido a través de las distintas interfaces. Situación que, en rigor, sólo se produce en régimen estacionario, con lo que se pone de evidencia otra gran limitación de estas aproximaciones: la imposibilidad de simular el régimen transitorio. Asimismo, y al igual que las restantes técnicas numéricas, la zona de transición demanda una partición espacial de detalle.

Modelos de niveles equivalentes

El régimen estudiado se simula en términos de potencial de agua dulce. Si se escribe la velocidad de Darcy (1) en términos de carga hidráulica equivalente, se tiene:

$$h_e = \frac{p}{\rho_0 g} + z \Rightarrow p = \rho_0 g (h_e - z) \quad (16)$$

y

$$v = -\frac{K}{\mu} \cdot (\rho_0 g \nabla h + (\rho - \rho_0) g \nabla z) \quad (17)$$

Donde: h_e es la carga hidráulica equivalente; p es el potencial del sistema de flujo en un punto dado y ρ_0 es la densidad del fluido de referencia, usualmente agua dulce. La expresión (17) permite interpretar que

en estos casos el flujo en el medio poroso se halla gobernado por dos fuerzas: 1, la variación del nivel piezométrico, referido a un fluido ficticio homogéneo de densidad, ρ_0 , y una fuerza ascensional causada por la diferencia entre la densidad real del flujo, ρ , y la correspondiente al fluido ficticio, ρ_0 (Senger y Fogg, 1990 a y b; Gupta y Bair, 1997)). La influencia de esta fuerza ascensional en los campos de flujo equivalentes se puede apreciar claramente en la ecuación de flujo en dos dimensiones para régimen estacionario. Si se definen una densidad relativa, ρ_r , y la conductividad hidráulica equivalente K_e , como:

$$\rho_r = \frac{\rho}{\rho_0} - 1 \quad (18)$$

$$K_e = \frac{k\rho_0 g}{\mu} \quad (19)$$

La ecuación de flujo en un plano vertical para régimen estacionario se escribe como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{ex} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{ez} \frac{\partial h}{\partial z} + K_{ez} \rho_r \right) = 0 \quad (20)$$

La componente vertical del flujo en la ecuación (20) viene dada por el gradiente hidráulico en la dirección del eje Z y por la fuerza ascensional debido a la variación de la densidad del fluido.

La interfaz entre los dos fluidos significa una discontinuidad en las propiedades del sistema de flujo. Esta singularidad se representa con la introducción de las fuerzas ascensionales en la componente vertical del flujo, con lo que se causa un salto en el potencial a lo largo de la interfaz. En términos prácticos, esto se puede traducir en el acoplamiento de un término de empuje hidrostático a la componente vertical del flujo (Van Meir *et al.*, 2000).

Función de flujo equivalente

Una función de flujo, Ψ , es constante a lo largo de una línea de corriente y la diferencia entre ellas, $\Psi_i - \Psi_{i+1}$, se corresponde a la descarga entre dos líneas de corriente. Cuando se emplean funciones de flujo para problemas de densidad variable, estas deben definirse en términos de flujo másicos y, también en este sentido, debe desarrollarse la ecuación de flujo. Una

forma más general de escribir la ecuación de continuidad, considerando la variación de densidad, ρ , es:

$$\nabla \rho \mathbf{q} = 0 \quad (21)$$

Donde: \mathbf{q} es el caudal en el plano del campo de flujo.

Si se trabaja con funciones de flujo en términos de volumen de flujo y no de masa se pueden generar errores significativos en el campo de flujo que se obtenga como solución de problema (Senger y Fogg, 1990 a y b; Evans y Raffensperger, 1992; Lebbe y Van Meir, 2000). Esto errores incrementarán su magnitud en la medida que el gradiente de densidades, $\nabla \rho$, tienda a ser paralelo a las líneas de flujo. Ello se pone en evidencia de forma clara, si se desarrolla (21):

$$\nabla \rho \mathbf{q} = \rho \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{q} \cdot \nabla \rho \quad (22)$$

reagrupando:

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = - \frac{\mathbf{q} \cdot \nabla \rho}{\rho} \quad (23)$$

Así, el segundo miembro de la ecuación será igual a 0 cuando el caudal, \mathbf{q} , sea ortogonal al gradiente de la densidad, $\nabla \rho$. Evidentemente, también se aprecia que cuanto menor sea el contraste en la variación del fluido, menor será la distorsión al representar con un fluido homogéneo al sistema de flujo.

En problemas bidimensionales, este método permite observar de forma bastante intuitiva la magnitud y velocidad del flujo. Por otro lado, la aplicación del mismo en los términos convenientes garantiza el principio de conservación de la masa, aún cuando no se haya alcanzado la convergencia numérica (Evans y Raffensperger, 1992). Estos investigadores, y otros (Olsthorn, 2000), coinciden en señalar en que las soluciones numéricas de este método suelen ser más estables y converger más rápidamente que las resultantes del estudiar el campo de flujo equivalente en términos de presiones o niveles. Asimismo, el uso de funciones de flujo equivalente evita los problemas del cálculo en convección libre, en donde los errores por discretización pueden ser mayores que los gradientes de presiones existentes.

Una restricción de este método es su aplicación al régimen estacionario. Así, si bien se puede estudiar la

evolución histórica de escenarios mediante “fotos fijadas” (Olsthorn, 2000), ello impide su uso ante la presencia de bombeos u otra acción análoga sobre el sistema, en la que deba considerarse el almacenamiento del mismo. Entre otras restricciones se debe señalar lo compleja que resulta su extensión a problemas tridimensionales. Una limitación conceptual notoria de este tipo de modelos radica en su calibración, pues al no ser mensurable la función de flujo, la misma debe ser inferida a partir de otras variables de campo tales como caudales de descarga, presiones o niveles.

La representación de fuentes y sumideros, aún en régimen estacionario, resulta engorrosa de implementar. La misma se realiza imponiendo términos a la función de corriente que generan saltos en la misma reflejando con estos las discontinuidades que implican las fuentes y sumidero en el campo de flujo.

Densidad variable

Considerar en la simulación numérica la variabilidad de la densidad, además de ofrecer una representación más realista es, en muchos sistemas, un requerimiento ineludible por las características del problema estudiado, por ejemplo en condiciones en que la franja de transición es extensa y debe estudiarse en detalle la gestión del recurso (Lahm *et al.*, 1998). Para ello, algunos modelos resuelven las ecuaciones de flujo (2) y transporte (8) considerando de forma explícita la variación de la densidad, a la que suelen hacer variar linealmente en función de las concentraciones en condiciones isoterma –aunque existen códigos que consideran la influencia de la temperatura-. La ecuación de transporte, aún en condiciones de densidad constante, resulta particularmente compleja su resolución numérica debido a su término advectivo -hiperbólico-.

La representación numérica si bien ofrece un tratamiento más realista de los sistemas, y con ello un innegable atractivo, también lleva aparejado en el desarrollo de los modelos una serie de requerimientos y restricciones que obligan a operar con particular atención. En este aspecto ciertas conceptualizaciones de los sistemas, las condiciones de contorno que de ellas se deriven y el método numérico de resolución deben valorarse convenientemente (Konikow, *et al.*, 1997 y Holzbecker *et al.*, 1997). Igualmente, una discretización relativamente simple puede generar artificialmente velocidades de flujo (Voss y Souza, 1987). Por otro lado, estos modelos son particularmente exigentes en cuanto a requerimientos de datos del sistema hidrogeológico.

Aspectos particulares en la representación numérica

La resolución numérica de la ecuación de transporte en el dominio de estudio es inherente a la modelación del correspondiente sistema de flujo bajo condiciones de densidad variable. Debido a ello la problemática que presente la modelación del transporte de solutos también debe abordarse al desarrollar modelos bajo condiciones de densidad variable. En este sentido el primer aspecto a considerar es la representatividad de la ecuación de transporte. Carrera (1985) realiza una reseña de los distintos aspectos por lo que se puede cuestionar la aplicación general de la expresión dada para la ecuación de transporte (8): interdependencia real de los procesos de transporte y dependencia de la dispersividad con la escala del problema analizado, entre otros. En particular, en sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable se establece una interdependencia entre el campo de velocidades y la dispersión, que incide de forma negativa para representar adecuadamente la posición y amplitud de la zona de transición (Croucher y O’Sullivan, 1995) Sin embargo, como señala Carrera (1985) –augurando muchos años de uso a esta formulación-, la resolución de la expresión (8) permite simular situaciones reales, en claro contraste con las alternativas formuladas.

Existen dos magnitudes adimensionales que contribuyen a la caracterización del problema de transporte y, que a su vez, deben servir de referencia al definir las discretizaciones espacial y temporal. Estas son:

- el Número de Peclet,

$$P_e = \frac{|v| \nabla x}{D_1} = \frac{\nabla x}{\alpha_1} \quad (24)$$

- el Número de Courant,

$$C_0 = \frac{|v| \nabla t}{\nabla x} \quad (25)$$

Donde: Δx es una distancia media entre nudos o centros de celdas; D_1 es el coeficiente de dispersión longitudinal; Δt es un intervalo de tiempo de cálculo; α_1 es la dispersividad longitudinal y $|v|$ es el módulo la velocidad de Darcy. El número de Peclet, P_e , evalúa la importancia relativa entre los procesos de transporte advectivos y dispersivos. Así, si $P_e < 1$ predominan los procesos dispersivos, siendo preponderante en la ecuación de transporte el término parabólico, y si $P_e > 1$ los procesos advectivos son los relevantes,

cobrando peso en (8) el término hiperbólico. El número de Courant, C_o , indica la relación entre la distancia recorrida por el soluto debido al transporte advectivo durante un intervalo de tiempo de cálculo y la discretización espacial del problema

Los modelos eulerianos -en los que se resuelve la ecuación de transporte mediante métodos como diferencias finitas o elementos finitos- ofrecen soluciones estables para el problema de transporte, cuando los procesos dispersivos son preponderantes sobre los advectivos y el frente de soluto es relativamente suave (Carrera, 1985). Para números de Peclet altos se pueden producir fuertes oscilaciones en la solución, ello se evita si se cumplen las condiciones empíricas siguientes:

$$\begin{aligned} P_e &\leq 2 \\ C_o &\leq 1 \end{aligned} \quad (26)$$

Algunos autores (Oude Essink y Boekelman, 1998) consideran que si se emplean el MEF con funciones de interpolación cuadráticas la condición a cumplir es

$$P_e \leq 4 \quad (27)$$

Sin embargo, aunque la verificación de la condición (26) evita oscilaciones en la solución numérica, en algunos casos puede llevar a discretizaciones espaciales extremadamente finas y la consiguiente definición de intervalos de tiempo de cálculo muy pequeños. Así, se puede dar el hecho que la solución pierda exactitud por acumulación de errores de redondeo (Neuman, 1983; en Carrera, 1985). Por otro lado, un esquema de cálculo "hacia atrás" que brinda estabilidad al problema, puede conducir a un suavizado artificial del frente de contaminante e introducir un error de truncamiento, haciendo perder precisión numérica a la solución. Este tipo de error produce una dispersión numérica que impide una correcta representación del fenómeno físico, al "esparcir" el frente brusco del soluto de una forma aún mayor a la producida por la dispersión hidrodinámica misma. Así, en modelos de intrusión marina se vería incrementada la amplitud de la zona de transición y distorsionada la posición de la cuña de penetración (Coucher y O'Sullivan, 1995). El incremento artificial en la dispersión que introduce la dispersión numérica es proporcional a la distancia entre nudos del mallado (Carrera, 1985). Sin embargo, como ya se señalara, estos errores no sólo se encuentran relacionados con la discretización que se defina, sino con el esque-

ma de resolución que se adopte, según éste sea implícito, centrado o explícito

La definición de las condiciones de contorno adecuadas es un aspecto que no está exento de dificultad en este tipo de modelo. Así, la definición de la condición de concentración prefijada puede implicar la existencia de un flujo másico dispersivo sobre el que se tiene poco control y que puede distorsionar la representación del sistema. En referencia a esto se produjo una interesante discusión en torno al Caso 5 del Nivel 1 del ejercicio internacional HYDROCOIN - Hydrologic Code Intercomparison- (Konikow *et al.*, 1997; Holzbecher *et al.*, 1998). En la misma, se señala que los métodos mixtos lagrangianos-eulerianos como el de Partículas Características o el de Caminos Aleatorios representan con una menor dispersión numérica que los métodos eulerianos, los problemas en que la advección es el proceso preponderante en el transporte de soluto. Atendiendo a dicha observación, se puede considerar que los métodos mixtos resultan los más adecuados para implementar la condición de concentración prefijada -tipo Dirichlet-, cuando esta se define en un modelo. Sin embargo, en esta discusión se desalienta a utilizar la condición de concentración prefijada debido a que su analogía estricta en la naturaleza es una rareza (Konikow *et al.*, 1997), considerándose más pertinente el empleo de la condición de contorno mixta -tipo Cauchy-.

La simulación del transporte advectivo necesita aproximar 2 vectores: el gradiente de la concentración y la velocidad. Frente a los problemas usuales de flujo de densidad constante donde la velocidad varía suavemente, en los problemas bajo densidad variable -tal como el de intrusión marina o de ISP- el campo de velocidades suele ser altamente variable. La velocidad se calcula a partir de las presiones y densidades evaluadas en los nudos o celdas (1). Si la densidad es constante la presión sólo varía linealmente, pero si la densidad varía linealmente en vertical la presión lo hará cuadráticamente. Por otro lado, si bien la densidad es variable en un sistema, al discretizarse este, la densidad pasará a ser constante en cada nodo o celda. Debido a ello, el error de truncamiento asociado a la velocidad que afecta notablemente al cálculo de la misma, dependerá de la discretización espacial que se adopte y su reducción requerirá refinar el mallado.

Los métodos eulerianos, aún para sistemas de densidad constante, requieren mallas más refinadas para minimizar el problema clásico de dispersión numérica al resolver la ecuación de transporte. El error de dispersión numérica es de segundo orden, mientras que el error de truncamiento de la velocidad dependerá del orden de la interpolación de las pre-

siones, que suele ser lineal. Por ello, si una discretización se diseña atendiendo a la condición de Peclet (26) para minimizar el error de dispersión numérica, también ofrecerá un error de truncamiento asociado a la velocidad pequeño, que en cada celda será proporcional a la superficie respectiva. En los métodos lagrangianos-eulerianos la necesidad de refinar el mallado para minimizar el error de truncamiento de la velocidad incrementará el costo de cálculo, al estar este relacionado linealmente con el número de partículas por nodo o celda. Así, el error de truncamiento de la velocidad afecta en particular a los métodos de partículas (lagrangianos-eulerianos) y con ello estos pierden la ventaja en términos de costo computacional que presentan frente a las técnicas eulerianas, ya que dicha ventaja se basa en la posibilidad de usar mallados más toscos sin menguar la precisión en la respuesta, al verse afectados sólo marginalmente por el problema de dispersión numérica (Benson *et al.*, 1998).

El impacto que introduce el truncamiento de la velocidad depende tanto de la magnitud de la misma como de la heterogeneidad del sistema. En particular, las heterogeneidades a escala local de la permeabilidad inciden en el campo de velocidades, produciendo con ello notorias alteraciones en el transporte advectivo y presentando una clara interrelación con los procesos dispersivos. Así, aún cuando un dominio pueda definirse en términos de una k media, los rasgos locales pueden tener un impacto importante en el problema debido a las grandes diferencias en la densidad generadas por las alteraciones que se producen en el transporte advectivo y dispersivo (Schincariol, 1998).

Entre los problemas de densidad variable, el de inyección profunda en medios fracturados es uno de los que presenta dificultades particulares para su representación por distintos aspectos. Uno de ellos está ligado al sistema de fractura que constituye la estructura de caminos preferentes de flujo. Un estudio realizado mediante modelos sintéticos (Shikaze *et al.*, 1998) puso en evidencia que el desarrollo de una pluma de soluto en este tipo de medio puede ser altamente irregular. Ello se debe a la complejidad de la red de fracturas y a la presencia de las celdas de convección que la red define en la matriz rocosa, que inciden en la difusión del soluto y por consiguiente en la variación de la densidad en el sistema. Por lo tanto, si se tiene en cuenta que los sistemas de fracturas no son uniformes ni en apertura ni en espaciado y que su caracterización espacial es desconocida deben ser tratados estadísticamente. Este hecho invita a reflexionar sobre la magnitud de la incertidumbre que lleva aparejado el empleo de modelos determinísticos en medios fracturados en casos de densidad

variable del fluido para estudiar los rasgos de una pluma de soluto –magnitud y dirección- y que sugeriría que estas características podrían no ser susceptibles de predecirse mediante este tipo de modelo.

Usualmente, se considera que la convección libre, debida al gradiente de densidades, es despreciable frente a la convección forzada, causada por el gradiente hidráulico. Sin embargo, esta asunción que es válida para plumas de contaminantes de baja concentración, deja de serlo para lixiviados altamente concentrados, como es característico en ISP. En estos casos, en principio resulta indispensable en su representación numérica considerar la variabilidad de la densidad, r , y la viscosidad, m , del fluido acorde varíen la concentración del soluto y la temperatura. Además, la densidad y la viscosidad se encuentran estrechamente ligadas, afectando el no considerar la variabilidad de alguna de las dos a la evaluación correcta de la penetración del soluto –y de la recarga- en el sistema. Sin embargo, en muchos estudios se contempla la variación de la densidad y se desprecian las de viscosidad, pues se considera que las variaciones que la viscosidad suscita en el campo de velocidades –no superior al 10%- se encuentran dentro del rango de las incertidumbres físicas y numéricas del modelo (Ophori, 1997 y 1998 a y b).

Códigos de representación numérica

La gran difusión de los códigos numéricos como herramientas en la hidrogeología hace que en la actualidad se encuentren a disposición de los técnicos del sector varios programas que permiten la modelación de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad y temperatura variables. Los programas se comercializan a través de distintos distribuidores, entre los más relevantes citaremos al Waterloo Hydrogeologic, Inc.; Scientific Software Group, International Group Water Modeling Center, quienes por medio de sus catálogos (Waterloo Hydrogeologic, 2000; IGWMC, 1999; SSG, 1998) y, en particular, sus páginas web mantienen la actualización en su oferta de software. A continuación se describen los códigos de modelación de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable. La información que se extrae procede en términos generales de las referencias ya dadas (Waterloo Hydrogeologic, 2001; IGWMC, 1999; SSG, 2001), de la relación general de modelos realizada por Heredia (1991) –debidamente actualizada-, el análisis restringido de códigos del mismo autor (Heredia, 1999) y las publicaciones particulares que se referencian pertinentemente.

Mocdense

Este código desarrollado por Sandford y Konikow (1985) es una versión modificada del programa MOC desarrollado por Konikow y Bredehoeft en el marco del U.S. Geological Survey para poder representar sistemas de flujo bajo densidad variable en dominios bidimensionales, ya sea en horizontal o en sección vertical. Se resuelven los problemas de flujo y transporte en regímenes estacionario y transitorio, la ecuación de estado del primero se resuelve mediante el método de diferencias finitas, usando tanto presiones como niveles hidráulicos. El transporte advectivo se representa mediante el método de las características y se pueden simular al menos hasta tres solutos o constituyentes solubles. La densidad y la viscosidad se consideran linealmente variables con la concentración de uno de los constituyentes exclusivamente y son independientes de la presión y la temperatura. Así se pueden representar problemas de contaminación en ambientes heterogéneos y anisotrópos con agua dulce/agua salobre. Actualmente, las dimensiones máximas con que se puede representar un sistema son: un mallado de 150 por 150 celdas, 80000 partículas características y 25 puntos de observación. El código tiene recursos de posproceso que facilitan la interpretación del modelo. Este código fue utilizado en un ejercicio de contraste entre métodos lagrangianos-eulerianos y eulerianos, representando una implementación de los primeros (Benson *et al.*, 1998). Este ejercicio, cuyos resultados se comentarán más adelante, puso en evidencia la economía de cálculo que aportan estos métodos, aunque limitada esta a campos donde la velocidad evoluciona suavemente. Existe una adaptación tridimensional del código MOC para flujo y transporte de soluto considerando la densidad del fluido variable, este es el código Mocdense3D y fue desarrollado por Oude Essink (1999). En el 16th SWIM se han presentado varios trabajos en el que se aplicó este código y en los que los resultados resultan de sumo interés (Oude Essink, 2000; Van Meir *et al.*, 2000; Lebbe y Van Meir, 2000).

Sutra

Este código fue desarrollado por Voss (1984) y, al igual que MOC DENSE, en el marco del U.S. Geological Survey. Posteriormente se desarrolló SUTRA-3D por un equipo encabezado por Clifford Voss (Bear *et al.*, 1999), el cual posibilita elaborar modelos tridimensionales para simular los problemas de flujo y transporte, frente a los modelos bidimensionales –plantas o cortes- que permitía desarro-

llar el código original. Para ello se resuelven numéricamente mediante un método híbrido de elementos finitos y diferencias finitas integradas las respectivas ecuaciones de estado. Este método es robusto y preciso si las discretizaciones espaciales y temporales son las adecuadas. En la discretización temporal definición se adopta un esquema implícito de diferencias finitas. Las velocidades se calculan por un método de segundo orden, lo que le incrementa la precisión, en particular, al cálculo del transporte advectivo. El flujo se simula bajo condiciones de densidad variable del fluido y el transporte de energía térmica o de sólidos disueltos en medio poroso saturado, no saturado, anisótropo y heterogéneo, en régimen estacionario o transitorio. Las variables de estado con las que opera son la presión hidrostática, p , y uno de los siguientes, la temperatura, t , o la concentración de soluto, c , según el problema que se simule. En la modelización del transporte de solutos disueltos en agua subterránea se pueden incluir procesos de sorción en equilibrio con la matriz porosa, de decaimiento o de producción de primer orden y de orden cero, de advección, dispersión y difusión. El transporte de energía térmica se considera tanto en el flujo subterráneo como en la matriz sólida del acuífero. Las condiciones de contorno –entre los que se incluyen los términos fuentes/sumideros- pueden ser variables en el tiempo. Actualmente, existen versiones del código con interfaces de usuario muy desarrolladas y compatibles con herramientas informáticas de pre y posproceso que facilitan y aportan seguridad al trabajo del modelista. Este código ha sido validado con los problemas de Henry (1964) -intrusión marina-, de Elder (1967) -flujo gobernado por variación de densidad- y el de flujo radial con transporte de solutos o energía térmica hacia un pozo (Voss, 1984; Voss y Souza, 1987), de los que del primero y los últimos se conocen sus soluciones analíticas y del segundo su solución numérica. Asimismo, ha sido utilizado en muchas ocasiones para desarrollar el modelo de referencia en los procesos de contraste de distintos códigos. SUTRA fue aplicado en el ya referido ejercicio de contraste entre métodos lagrangianos-eulerianos y eulerianos, representando a los segundos (Benson *et al.*, 1998). Este código se utiliza ampliamente en los complejos problemas de flujo de densidad variable, como estudios de intrusión marina (Mushtaha *et al.*, 2000), efectos de mareas en acuíferos costeros (Ataie-Ashtiani *et al.*, 1999) o sobre paleoaguas (Koesters *et al.*, 2000). WATSUTRA es una versión modificada de SUTRA y fue desarrollado por J. Vander Kwaak en el marco del *Waterloo Center of Groundwater Research*, durante los años 1995-96 (Lahm *et al.*, 2000). Este código se diferencia del SUTRA básicamente en dos

aspectos numéricos: 1, el acoplamiento del programa WatSOLV que incrementa la rapidez y eficiencia en la resolución de grandes sistemas de ecuaciones y 2, no puede utilizar nudos que representen discontinuidades en las capas. Igualmente, se han desarrollado pre y posprocesadores específicos para este último código. La mejora introducida en su capacidad de cálculo ha permitido la aplicación del mismo para simular grandes sistemas regionales y períodos de tiempos extensos (Lahm and Bair, 1997a y b, 2000 y Lahm *et al.*, 1998).

Metropol

Este código fue desarrollado por el Instituto Nacional Holandés de Salud Pública y Protección Ambiental (Sauter *et al.*, 1983; en Oude Essink y Boekelman, 1998). Simula el flujo de agua subterránea bajo condiciones de densidad variable y el transporte simultáneo de contaminantes, para ello resuelve numéricamente las ecuaciones mediante el Método de los Elementos Finitos. Se ha aplicado para evaluar la seguridad de los almacenamientos profundos de residuos radioactivos en formaciones salinas y problemas de intrusión marina en acuíferos costeros regionales (Groen *et al.*, 2000).

HST3D

El HST3D fue desarrollado por K. Kipp Jr en el marco del *US Geological Survey*, su principal usuario (Kipp, 1987, en Heredia, 1991; SSG, 2001). El código simula el flujo bajo condiciones de densidad y viscosidad variables, transporte térmico y de solutos en acuíferos anisótropos y heterogéneos, en condiciones posibles de confinamiento, semiconfinamiento y libre y para regímenes estacionario y transitorio. El transporte de solutos considera los procesos de advección, dispersión, difusión, sorción y decaimiento lineal, disolución salina y lixiviación. Se pueden desarrollar modelos tridimensionales, aunque sólo se puede representar la zona saturada y el medio poroso. La resolución numérica de las ecuaciones de estado de flujo y transporte térmico y de solutos se realiza mediante el Método de Diferencias Finitas. Las variables de estado son la presión, la temperatura y la concentración de soluto. Las condiciones de contorno, inclusive los términos fuentes-sumideros, pueden definirse considerando su evolución temporal. La resolución de los sistemas de ecuaciones se puede realizar, según opción, con el método iterativo de sobrerrelajación sucesiva bilineal o el método de las

direcciones alternadas. El código fue contrastado satisfactoriamente con 8 soluciones analíticas de flujo, calor y transporte de soluto, así como con el código SUTRA, que fue utilizado para desarrollar la simulación de referencia. Por otro lado, Oude Essink y Boekelman (1998) referencian una aplicación poco satisfactoria de este código en un acuífero costero en Holanda, debido a la complejidad en su implementación y a que una dispersión hidrodinámica alta creó zonas salobres extensas y poco realistas que no concordaban con la situación real (Ossekopelle, 1993).

Motif

Código tridimensional desarrollado por la *Atomic Energy of Canada Limited (AECL)*. Este código simula en 3D los problemas de flujo subterráneo bajo condiciones de densidad y viscosidad variables, transporte de solutos -incluyendo radionucleidos- y transporte de calor en medios porosos y fracturados en condiciones saturadas y no saturadas. Los problemas se pueden resolver en régimen estacionario y transitorio y se puede representar la heterogeneidad y anisotropía del medio. La densidad y la viscosidad dinámica del fluido se establecen como dependientes de la temperatura, presión y concentración de soluto. La resolución numérica de las ecuaciones de estado acopladas de flujo y transporte se realiza mediante una técnica mixta de residuos ponderados y el método de los elementos finitos. Las condiciones de contorno que se pueden definir para los tres problemas sólo son las de Dirichlet -nivel o concentración prefijada- y la de Neumann -caudal o flujo másico prefijado-, pudiendo ser variable temporalmente. Los sistemas de ecuaciones acopladas de flujo y transporte no lineales se resuelven aplicando el método iterativo de Picard. Este código permite la discretización del medio mediante tres tipos de elementos finitos: elementos tridimensionales para el medio poroso, elementos bidimensionales para representar fracturas y elementos unidimensionales para representar canales estrechos. La discretización temporal se realiza mediante diferencias finitas. La ecuación de transporte resuelve los procesos de convección, dispersión hidrodinámica, sorción lineal y desintegración radioactiva -sólo una especie- y de transporte de cadenas de radionucleidos. La ecuación de transporte de calor resuelve los procesos de convección, dispersión hidrodinámica y producción. Este código ha sido verificado con seis soluciones analíticas, que contemplaban distintos caso de flujo y transporte de solutos y calor de un acuífero, comparado con distintos problemas experimentales, tanto de laboratorio

como de campo, y comparado con otros códigos. El código ha participado en el ejercicio internacional HYDROCOIN (Heredia, 1991). Asimismo se han abordado el estudio de grandes sistemas continentales, en el marco de las investigaciones canadienses para el almacenamiento profundo de residuos radioactivos (Ophori, 1997, 1998 a y b).

Swift

Este código -*Sandia Waste Isolation Flow and Transport, SWIFT*- fue desarrollado por Ward (1991) en un marco de colaboración entre GEOTRANS, INC. y *Sandia National Laboratories*. El mismo permite simular, en régimen transitorio, el problema de flujo y los de transporte de calor, soluto y cadenas de radionucleidos. Las ecuaciones de estado de estos problemas están acopladas mediante la densidad, la viscosidad del fluido y la porosidad. Además, el código simula en régimen estacionario el problema de flujo y el de transporte de solutos. Se pueden hacer representaciones tridimensionales de acuíferos confinados y libres en medios porosos y fracturados, para estos últimos pueden considerarse conceptualizaciones de fractura discreta y de doble porosidad. La migración dentro de la matriz rocosa está caracterizado por un proceso unidimensional. Asimismo se pueden estudiar medios heterogéneos y anisótropos. El transporte de solutos considera los procesos de advección, dispersión, difusión molecular, sorción, decaimiento radioactivo, disolución salina y lixiviación. Se aplica el método de diferencias finitas para la discretización tanto del dominio espacial como del temporal, para este último se pueden aplicar esquemas centrados e implícito. La resolución de los sistemas de ecuaciones se realiza mediante eliminación gaussiana o por sobrerelajación sucesiva bilineal. Las condiciones de contorno a imponer pueden ser las de Dirichlet, Neumann y Cauchy -mixta-, para cualquiera de los problemas, pudiendo además tener variación temporal. Este código se validó con 8 soluciones analíticas para flujo de calor y transporte y experiencias de laboratorio; además fue contrastado con un código de simulación del decaimiento radioactivo (Heredia, 1991).

Swicha

Este código fue desarrollado por GEOTRANS, INC. (Lester, 1991) y con el mismo se pueden simular los problemas de flujo, considerando la densidad variable del fluido, y el de transporte de soluto, tanto para

un régimen estacionario como transitorio. Se puede representar tridimensionalmente un medio poroso saturado, anisótropo y heterogéneo. Por lo que respecta al problema de transporte de soluto, la adsorción se representa mediante una isoterma de equilibrio y la desintegración se describe mediante una constante de desintegración de primer orden. El código discretiza el dominio con el método de los elementos finitos, usando elementos triangulares y rectangulares. Las ecuaciones de estado se resuelven mediante el método de Galerkin y en la resolución temporal se adopta un esquema en diferencias finitas de Crank-Nicholson. Los sistemas lineales de ecuaciones se resuelven secuencialmente mediante un esquema de relajación en láminas sucesivas (SSQR). El sistema no lineal resultante de aplicar Galerkin y Crank-Nicholson se resuelve mediante el método iterativo de Picard. Las condiciones de contorno que se pueden definir, tanto en flujo como en transporte, son las de Dirichlet y Neumann, pudiéndosele definir las correspondientes evoluciones temporales. Este programa presenta un recurso interesante para hacer frente a las oscilaciones en los resultados de la ecuación de transporte, el cual consiste en añadir una dispersión numérica (Oude Essink y Boekelman, 1998).

Feflow

El autor principal de FEFLOW fue J. Diersh, quien lo desarrolló en el marco del *Institute for Water Resources Planning and Systems Research, Ltd, WASY* (Diersh, 1997). Este modelo permite simular los problemas de flujo, bajo condiciones de densidad y viscosidad variables, y transporte de calor y de solutos, tanto para régimen estacionario como transitorio. Asimismo, estos problemas los puede representar en zona saturada y zona vadosa, considerando las eventuales heterogeneidades del medio y la anisotropía. La discretización espacial la realiza mediante el Método de los Elementos Finitos. Los procesos de transporte que se consideran son los de advección, sorción isotérmica lineal y no lineal, difusión molecular, dispersión hidrodinámica y decaimiento de primer orden. Las condiciones de contorno que se pueden aplicar en ambos problemas son las de Dirichlet, Neumann y Cauchy, considerando una eventual variación temporal. Las ecuaciones las resuelve aplicando el método de Gradientes Conjugados Precondicionados. Los problemas no lineales se resuelven aplicando los métodos de Picard o Newton con pasos de tiempo adaptativos. Posee recursos de modificación automática del mallado, con el fin evitar los clásicos problemas de dispersión numérica de los

métodos eulerianos. Este código tiene desarrollada una potente interfaz gráfica, que facilita el trabajo interactivo y es de gran utilidad en las labores de pre y pos proceso. En el marco de estos recursos, el FEFLOW tiene una estrecha vinculación con el SIG ARC/INFO, que permite la transferencia directa de información en ambos sentidos. Igualmente, entre los resultados que ofrece este código, se debe señalar los balances tanto hídricos como máscicos y que pueden comprender todo el dominio modelado o subzonas del mismo.

Seawat

La primer versión de este código, v1,1, fue desarrollada en 1998 por Weiging Guo (Missimer International, Inc.) y G. Bennett (Papadopoulos & Associates, Inc.). Posteriormente, a lo largo de 2002 en el marco del *U.S. Geological Survey*, se desarrollaron las versiones 2.10, en la que se adaptó el código original para la representación de sistemas de flujo bajo condiciones de densidad variable y las versiones 2.11 y 2.12 en las que se fue mejorando su capacidad de representación numérica (Guo and Langevin, 2002). El SEAWAT puede representar en 3D para régimen transitorio y en un medio poroso un sistema de flujo bajo condiciones de densidad variable, pero considera a esta exclusivamente como función de la concentración de soluto, despreciando los efectos de la temperatura. El código combina los difundidos programas MODFLOW y MT3DMS, para resolver de forma acoplada las ecuaciones de flujo y transporte de soluto, así muchos de los pre y posprocesadores desarrollados para estos códigos pueden ser usados al simular con el SEAWAT. El MODFLOW fue modificado para resolver la ecuación de flujo bajo condiciones de densidad variable mediante la reformulación del sistema de ecuaciones en términos de flujo máscico en vez de volumen de flujo, incluyendo los términos de densidad necesarios. La variación espacio-temporal de la concentración de soluto se simula utilizando las rutinas del MT3DMS. SEAWAT utiliza tanto el procedimiento explícito o implícito para acoplar las ecuaciones de flujo y de transporte de soluto. En el procedimiento explícito, la ecuación de flujo es resuelta para cada paso de tiempo y el campo de velocidades advectivas resultante se utiliza para resolver la ecuación de transporte, este procedimiento de resolución alterna de ambas ecuaciones se repite hasta completar el período simulado. En el procedimiento implícito, las ecuaciones de flujo y transporte son resueltas numerosas veces en cada paso de tiempo, hasta que la diferencia en la densidad del flui-

do entre iteraciones consecutivas es menor a la tolerancia especificada previamente. El SEAWAT fue testado mediante la resolución de los problemas de Henry (1964), de Elder (1967) y del caso 5 del nivel 1 del ejercicio HYDROCOIN -flujo de agua dulce sobre un domo salino- (Konicow *et al* 1997). Los problemas de Henry y Elder se contrastaron con su solución analítica y numérica, respectivamente, y ambos con las resoluciones numéricas obtenidas con SUTRA. Los resultados del caso de HYDROCOIN se contrastaron con los obtenidos por MOCDENSE. Asimismo se resolvieron dos modelos sintéticos en los que se verificó la correcta simulación del campo de velocidades.

Transdens

Este código se desarrolló en el marco del Grupo de Hidrogeología de la Universidad Politécnica de Cataluña que encabeza el Dr. J. Carrera. TRANSDENS se caracteriza frente a los códigos que se describen en que permite la calibración automática de los parámetros de las ecuaciones de flujo y transporte de solutos con o sin densidad variable (Hidalgo et al, 2004). Resuelve los problemas de flujo y transporte en regímenes estacionario y transitorio, tanto para medio saturado –ya sea libre o confinado–, como no saturado. La ecuación de transporte considera los fenómenos de advección, dispersión, reacciones químicas de primer orden (lineales), retardo, cadenas de desintegración y difusión en la matriz. Las condiciones de contorno que contempla son las de caudal prescrito, nivel prescrito y goteo, para la ecuación de flujo, y de masa prescrita, concentración prescrita y flujo máscico, para la ecuación de transporte. Estas condiciones de contorno pueden ser variables en el tiempo y el espacio. Las condiciones iniciales pueden ser arbitrarias dadas o tomarse como solución del régimen permanente. La resolución de la ecuación de transporte requiere conocer las velocidades en el sistema y los caudales en los contornos, que se obtienen por la resolución previa de la ecuación de flujo o suministrándosele través de la entrada de datos. Ambas ecuaciones pueden tratarse de forma desacoplada (densidad constante) o de forma acoplada (densidad variable). Las ecuaciones en derivadas parciales de flujo y de transporte de solutos se resuelven mediante el método de los elementos finitos en el espacio y diferencias finitas ponderadas en el tiempo. En la discretización del dominio espacial el código permite emplear elementos uni, bi o tridimensionales, lo que le otorga una gran versatilidad para simular con bastante precisión fracturas y sondeos en tres dimensiones. Para la discretización temporal el código

go emplea un esquema en diferencias finitas con ponderación variable, que va desde un esquema explícito hasta un esquema totalmente implícito. En el caso de densidad variable, las ecuaciones acopladas se pueden resolver mediante el método de Picard o el de Newton. El código TRANSDENS permite estimar automáticamente los parámetros de transmisividad, almacenamiento, recarga, niveles y caudales prescritos en el contorno y coeficientes de goteo, para la ecuación de flujo; de dispersividad, difusión molecular, porosidad, coeficiente de retardo, coeficiente de reacción de primer orden y concentraciones en el contorno, para la ecuación de transporte, y algunos parámetros específicos de las funciones no lineales que describen la dependencia entre las variables de estado y los parámetros físicos de las ecuaciones. La calibración automática de parámetros se hace mediante el método de máxima verosimilitud, lo que conlleva minimizar una función objetivo. La función objetivo que utiliza está compuesta por términos bien diferenciados que atienden al ajuste de niveles, al ajuste de concentraciones y a la desviación de la información previa de los parámetros. La minimización de la función objetivo se realiza mediante el método de Martquardt. El código permite realizar un análisis de sensibilidad automático ofreciendo distintos estadísticos como las matrices de covarianza y de correlación de estimación de los parámetros estimados. Asimismo, calcula criterios de selección de modelos que permiten contrastar distintos modelos conceptuales.

MVAEM

Este código a diferencia de los anteriormente presentados permite elaborar un modelo analítico del sistema estudiado. El código ha sido desarrollado por Strack (1995; en Oude Essink y Boekelman, 1998) a partir del modelo analítico MLAEM, que se amplió con un módulo de densidad variable. La descripción que se realiza a continuación es un extracto de la realizada por Oude Essink y Boekelman (1998). MVAEM permite calcular la distribución tridimensional de presiones en el sistema de flujo, de forma tal que pueda conocerse la distribución tridimensional de densidades en un acuífero. En la actualidad, este código presenta algunos inconvenientes: no es posible simular la dispersión hidrodinámica y la anisotropía y sólo representa el régimen permanente. El desplazamiento de los puntos con densidades a través de velocidades de flujo conocidas no se había resuelto hasta la publicación del citado artículo, debido a ello no es posible simular la intrusión de agua salada en función

del tiempo. Otra limitación que se vislumbra es que el interpolador multicuadrático-biarmónico que emplea para obtener la distribución tridimensional de la densidad en el acuífero y para controlar la suavidad y la evolución espacial de la distribución, puede no ser lo suficientemente robusto en todos los casos. Por otro lado, De Lange (1996) aplicó el método de los elementos analíticos para desarrollar el NAGROM - *National Groundwater Model*-, para sistemas acuíferos con densidad variable en los Países Bajos.

Ejercicios usuales de validación

Un aspecto fundamental en el desarrollo de los códigos es la validación de los mismos, para lo cual se contrastan el grado de dispersión numérica que presentan o la eficiencia del código en cuanto a la representación numérica de la conceptualización de un sistema, entre otros aspectos. En la validación de modelos Van Der Heijde (1985; en Jousma *et al.*, 1988) discrimina, quizás algo esquemáticamente, tres niveles diferentes:

- Nivel 1; se utilizan soluciones analíticas para depurar los programas, verificar globalmente la técnica numérica aplicada y contrastar aspectos particulares de la misma. Las comprobaciones van desde problemas simples unidimensionales, hasta problemas más complejos que tengan solución analítica.
- Nivel 2; comprobaciones en que se abordan tanto problemas teóricos como resultados de pruebas de laboratorio, analizando la respuesta del modelo al representar heterogeneidades, anisotropía, etc.
- Nivel 3; en este nivel la validación aborda la modelización de sistemas reales.

Los problemas bidimensionales de Henry (1964), en particular, y de Elder (1967) han sido muy utilizados en la validación de códigos de simulación de sistemas bajo condiciones de densidad variable. El primero (Henry, 1964; Croucher y O'Sullivan, 1995) representa un problema sintético de un acuífero confinado que sufre intrusión marina, se conoce su solución analítica. El segundo fue originalmente diseñado como un problema de flujo de calor (Elder, 1967), pero Voss y Souza (1987) los transformaron en un problema de aguas subterráneas bajo condiciones de densidad variable; en el que la circulación del sistema de flujo está gobernada por la diferencia de concentración entre sus bordes superior e inferior y la imposición de un nivel constante ($H = 0$ m) en los vértices superiores del dominio. Este problema se suele contrastar con la solución numérica dada por Elder

Por otro lado, desde mediado de los 80 y durante la última década de la pasada centuria se han desarrollado una serie de ejercicios internacionales de verificación y contraste de códigos numéricos, de forma resumida (Heredía, 1991) se destacan los siguientes:

- CHEMVAL/MIRAGE (CHEmical VALidation/MIgration of RADionuclidos the GEosphere): su objetivo es la validación de códigos geoquímicos y de transporte. Coordinado por W.K. Atkins and Partners y organizado por la CEE.
- HYDROCOIN (HYDROlogic COde INtercomparison): Su objetivo es la comparación de códigos de flujo hidrogeológico. El ejercicio considera 3 niveles: Nivel 1, verificación de códigos; Nivel 2, validación de los mismos y Nivel 3, análisis de sensibilidad e incertidumbre en los cálculos. Coordinado por SKI y desarrollado en el marco de la OCDE/NEA.
- INTRACOIN (INternational RADionuclide transporte COde of INtercomparison): Su objetivo es la comparación de códigos de transporte de solutos. El ejercicio considera 3 niveles: Nivel 1, verificación de códigos; Nivel 2, validación de los mismos y Nivel 3, análisis de sensibilidad e incertidumbre en los cálculos. Coordinado por SKI y desarrollado en el marco de la OCDE/NEA.
- MIRAGE (MIgration of RADionuclidos the GEosphere): su objetivo es comparar códigos geoquímicos y de transporte. Coordinado por Atkins R&D y organizado por la CEE.

En la polémica suscitada en torno al Caso 5 del Nivel 1 del ejercicio HYDROCOIN (Konikow *et al.*, 1997; Holzbecher *et al.*, 1998) ya referenciada en secciones anteriores, Konikow realiza una serie de interesantes reflexiones acerca de este tipo de ejercicios y sobre la valoración de los resultados que alcanzan. Así, partiendo de la premisa que los ejercicios de comparación de modelos son convenientes, observa que sus resultados deben ser adecuadamente valorados en cuanto a que reflejen la bondad de un código frente a los otros. Debido a la complejidad de los ejercicios que muchas veces se plantean, el grado de fidelidad con que un modelo representa el sistema estudiado se halla más estrechamente ligado con el modelo conceptual definido o la escala de discretización adoptada que con el método numérico con que se aborda la solución o la implementación que haga del mismo el código testeado. Konikow se refiere a la fidelidad en la representación como la "exactitud de la solución".

Bajo esta perspectiva crítica Konikow también plantea acertadamente que el uso de la media de las

soluciones como base o referente en la comparación puede hacer que el modelista olvide o pierda perspectiva respecto a la diferencia entre la "exactitud de la solución" y la precisión numérica del modelo. Por lo que, si la "solución" es significativamente diferente respecto a la media de las soluciones numéricas, entonces existirá un sesgo que refleja una pérdida de "exactitud" -de fidelidad en la representación-. Mientras que la desviación de un modelo individual respecto a la media sólo es una medida de la precisión numérica de dicho modelo respecto al conjunto de los modelos testeados y, si bien la precisión de un modelo es deseable, esta es insuficiente como medida de verificación. Así, en rigor, los ejercicios de contraste entre modelos en los que no existen ni una solución analítica o ni una "conocida" deberían llamarse "ejercicios de referencia" más que de verificación. Estrictamente, la comparación de resultados es en primer lugar una valoración de la consistencia del modelo antes que una evaluación de la "exactitud" del mismo (Konikow *et al.*, 1997).

Konikow en el último artículo de la citada polémica adopta una postura algo extrema, pero con observaciones no exentas de rigor. Así, sugiere que ninguno de los problemas de HYDROCOIN debería ser tomado como ejercicio de verificación de códigos numéricos; debido que al desconocerse la solución correcta de un ejercicio, se desconoce también si algún código la alcanza. Por otro lado, no obstante, aún si se conociera la solución correcta y que algún modelo la reprodujera, ello no prueba que el código utilizado sea el correcto -"el exacto"- y que el mismo ofreciera soluciones igualmente exactas para otros problemas, o aún para el mismo pero con una discretización espacial o temporal distinta a la utilizada (Konikow and Sanford, 1997). Por otro lado, se debe reflexionar sobre lo acertado que puede ser calificar de exacto, u óptimo, a un modelo en lo que respecta a representar un sistema real. En respuesta a ello se considera que lo adecuado es hablar en términos del grado de coherencia que puede guardar un modelo respecto al conocimiento que se posea del sistema, asumiendo la incertidumbre que dicho conocimiento tiene asociada (Heredía, 1994).

Conclusiones

La representación numérica de sistemas hidrogeológicos considerando la variabilidad de la densidad del fluido es un aspecto que no puede soslayarse tanto en estudios de acuíferos costeros como en problemas de almacenamiento profundo de residuos peligrosos. Un adecuado conocimiento de cualquiera de estos

sistemas y una cierta capacidad de evaluación de su evolución ante posibles actuaciones es fundamental para la gestión de los recursos hídricos, análisis de seguridad o estudios de impacto ambiental. El desarrollo de estos modelos numéricos es una labor compleja y ardua, cuyos resultados no están exentos de una apreciable incertidumbre. La misma tiene su origen no sólo en las limitaciones numéricas de la que adolecen los distintos métodos, sino también de la escasez de datos y la incertidumbre que caracteriza a la información de estos sistemas hidrogeológicos. Debido a ello, y a que las distintas técnicas numéricas ofrecen alguna ventaja o alguna limitación respecto a las demás, es importante que los técnicos tengan un adecuado conocimiento del código numérico a aplicar, para poder desarrollar las actividades del estudio, ya sea en campo o gabinete, optimizando los recursos.

En el presente trabajo se realiza un estado del arte actualizado de la modelización numérica de estos sistemas hidrogeológicos, en pos de ello se expone la algoritmia básica que debe resolverse. Se realiza una revisión general de los métodos, haciendo particular hincapié en la descripción de las técnicas numéricas. Posteriormente, se comentan los aspectos particulares que deben atenderse al desarrollar estos modelos numéricos. En este sentido se abordan, entre otros, el tema de la dispersión numérica y la distinta repercusión que este tiene en cada método numérico y el problema de truncamiento en el cálculo del campo de velocidades ante cambios bruscos en la densidad del fluido. Ambos aspectos afectan a la discretización espacial que se define en el dominio. Asimismo, se trata la idoneidad de cada método para representar las posibles condiciones de contorno del modelo o la necesidad de considerar la incidencia de la viscosidad en la representación. Se describen sucintamente los códigos numéricos más destacados, detallando autores, técnicas de resolución de las ecuaciones, alcance de los mismos, validaciones realizadas y reseña de los ejercicios o proyectos en que participaron. Finalmente, se listan los ejercicios internacionales de validación de códigos más importantes de las dos últimas décadas, reflexionando sobre las limitaciones que arrojan sus resultados.

Agradecimientos

Queremos expresar nuestro más sincero agradecimiento al Profesor Agustín Medina de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Camino, Canales y Puertos de Barcelona (U.P.C.) por la dedicación con

que ha revisado este trabajo y lo acertado de sus comentarios, así como a otro revisor anónimo.

Referencias

- Ataite-Ashtiani, B.; Volker, R. and Lockington, D. 1999. Tidal effects on sea water intrusion in unconfined aquifers. *Journal of Hydrology*, 216 (1-2), 17-31
- Bakker, M. 2000. Simple groundwater flow models for seawater intrusion. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting –SWIM-, 19-24.
- Bachu, S. 1995. Flow of variable-density formation water in deep sloping aquifers; review of methods of representation with case studies. *Journal of Hydrology*, 164 (1-4), 19-38.
- Bear, J. 1979. *Hydraulics of groundwater*, Mc Graw Hill, New York. USA. 567 pp.
- Bear J. A.H. and D. Zheng (1999) *Seawater intrusion in coastal aquifers: Concepts, methods and practices*. Kluwer Academic publishers. Dordrecht-Holland. 625 pp.
- Benson, D.; Carey, A. Wheatcraft S. 1998. Numerical advective flux in highly variable velocity fields exemplified by saltwater intrusion. *Journal of Contaminant Hydrology*, 34 (3), 207-233
- Bouzouf, B.; Ouazar, D.; Himi, M. and Casas, A. 2000. Salt water modeling and simulation of Llobregat Delta Aquifer. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting –SWIM-, 33-38.
- Carrera, J. 1985. La modelación del transporte de contaminantes en acuíferos: Métodos de Análisis y proceso de estudio. Aplicación a un caso real. Ponencia en la conferencia sobre Hidrología General y Aplicada, SMAGUA 85, 151-175.
- Croucher, A. and O'Sullivan 1995. The Henry problem for saltwater intrusion. *Water Resources Research*, 31 (7), 1809-1814.
- Custodio, E. y Llamas M. R. 1983. *Hidrología Subterránea* (2^o Edición) Editorial Omega. Barcelona
- De Josseling de Jones, G. 1965. A many valued holograph in an interface problem. *Water Resources Research*, 1 (4)
- De Lange, W. 1996. *Groundwater modeling of large domains with analytical elements* Ph.D. Thesis. Delft University of Technology.
- De Marsily, G. 1986. *Quantitative Hydrogeology. Groundwater Hydrology for Engineers*. Academic Press Inc.. San Diego, CA. 440 pp.
- Diersch, H.-J. G. 1997. *Interactive, graphics-based finite element simulation system FEFLOW for modeling groundwater flow, contaminant mass and heat transport processes. User's Manual Version 4.7*. WASY, Institute for Water Resources Planning and Systems Research, Ltd.. Berlin, Germany.
- Elder, J. W. 1967. Transient convection in a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 27 (3), 609-623.
- Evans, D. and Raffensperger, J. 1992. On the stream function for the variable density groundwater flow. *Water Resources Research*, 28 (8), 2141-2145.

- Freeze, R. and Cherry, J. 1979. *Groundwater*. Prentice-Hall. Englewood Cliffs. NJ. 604 pp.
- Gelhard, L. and Collins, M. 1992. General analysis of longitudinal dispersion in nonuniform flow. *Water Resources Research*, 7 (7), 1511-1521.
- Glover, R. 1959. The pattern of freshwater flow in a coastal aquifer. *Journal of Geophysical Research*. 64 (4).
- Groen, J.; Kooi, H.; Post, V. and De Vries, J.J. 2000. Fresh and moderately brackish groundwater in coastal plains and continental shelves: past and ongoing natural processes. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting –SWIM-. 73-80.
- Guo, W. and Langevin C. 2002. User's Guide to SEAWAT: A Computer Program for Simulation of Three-Dimensional Variable-Density Ground-Water Flow. USGS Techniques of Water Resources Investigations, 6 A7. 77 pp.
- Gupta, N. and Bair, S. 1997. Variable-density flow in the Midcontinent basins and arches region of the United States. *Water Resources Research*, 33 (8), 1785-1802.
- Henry, H. 1964. Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. *Sea Water in Coastal Aquifers. U. S. Geological Survey. Water Supply Paper*, 1613-C, 70-84.
- Heredia, J. 1991, *Caracterización mediante técnicas numéricas de medios de baja permeabilidad*. Documento n° 3: Reseña de códigos numéricos en hidrogeología. Informe interno. Consejo de Seguridad Nuclear.
- Heredia, J. 1994. *Determinación automática de la geometría de las formaciones hidrogeológicas*. Tesis Doctoral. Escola Tècnica superior d'Enginyers de Camins, Canals i Ports. Universitat Politècnica de Catalunya. 190 pp.
- Heredia, J. 1999. *Valoración y propuesta de configuración: SIG-Código de Vínculo-CNMH*. Memoria, Tomo 3. Proyecto: Síntesis hidrogeológica y modelización regional de un área granítica de la cuenca del Tajo. Informe final para ENRESA. Cod: 95-SHMR-IF.
- Hidalgo, J., Slooteen, L., Medina, A. and Carrera, J. 2004. *A Newton-Raphson based code for seawater intrusion modelling and parameter estimation*. Groundwater and saline intrusion. Selected papers. Araguás, Custodio and Manzano Eds.. 18th Salt Water Intrusion Meeting. Cartagena, Spain.
- Holzbecher, E. 1997. Comment on Constant-concentration boundary condition: Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem *Water Resources Research*, 34 (10), 2775-2778.
- IGWMC 1999. *Groundwater software catalog*. International Ground Water Modeling Center. Colorado School of Mines. Golden, CO 80401-1887. USA.
- Jousma, G.; Thorgborg, B. and Verrujuit A. 1988. Modelación de la Intrusión marina. Revisión de métodos. *TIAC'88, Tecnología de la Intrusión en Acuíferos Costeros*. Vol. I: Estado del arte a nivel nacional e internacional, 229-290.
- Kelly, M. and Bair, S. 1988. Difference in hydrodynamic interpretations based on equivalent freshwater heads versus variable-density heads. *Geological Society of America, 1988 annual meeting*. Abstracts with Programs, 20 (2), 103.
- Kipp, K. L.Jr. 1986. HST3D A computer Code formulation of heat and solute transport in three-dimensional groundwater flow systems. *IGWMC-UGGS, Water Resources Investigations Report* 86-4095.
- Koesters, E.; Vogel, P. and Schelkes, K. 2000. A paleohydrogeological approach to regional density-dependent groundwater modeling: A case study in Northern Germany. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting –SWIM-, 103-110.
- Kooi, H. and Groen, J. 2001. Offshore continuation of coastal groundwater systems, prediction using sharp-interface approximation and variable-density flow modelling. *Journal of Hydrology*. 246 (1-4). 19-35.
- Konikow, L.; Sanford, W. and Campbell, P. 1997. Constant-concentration boundary condition: Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem *Water Resources Research*, 33 (10), 2253-2261.
- Konikow, L. and Sanford, W. 1997. Reply on comment on Constant-concentration boundary condition: Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem *Water Resources Research*, 34 (10), 2779-2780.
- Lahm, T. and Bair, S. 1997a. The influence of regional despressurization in a salinity-derived variable-density groundwater environment. *Geological Society of America, 1997 annual meeting*. Abstracts with Programs, 29 (6), 75.
- Lahm, T. and Bair, S. 1997b. Role of salinity-derived variable-density flow in the displacement of brine from shallow, regionally extensive aquifer. *Geological Society of America, 1997 annual meeting*. Abstracts with Programs, 29 (6), 75.
- Lahm, T. and Bair, S. 2000. Regional despressurization and its impact on the sustainability of freshwater resources in an extensive Midcontinent variable-density. *Water Resources Research*, 36 (11), 3167-3177.
- Lahm, T.; Bair, S. And Vander Kwaak, J. 1998. Role of salinity-derived variable-density flow in the displacement of brine from shallow, regionally extensive aquifer. *Water Resources Research*, 34 (6.), 1469-1480.
- Lebbe, L. and Van Meir, N. 2000. Sensivity analyses of pumping test in salt-fresh water aquifer 2: drandown and joint confidence regions. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting –SWIM-,151-160.
- Lester, B. 1991. SWICHA. *A three-dimensional finite element code for analysing seawater intrusion in coastal aquifers. Version 5.05*. Geo-Trans, Inc., Sterling Virginia, USA. IGWMC, Delft, Netherlands.
- Mushtaha A.; Amjad S. A. and Mackay 2000. The use of scavenger wells to control saltwater upcoming in Gaza, Palestine. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting -SWIM-, 109-116.
- Neuman, S. 1983. *Computer prediction of subsurface radionuclide transport – An adaptive numerical methods* Nuclear Regulatory Comission Report. N°, nureg/cr-3076.
- Osenkopppele, H. 1993. *Modeling the distribution and the movement of fresh, brackish and saline groundwater in the sand-dune area of Amsterdam Waterworks*. (en neerlandes). M. Sc. Thesis at the Delf Universty of Technology, 411 pp.
- Olsthorh, T.N. 2000. Brackish-saline water movement in the

- southern part of the Amsterdam Dune Water Area, 1925-2025. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting -SWIM-, 119-126.
- Ophori, D. 1997. A numerical simulation analyses of viscosity invariable-density flow of groundwater. *Geological Society of America, 1997 annual meeting. Abstracts with Programs*, 29 (6), 75.
- Ophori, D. 1998a. Flow of groundwater with variable density and viscosity. Atitokan Research Area, Canada. *Hydrogeological Journal*, 6 (2). 193-203.
- Ophori, D. 1998b. The significance of viscosity and density-dependent flow of groundwater. *Journal of Hydrology*, 204 (1-4), 261-270.
- Oude Essink, G.H. 1998. Density dependent groundwater at the island of Texel, The Netherlands. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting -SWIM-, 47-54.
- Oude Essink, G.H. 1999. Simulating density dependent groundwater flow: the adapted MOC3D. Proceedings 15th Salt Water Intrusion Meeting -SWIM-. Ghent, Belgium, 69-79.
- Oude Essink, G.H. 2000. Density dependent groundwater at the island of Texel, The Netherlands. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting -SWIM-. 47-54.
- Oude Essink, G. H. y Boekelman, R. H. 1998. Problemas con el modelado a gran escala de la intrusión de agua salada en 3D Traducción Custodio, J.. *Boletín Geológico y Minero*, 109 (4), 403-420.
- Sandford, W. E. and Konikow, L.F. 1985. MOC3DENSE. A two constituent solute-transport model for groundwater having variability density. USGS, *Water Resources Investigations Report* 85-4279.
- Sauter, F.; Leijnse, A. and Beusen, A. 1993. *METROPOL. User's Guide*. Report Number 725205.003. National Institute of Public health and Environmental Protection. The Netherlands. 102 pp.
- Senger, R. and Fogg, G. 1990a. Stream functions and equivalent freshwater heads for modelling regional flow of variable-density groundwater; 1, Review of theory and verification. *Water Resources Research*, 26 (9), 2089-2096.
- Senger, R. and Fogg, G. 1990b. Stream functions and equivalent freshwater heads for modelling regional flow of variable-density groundwater; 2, Application and implications for modeling strategy. *Water Resources Research*, 26 (9), 2097-2106.
- Schincariol, R. 1998. Dispersive mixing dynamics of dense miscible plumes: natural perturbation initiation by local-scale heterogeneities. *Journal of Contaminant Hydrology*, 34 (3), 247-271.
- Shikaze, S.; SudickY, E. and Schartz F. 1998. Density-dependent solute transport in discretely-fractured geologic media; is prediction possible. *Journal of Contaminant Hydrology*, 34 (3), 273-291.
- Strack, O. 1987. Groundwater mechanics. Prentice Hill, N.J.
- Strack, O. 1995. A Dupuit-Forcheimer model for three dimensional flow with variable density. *Water Resources Research*, 31 (12), 3007-3017.
- SSG 2001. *Environmental Software and Publications*. Catalog. Scientific Software Group. P.O. Box 23041, Wsashington, DC, 20026-3041
- Van Der Heijde, P. 1987. Quality assurance in computer simulations of groundwater contamination. *Environmental Software*. Vol. 2.
- Van Meir, N.; Lebbe, L. and Oude Essink G.H.P. 2000. Sensivity analyses of pumping test in salt-fresh water aquifer 1. Concentration changes. Proceedings of the 16th Salt Water Intrusion Meeting -SWIM-, 141-150.
- Van Der Veer, P. 1977. Analytical solution for steady interface flow in a coastal aquifer involving a phreatic surface with precipitation. *Journal o Hydrology*, 34, 1-11.
- Voss, C.I. and Souza, W. 1987. Variable density flow and solte transport simulation of regional acuífers containing narrow. Freshwater-saltwater transtion zone. *Water Resources Research*, 23 (10), 1851-1866.
- Voss, C.I. 1984. SUTRA. *A finite element, fluid-density-dependent goundwater flow eith energy transport or chemically reactive single-species solute transport*. USGS, *Water Resources Investigations Report* 84-4369.
- Ward, D.S. 1991. *Data input for SWIFT v.2.50*. Geo-Trans Technical Report. Sterling, Virginia, USA.
- Waterloo Hydrogeologic, 2001. *Groundwater Software Bulletin*. Waterloo Hydrogeologic, Inc. 180 Columbia St. W.- Unit 1104. Waterloo, Ontario, Canada.

Recibido: diciembre 2006

Aceptado: mayo 2007