

Simulación y calibración de problemas de intrusión marina: hipótesis básicas e implicaciones

J.J. Hidalgo⁽¹⁾, L.J. Slooten⁽¹⁾ y J. Carrera⁽²⁾

(1) Dpto. Ingeniería del Terreno, Cartográfica y Geofísica, Universidad Politécnica de Cataluña (UPC), Campus Norte, Mod. D-2, c/ Jordi Girona 1-3, 08034, Barcelona.
E-mails: juan.hidalgo@upc.edu; luitjan.slooten@upc.edu

(2) Instituto de Ciencias de la Tierra "Jaume Almera" (CSIC), c/ Lluís Solé i Sabarís s/n, 08028, Barcelona.
E-mail: jcarrera@ija.csic.es

RESUMEN

Los principios que gobiernan el flujo con densidad variable están bien establecidos a nivel teórico y existen múltiples códigos que lo modelan con precisión. Sin embargo, en la práctica se comenten errores que violan dichos principios. En este artículo se revisan las hipótesis básicas y sus implicaciones bajo una triple perspectiva: formulación matemática, métodos numéricos y modelación (optimización). Respecto a la formulación matemática, conviene insistir que no existe un potencial para el flujo con densidad variable. El nivel equivalente de agua dulce sólo es informativo de la dirección del flujo en las zonas en las que el agua es efectivamente dulce. Además, sigue siendo frecuente encontrar modelos que tratan el mar con condición de contorno de concentración fija, lo cual es doblemente erróneo: la mayoría de los códigos no lo tratan bien y no constituye una buena representación del fenómeno. En cuanto a los métodos numéricos, existe una gran variedad y la mayoría de los conocidos funciona bien, excepto en lo relativo a la condición de contorno de concentración fija. Las comparaciones deben efectuarse en función de la facilidad que tengan para introducir condiciones de contorno realistas en el mar y del tratamiento de velocidades (lo mejor es emplear un esquema coherente). Aquí se ha enfatizado la solución mediante el método de Newton-Raphson, no tanto por la mejora de eficiencia que implique (los problemas de intrusión marina son cuasi-lineales) como por las ventajas que presenta para la optimización, último objetivo de la modelación.

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

Simulation and calibration of saltwater intrusion problems: basic assumptions and implications

ABSTRACT

The governing principles of density dependent are well established theoretically, and there are many computer codes that model them with precision. However, in practice it is common to find models that violate these principles. In this article the basic principles and their implications are reviewed from three perspectives: the mathematical formulation, the numerical methods, and the modelling process (optimization). Regarding the mathematical formulation perspective, it must be emphasized that there exists no potential for density dependent flow. The equivalent freshwater head is informative about the flow direction only in those regions where the water is actually freshwater. In addition, it is still common to find models where the sea boundary is treated as a prescribed concentration boundary, which is twofold erroneous: most codes do not treat this boundary condition correctly, and it is not a good representation of the phenomenon. With respect to numerical methods, there is a wide variety of them and most work well, except regarding the fixed concentration boundary. Comparisons should be made in terms of how easy it is to implement realistic coastal boundary conditions and in terms of how the velocity is treated (a consistent scheme is the best). Here, the solution by means of the Newton-Raphson method is emphasized, not so much because of the improved efficiency it offers (saltwater intrusion problems are quasi-linear), but because of the advantages it offers when solving optimization problems, the final goal of modelling.

Key words: density-dependent flow, groundwater numerical modelling, seawater intrusion

Introducción

Las ecuaciones y principios básicos que rigen el flujo de agua con densidad variable fueron establecidos por Cooper (Cooper, 1959) de forma bastante definiti-

va. Desde entonces se ha avanzado mucho en el concepto y, sobretudo, en la capacidad de solución numérica de ecuaciones. De hecho, el paradigma vigente en la época, que Henry (Henry, 1964) resolvió a instancias del propio Cooper, es una representación

muy pobre del fenómeno (ver Abarca *et al.*, 2007a). Fue adoptado porque podía resolverse de manera semianalítica.

El aumento de la potencia de cálculo y de la disponibilidad de códigos, sin embargo, no debe eximir de la responsabilidad profesional de conocer los principios en los que se basa un ramo del conocimiento. De hecho, se puede argumentar que ni la potencia de cálculo ni los códigos pueden ser bien aprovechados si no se conocen dichos principios. Irónicamente, el efecto puede ser el contrario.

El objetivo de este artículo es revisar los principios en que se basa la modelación de flujo con densidad variable, desde la perspectiva que da la experiencia que la Hidrogeología ha ido acumulando en los últimos años. Para ello, se empieza formulando la ley de Darcy como segunda ley de Newton (conservación de la cantidad de movimiento) en medios porosos. Ello pone de manifiesto que se debe escribir en presiones,

de manera que el nivel deja de tener sentido (al menos como indicador de la dirección de flujo). A continuación, se revisa la ecuación de transporte y las diversas maneras en que se puede escribir. Aquí se introduce la novedad del flujo másico asociado a la condición de contorno de concentración fija. Vistas las ecuaciones, se revisan los métodos numéricos. Se tratan las peculiaridades que impone el flujo con densidad variable: tratamiento de la densidad, necesidad de definir la velocidad de manera coherente y el acoplamiento de las ecuaciones de flujo y transporte. Se enfatiza la formulación de la solución mediante el método de Newton-Raphson por las ventajas que tiene de cara a la optimización. Se revisan preferentemente los diversos métodos numéricos, con énfasis en los criterios de comparación. El artículo acaba con una sección dedicada al incipiente campo de la optimización de problemas de flujo con densidad variable.

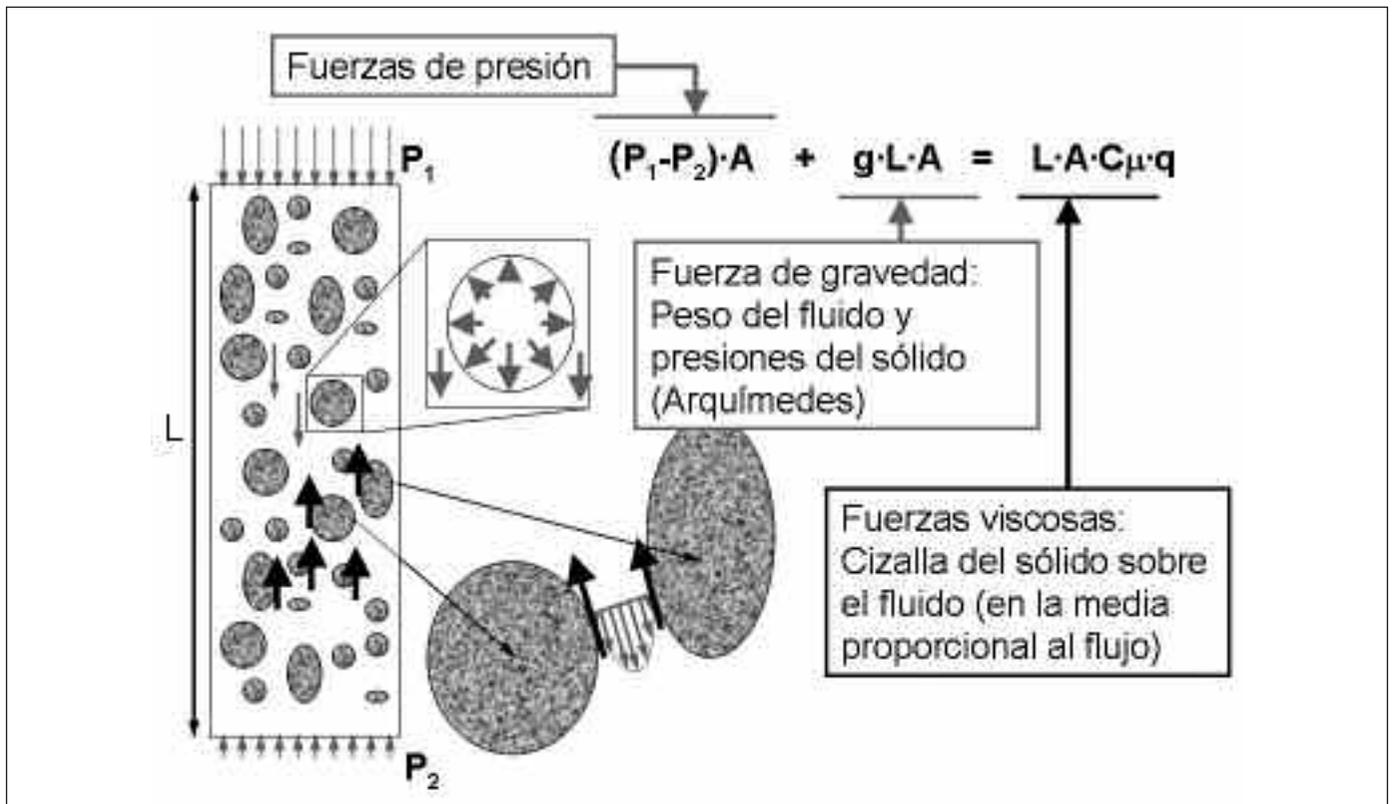


Figura 1. El flujo del agua a través de medios porosos resulta del equilibrio entre fuerzas de presión, las gravitatorias (peso del agua más la resultante de las fuerzas normales ejercidas por los granos) y las viscosas (fuerzas de cizalla proporcionales a la velocidad y a la viscosidad)

Figure 1. Water flow through a porous medium results from the equilibrium between the pressure force, the gravitational force (the weight of the water plus the resultant of the normal forces exerted by the grains) and the viscous forces (shear forces proportional to the velocity and to the viscosity velocity)

Ecuaciones de flujo y transporte en intrusión marina

La intrusión marina está descrita por la ley de Darcy y las ecuaciones de flujo y transporte. Más allá de su carácter matemático, estas tres ecuaciones poseen un significado físico en el que se basa la dinámica del agua subterránea. Los principios básicos de conservación de la cantidad de movimiento y masa son la clave para entender, caracterizar y modelar la intrusión marina.

Movimiento del agua subterránea: Ley de Darcy.

El movimiento del agua subterránea está gobernado por la ley de Darcy:

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

donde $q[LT^{-1}]$ es la velocidad de Darcy, $k[L^2]$ es el tensor de permeabilidad hidráulica, $\mu[ML^{-1}T^{-1}]$ es la viscosidad dinámica, $p[ML^{-1}T^{-2}]$ es la presión, $\rho[ML^{-3}]$ es la densidad del fluido y $g[LT^{-2}]$ es el vector gravedad. Aunque esta ley fue obtenida empíricamente por Henry Darcy (Darcy, 1856), representa el principio de conservación de la cantidad de movimiento del fluido (Bear, 1972; Whitaker, 1986; Hassanizadeh, 1986). Esto implica que la ley de Darcy puede interpretarse como una ley de equilibrio entre las fuerzas que actúan sobre el fluido (Figura 1). El fluido se mueve debido a las diferencias de presión y la fuerza de la gravedad. A este movimiento se oponen las fuerzas de carácter viscoso. Las fuerzas viscosas son proporcionales a la velocidad del fluido y representan la resistencia del medio al flujo.

La ecuación (1) es la forma en presiones de la Ley de Darcy. De acuerdo con ella el movimiento del agua viene controlado por el gradiente de presiones y el efecto de la gravedad, también llamado flotación. La fuerza de flotación es fundamental para entender la dinámica de los fenómenos de intrusión marina. El carácter de esta fuerza puede comprenderse mejor si se expresa la ley de Darcy en términos del nivel equivalente de agua dulce, que se define como la altura de una columna de agua dulce con la misma presión en el punto de medida, es decir,

$$h_f = \frac{p}{\rho_0 g} + z \quad (2)$$

donde $h_f[L]$ es el nivel equivalente de agua dulce, ρ_0 es

la densidad del agua dulce y $z[L]$ la elevación. Sustituyendo (2) en (1) se obtiene la ley de Darcy en términos de nivel equivalente de agua dulce

$$q = -\frac{k}{\mu} \rho_0 g \left(\nabla h_f + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \quad (3)$$

donde ∇z es un vector unitario en dirección opuesta a la gravedad.

De acuerdo con la ecuación (3), el término de flotación puede interpretarse como la fuerza que experimenta un fluido de densidad ρ inmerso en otro de densidad ρ_0 . Es una fuerza en dirección vertical dependiente del contraste de densidades. Este término es la principal diferencia con el flujo con densidad constante, y tiene varias consecuencias importantes. En primer lugar confiere al flujo un marcado carácter tridimensional. Las representaciones bidimensionales de la intrusión marina, aunque útiles para la comprensión del fenómeno, a menudo simplifican el funcionamiento de acuíferos reales. Los efectos de la topografía del fondo del acuífero y los flujos laterales han de ser cuidadosamente considerados (Abarca *et al.*, 2007b). En segundo lugar, la variabilidad del término de flotación impide que el flujo se pueda representar como el gradiente de un campo escalar. Es decir, no existe un potencial hidráulico en el flujo con densidad variable. La consecuencia directa es que las líneas de igual nivel equivalente de agua dulce (y mucho menos las de igual presión) no son informativas sobre el flujo. Cuando la densidad es variable, la dirección de flujo no es perpendicular a ellas (Figura 2). En último lugar, la densidad depende de la concentración. Es frecuente suponer dependencias de la forma

$$\rho = \rho_0 (1 + \beta_\omega) \quad \rho = \rho_0 e^{\beta_\omega \omega} \quad (4)$$

donde $\beta_\omega[-]$ es una constante empírica y $\omega[-]$ es la fracción másica de sal en el fluido. Esta dependencia implica que el flujo depende de la concentración. Es decir, flujo y transporte están acoplados. La dependencia con la concentración de sal se modela de diferentes formas. Para el rango de concentración que se encuentra en los problemas de intrusión marina una aproximación lineal es suficiente (Voss y Souza, 1987), si bien es la forma exponencial la que mejor se ajusta a los datos experimentales en un rango mayor. Una recopilación de las expresiones habituales y su comparación con datos experimentales puede encontrarse en (Woods, 2004).

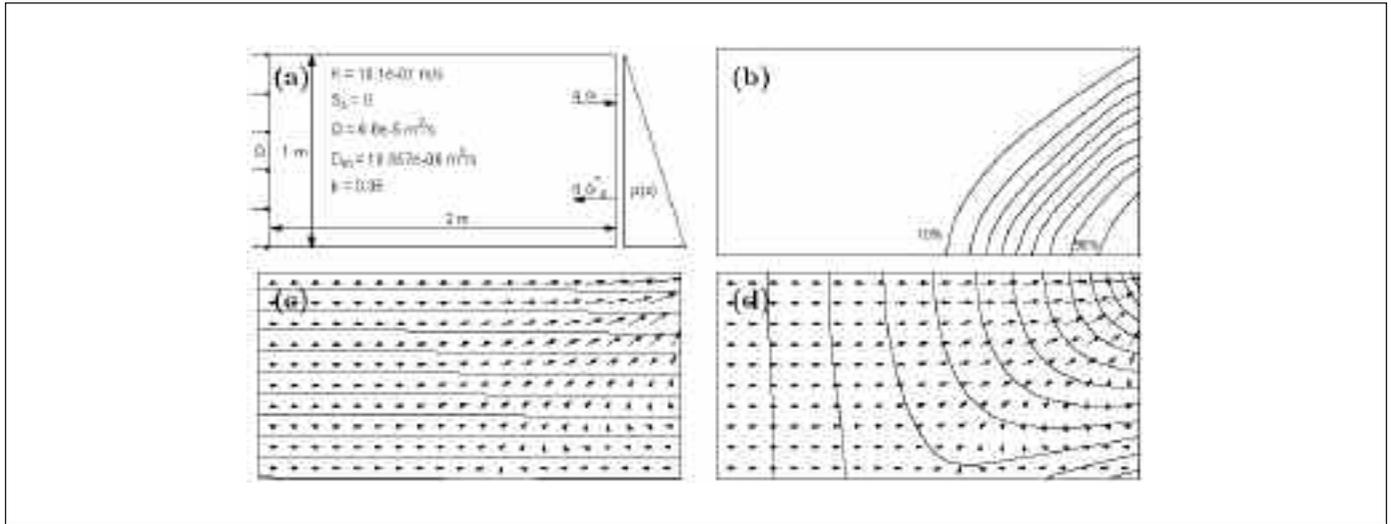


Figura 2. El problema de Henry es un paradigma de intrusión marina, aunque en la forma difusiva que aquí se presenta no sea muy realista. Se muestran: (a) la definición, isolíneas de (b) concentración, (c) nivel equivalente de agua dulce y (d) presión. Las flechas representan la velocidad del fluido. Obsérvese que las líneas de igual nivel equivalente de agua dulce sólo son perpendiculares a la dirección de flujo en la zona de agua dulce. Nótese también que la condición de contorno en el lado mar es de flujo másico impuesto (igual a q_w en la zona de salida y a q_w , en la de entrada)

Figure 2. The Henry problem is a paradigm for saltwater intrusion, although the diffusive form here shown is not a realistic one. The picture shows (a) the definition of the problem, isolines of (b) concentration, (c) equivalent freshwater head and (d) pressure. Arrows represent fluid velocity. Notice that the lines of equal equivalent freshwater head are perpendicular to the flow direction only in the freshwater zone. Note also that the seaside boundary condition is a prescribed mass flux (equal to q_w if fluid leaves the system and and to q_w , if fluid enters the system)

Balance de masa de fluido: Ecuación de flujo

La ecuación de flujo representa el balance de masa de fluido en el acuífero. La masa de fluido por unidad de volumen de medio $M_f[M]$ que viene dada por

$$M_f = \rho\Theta \tag{5}$$

donde $\Theta[-]$ es el contenido volumétrico de agua (en realidad, debería llamarse contenido volumétrico de fluido, ya que es el volumen de fluido por unidad de volumen de acuífero). La ecuación de flujo toma la forma

$$\frac{\partial \rho\Theta}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho q) + r \tag{6}$$

donde r son las fuentes o sumideros de fluido.

Como ley de conservación, la ecuación de flujo establece un equilibrio entre el almacenamiento en el sistema y las entradas y salidas. El fluido se considera formado por dos componentes, agua y sal. Así, la

ecuación (6) comprende todas las componentes del sistema y no sólo el agua. Por tanto, las fuentes y sumideros de fluido pueden tener dos naturalezas distintas según afecten a una de las componentes del fluido o a ambas. Teniendo en cuenta esta característica puede escribirse

$$r = \rho^* Q + m_s \tag{7}$$

El término $\rho^* Q$ representa las fuentes o sumideros de fluido en forma líquida y $m_s [MT^{-1}L^{-3}]$ las de sal pura. $Q [L^3T^{-1}L^{-3}]$ es el volumen de fluido por unidad de tiempo y volumen de acuífero y ρ^* su densidad. Es importante destacar la necesidad de incluir la densidad del fluido. A diferencia de las situaciones con densidad constante, no es suficiente con conocer el caudal extraído o inyectado. Es necesario, además, conocer la densidad del fluido fuente o sumidero. De esta forma, este término puede modelar tanto agua dulce como fluido con cierta concentración de sal. Las contribuciones a la masa total de fluido de fuentes o sumideros de sal pura, m_s suelen considerarse despreciables (Voss y Provost, 2002).

El almacenamiento de fluido se produce tanto por la compresibilidad del medio poroso y del propio fluido como por las variaciones de sal disuelta. Si se expande en términos de nivel equivalente de agua dulce y fracción másica sal ω , se obtiene

$$\frac{\partial(\rho\Theta)}{\partial t} = \rho S_s \frac{\partial h_f}{\partial t} + \rho\beta_\omega \Theta \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (8)$$

donde $S_s[L^{-1}]$ es el coeficiente de almacenamiento específico.

El coeficiente de almacenamiento considera implícitamente la compresibilidad del fluido. Sin embargo, es habitual considerar la densidad del fluido dependiente sólo de la cantidad de sal disuelta, ya que su compresibilidad es baja.

La complejidad de la ecuación de flujo con densidad variable ha motivado el estudio de diferentes aproximaciones simplificadoras. La más sencilla de ellas es la aproximación de interfaz abrupta. Esta aproximación supone que no hay mezcla entre el agua dulce y el agua salada y que se cumple la aproximación de Dupuit (es decir, el flujo es horizontal). Bajo estos supuestos, en el caso estacionario, el agua salada está en reposo, lo que facilita definir la ecuación de la interfaz a partir de la relación de Ghyben-Herzberg (Ghyben, 1889; Herzberg, 1901; Huyakorn *et al.*, 1987) que relaciona la altura piezométrica con la profundidad de la interfaz agua dulce - agua salada.

Otra aproximación habitual es la aproximación de Oberbeck – Boussinesq (Oberbeck, 1987; Boussinesq, 1903). En este caso se considera que el gradiente de densidades es pequeño o perpendicular al flujo de agua. Esta simplificación es bastante válida en régimen estacionario, en el que las líneas de igual concentración son subparalelas al flujo (ver, p. ej., Figura 2). Despreciando, además, la variación temporal de la densidad, la ecuación de flujo queda:

$$S_0 \frac{\partial h_f}{\partial t} = -\nabla q + r \quad (9)$$

Esta aproximación equivale a suponer que la conservación de masa y volumen son equivalentes. La aproximación es válida cuando las velocidades siguen las líneas de isoconcentración (Bear, 1972). Los errores cometidos con esta aproximación son proporcionales al gradiente de concentración. Evans y Raffensperger (1992) encontraron diferencias de alrededor de un 9% en las funciones de corriente.

Cuanto menores sean los gradientes de concentración mejor será la aproximación.

Para resolver la ecuación de flujo es necesario imponer condiciones de contorno al sistema. Las condiciones de contorno establecen una relación entre el flujo externo y el interno en la frontera del sistema. Matemáticamente se expresa como

$$\rho q \cdot n = \rho^* q_b \cdot n + j_s \quad (10)$$

donde n es el vector normal al contorno, y $q_b[LT^{-1}]$ es el flujo en el contorno y $j_s[ML^{-2}T^{-1}]$ es el flujo de sal pura expresado por unidad de superficie.

Las condiciones de contorno pueden imponerse tanto sobre la variable de estado como sobre los flujos másicos. A menudo, en lugar de especificar el flujo en el contorno se prescribe el valor de la variable de estado. Las condiciones de presión (o nivel) prescrita se utilizan para representar zonas en las que el valor de la presión es conocido tales como piezómetros, ríos o el contorno de mar. Cuando se trabaja con niveles equivalentes de agua dulce hay que tener especial cuidado al imponer este tipo de condición. En el caso del mar, el nivel equivalente crece con la profundidad. Los registros piezométricos han de tratarse con especial cuidado, ya que la elevación medida en el pozo no se corresponde con el nivel equivalente de agua dulce, el cual depende del grado de mezcla de la columna de agua (Custodio y Llamas, 1976).

Cuando se especifica el flujo en el contorno, hay que tener en cuenta que se trata de un caudal másico y no volumétrico. Esta condición de contorno se utiliza para simular bombeos, inyecciones y adición de sal. El flujo másico puede ser en forma de salmuera (ρ^*Q) o como sal (j_s). A menudo, el flujo másico depende de la propia variable de estado en el contorno. En ese caso, la condición de contorno se llama mixta y el flujo másico es proporcional a la presión externa. Es una condición más apropiada para modelar las interacciones río - acuífero y los contactos con el mar, ya que a menudo la conexión con el acuífero no es directa.

Balance de masa de soluto: Ecuación de transporte

Al igual que la ecuación de flujo, la ecuación de transporte representa la conservación de masa. En este caso, se conserva la masa de soluto, que expresada por unidad de volumen de acuífero es $\rho\Theta\omega$. Por tanto, la ley de conservación se expresa

$$\frac{\partial(\rho\Theta\omega)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho q\omega) + \nabla \cdot (\rho(D_m + D)\nabla\omega) + \rho^* Q\omega^* + m_s \quad (11)$$

donde $D_m[L^2T^{-1}]$ es el coeficiente de difusión molecular, $D[L^2T^{-1}]$ el tensor de dispersión hidrodinámica y ω^* la fracción másica de sal de la fuente o sumidero de soluto.

El término de almacenamiento expresa la variación de masa de soluto por unidad de acuífero y tiempo. La variación se debe a dos factores: a variaciones de concentración y variaciones volumen de fluido Θ . Con frecuencia, el volumen de fluido se considera constante e igual a la porosidad. Sin embargo, esto puede llevar a graves errores tanto en el balance de masa de soluto como en la solución de transporte cuando las variaciones de nivel son grandes (Goode, 1992). De hecho, cuando Θ es muy variable este término debe tratarse con cuidado para evitar errores de balance de masa (Saaltink *et al.*, 2004).

En la ecuación (11) el flujo másico por difusión - dispersión está escrito según la ley de Fick. La elección del tensor de dispersión es fundamental para el resultado de los modelos. La dispersión afecta a la forma y penetración de la cuña de intrusión marina. Una dispersión alta provoca una zona de mezcla ancha y una cuña que penetra poco en el acuífero, mientras que la dispersión baja tiene el efecto contrario. También se ha demostrado que el ancho de la interfaz es proporcional a la media geométrica de los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal (Abarca *et al.*, 2007a). Voss y Provost (2002) proponen utilizar coeficientes de dispersión longitudinal y transversal no isotrópicos para controlar más eficazmente la forma de la interfaz.

La ecuación (11) contiene información sobre el balance de masa de fluido que ya se tiene en cuenta en la ecuación de flujo (6). Por esta razón, a menudo se resta de la ecuación de transporte la ecuación de flujo multiplicada por la fracción másica de soluto de agua residente. Se obtiene la llamada forma advectiva de la ecuación de transporte.

$$\rho\Theta \frac{\partial\omega}{\partial t} = -\rho q \cdot \nabla\omega + \nabla \cdot (\rho(D_m + D)\nabla\omega) + \rho^* Q(\omega^* - \omega) + m_s(1 - \omega) \quad (12)$$

La ecuación (12) resuelve el mismo problema y proporciona el mismo resultado para la variable de estado que (11), si bien no constituye un balance de

masa de soluto. Cabe insistir en que esta forma de la ecuación, que es la más habitual, no precisa que ni $\rho\Theta$ ni q sean constantes.

Para resolver la ecuación de transporte es necesario imponer condiciones de contorno. Estas condiciones se refieren al flujo másico de soluto a través de las fronteras del sistema.

$$(\rho\omega q - \rho D\nabla\omega) \cdot n = \rho^* q_b\omega^* + j_s \quad (13)$$

Al igual que en flujo, a menudo se suele prescribir el valor de la concentración en el contorno en lugar del flujo másico. Esta condición, aunque habitual en la práctica, no es frecuente en la naturaleza. Su uso está desaconsejado en la mayoría de los casos ya que introduce gran cantidad de soluto en el sistema por mecanismos difusivos-dispersivos (Konicow *et al.*, 1997). Uno de los errores más frecuentes relacionados con esta condición de contorno es considerar el contacto entre el acuífero y el mar como un contorno de concentración fija. Esta confusión aparece de forma recurrente en la literatura. La condición adecuada para simular el mar es la de flujo másico con concentración dependiente de la dirección de flujo. Esta condición establece que si se trata de una entrada, el fluido tendrá la concentración externa y si se trata de una salida, la concentración del acuífero. Se debe asociar este tipo de condición de contorno a todas las zonas que en las que haya una entrada o salida de fluido. El efecto de ambos tipos de condiciones sobre el contorno de mar puede verse en la Figura 3. Además, si las fuentes de soluto puro no están consideradas en las condiciones de contorno de flujo, se produce una incoherencia en el balance de masa que puede tener graves efectos sobre la solución (Hidalgo *et al.*, sometido). Esta inconsistencia se da en la mayoría de los códigos de densidad variable disponible.

Resolución del flujo y del transporte

De las ecuaciones en derivadas parciales a un sistema matricial

Las ecuaciones (6) y (12) no suelen tener una solución analítica, de modo que el procedimiento habitual para resolverlas es aproximarlas mediante métodos numéricos tales como elementos finitos, diferencias finitas o similares. Así, se reduce la dimensión del problema a resolver, que pasa a ser finita (sólo se resuelve en los nudos o celdas) y se posibilita la reso-

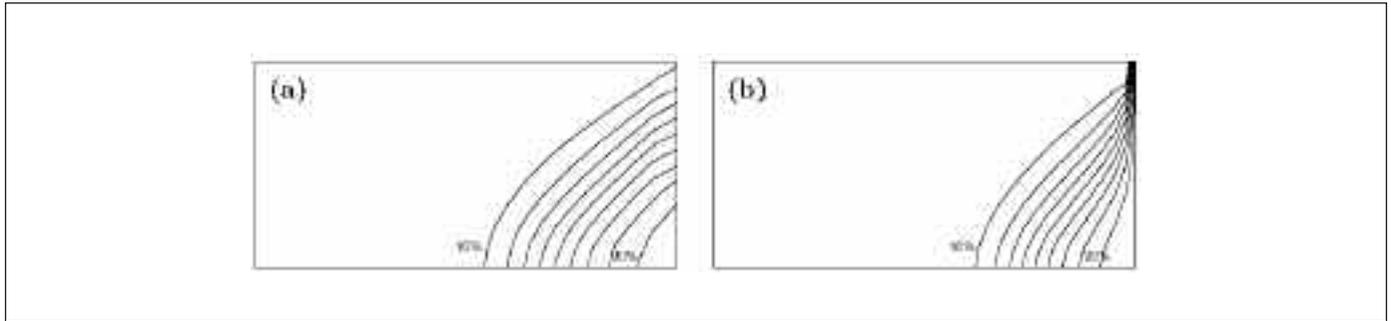


Figura 3. Isolíneas de concentración (de 10% a 100% agua marina) considerando en el mar (a) una condición de flujo másico con concentración dependiente de la dirección de flujo y (b) concentración prescrita

Figure 3. Isolines of concentration (from 10% to 100% saltwater) considering the sea as (a) a mass flux boundary with concentration depending on the flow direction and (b) a prescribed concentration boundary

lución del problema. Hay muchos métodos para conseguirlo. Aquí se mostrará como ejemplo el método de los elementos finitos, porque es uno de los más conocidos. Nos centraremos en los particularidades de la intrusión marina. Estas particularidades aparecen de modo muy parecido en otros métodos. En el método, se discretiza el dominio Ω en una serie de n puntos nodales (nudos), y m elementos. Los elementos recubren el dominio sin solaparse y se definen a partir de los nudos. Si el dominio asociado al elemento i es Ω_{ei} , entonces la unión de todos los elementos es $\Omega = \cup_i \Omega_{ei}$. Se aproxima el campo de niveles y de concentraciones con un campo interpolado a partir de los niveles y concentraciones en los nudos. Se escribe el valor de un variable de estado u en un punto como

$$u(x, y, t) \approx u(x, y, t) = \sum_{i=1}^n u_i(t) \varphi_i(x, y) \quad (14)$$

dónde φ_i son funciones de interpolación o de forma, \hat{u} la solución aproximada de la variable de estado y u_i el valor obtenido para la variable de estado en cada nudo. Como la solución \hat{u} no es exacta, al sustituirla en las ecuaciones queda un residuo (error de balance de masa) debido a la inexactitud de \hat{u} .

La derivación de las ecuaciones siempre consta de cuatro pasos:

1 Forma débil

La idea del método de los elementos finitos es imponer que el valor medio ponderado del residuo sea nulo. Para ello, se eligen unas funciones de ponderación (o prueba) N_i , asociadas a

cada nudo. Se integra la ecuación sobre todo el dominio, multiplicada por las funciones de prueba, y con la u sustituida por la \hat{u} . A la ecuación resultante se denomina forma débil. Aplicándola a la ecuación (6) queda:

$$f_i^{fl} = \int_{\Omega} \rho S_{of} \frac{\partial h_f}{\partial t} N_i d\Omega + \int_{\Omega} \rho \beta_{\omega} \Theta \frac{\partial \omega}{\partial t} N_i d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho q) N_i d\Omega - \int_{\Omega} (\rho^* Q + m_s) N_i d\Omega = 0 \quad (15)$$

dónde f_i^{fl} es la ecuación de flujo en el nudo i .

2 Identidad de Green

El siguiente paso es aplicar la identidad de Green a la divergencia del flujo (tercer término en la ecuación (15)). Si no se hace la aproximación de Boussinesq se llega a la expresión siguiente para el término de divergencia del flujo:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho q) N_i d\Omega = \int_{\Gamma} \rho q N_i \cdot n d\Gamma - \int_{\Omega} \rho q \cdot \nabla N_i d\Omega \quad (16)$$

dónde Γ es el contorno del dominio Ω y n es un vector normal al contorno. Este término sólo aparece en el contorno, y en sitios donde haya flujo a través del contorno.

3 Forma discreta

Para obtener una interpolación sin sesgo, se escogen las funciones de interpolación tales que en cualquier punto la suma de todas ellas sea uno, mientras que en cada nudo i , $\varphi_i=1$ y el resto cero. El método de elementos finitos de Galerkin, empleado aquí, utiliza para las funciones de prueba N_i las mismas que para las funciones de forma φ_i . Por lo tanto, se sustituye en (15) las funciones de prueba por las funciones de forma, se reemplaza la derivada temporal por una expresión en diferencias finitas de primer orden y la variable de estado por su expresión interpolada. Recordando que la integral sobre el dominio es la suma de las integrales sobre los subdominios, se llega:

$$\begin{aligned} f_i^{fl} = & \sum_{e=1}^m \left(\sum_{j=1}^n \left(\frac{h_{fi}^{k+1} - h_{fi}^k}{\nabla t} \int_{\Omega_e} \rho S_{of} \varphi_i \varphi_j d\Omega_e \right. \right. \\ & + \frac{\omega_j^{k+1} - \omega_j^k}{\nabla t} \int_{\Omega_e} \rho \beta_\omega \Theta \varphi_i \varphi_j d\Omega_e \\ & \left. \left. + h_{fi}^{k+0} \int_{\Omega_e} \rho \nabla \varphi_i K \nabla \varphi_j d\Omega_e \right) - \int_{\Omega_e} (\rho^* Q + m_s) \varphi_i d\Omega_e \right. \\ & \left. + \int_{\Omega_e} \rho K \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \nabla \varphi_i d\Omega_e \right) = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

donde m es el número de subdominios (elementos) y el número de nudos en cada uno de ellos, k es el índice para los pasos de tiempo y θ un factor de ponderación temporal entre 0 y 1.

4 Forma matricial

Para escribir la ecuación (17) en forma matricial, se definen las siguientes matrices:

$$A_{ij}^{fl} = \sum_{e=1}^m A_{ij}^{fl,e} = \sum_{e=1}^m \int_{\Omega_e} \rho \nabla \varphi_i K^e \nabla \varphi_j d\Omega_e \quad (18)$$

$$D_{ij}^{fl} = \sum_{e=1}^m D_{ij}^{fl,e} = \sum_{e=1}^m \int_{\Omega_e} \rho S_{of}^e \varphi_i \varphi_j d\Omega_e \quad (19)$$

$$C_{ij}^{fl} = \sum_{e=1}^m C_{ij}^{fl,e} = \sum_{e=1}^m \int_{\Omega_e} \rho \beta_\omega \Theta^e \varphi_i \varphi_j d\Omega_e \quad (20)$$

$$\begin{aligned} b_i^{fl} = & \sum_{e=1}^m b_i^{fl,e} = \int_{\Omega_e} (\rho^* Q + m_s) \varphi_i d\Omega_e \\ & + \int_{\Omega_e} \rho K^e \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \nabla \varphi_i d\Omega_e \end{aligned} \quad (21)$$

y se obtiene la expresión matricial:

$$f^{fl} = A^{fl} h^{k+\theta} + D^{fl} \frac{h^{k+1} - h^k}{\nabla t} + C^{fl} \frac{\omega^{k+1} - \omega^k}{\nabla t} + b^{fl} = 0 \quad (22)$$

Las matrices (18) y (19) contienen un factor de densidad que no está presente en la expresión de elementos finitos de la ecuación de flujo con densidad constante, como tampoco lo está el término (20). Éste representa el cambio de masa debido a cambios en la densidad. El término (21) contiene un término de flotación que hace que pueda ser no nulo incluso si no hay fuentes o sumideros asociados a un nudo.

A la ecuación de transporte (12) se le puede aplicar el mismo procedimiento y llegar al sistema matricial de ecuaciones

$$f^{tpt} = A^{tpt} \omega^{k+\theta} + D^{tpt} \frac{\omega^{k+1} - \omega^k}{\nabla t} + b^{tpt} = 0 \quad (23)$$

donde las matrices vienen dadas por

$$A_{ij}^{tpt} = \sum_{e=1}^m A_{ij}^{tpt,e} = \sum_{e=1}^m \int_{\Omega_e} \rho (\nabla \varphi_i D^{tpt,e} + q \varphi_i) \nabla \varphi_j d\Omega_e \quad (24)$$

$$D_{ij}^{tpt} = \sum_{e=1}^m D_{ij}^{tpt,e} = \sum_{e=1}^m \int_{\Omega_e} \rho (\nabla \Theta^e \varphi_i \varphi_j) d\Omega_e \quad (25)$$

$$b_i^{tpt} = \sum_{e=1}^m b_i^{tpt,e} = \int_{\Omega_e} (\rho^* Q (\omega^* - \omega) + m_s (1 - \omega)) \varphi_i d\Omega_e \quad (26)$$

En este caso, las matrices son muy parecidas a las de la ecuación de transporte con densidad constante, aunque van multiplicadas por la densidad.

$$q^{i+1} = q(h^{i+1}, \omega^i) \quad (28)$$

Peculiaridades del flujo con densidad variable

Tratamiento numérico de la densidad

Como se ha visto, en las ecuaciones (18) a (26) aparece la integral de la densidad. Evaluar estas integrales no es trivial, porque la densidad es función de la concentración y es por tanto variable dentro del elemento. Es importante darse cuenta de que existe una relación entre la manera de aproximar la densidad dentro del elemento, y la manera de aproximar los niveles, ya que en una situación hidrostática el gradiente de niveles equivalente cancela al término de flotación. Para interpolar los niveles se utiliza también (14). Su variación es lineal y el gradiente por lo tanto constante. Sólo con una densidad constante podemos tener un equilibrio hidrostático con una variación lineal de la presión. Lo más sencillo es considerar la densidad constante por elemento. En este caso, se calcula la concentración media del elemento, y se calcula la densidad del elemento como la densidad correspondiente a esta concentración. Como los acuíferos suelen ser mucho más anchos que profundos, muchas veces se trabaja con elementos muy elongados. En estos casos, se tiene que simular al mismo tiempo una zona de mezcla de poco espesor y una variación horizontal importante de concentración y densidad. Por esto, Voss y Souza (1987) y Frolkovic y De Schepper (2000) proponen considerar la densidad variable en la dirección horizontal y constante en la dirección del vector de la gravedad, para que el término de flotación sea a la vez coherente con el gradiente de niveles equivalentes y variable lateralmente.

Acoplamiento

El sistema de ecuaciones (23) y (22) es no lineal y no existen métodos para resolver estos sistemas de forma fiable en un solo paso. Es necesario linealizar las ecuaciones y resolverlas de forma iterativa. Los métodos más comunes son el de Picard y el de Newton-Raphson. El método de Picard consiste en resolver las ecuaciones sucesivamente hasta que ambas hayan convergido. Es decir que se resuelve:

$$A^{fl}(h^i, \omega^1)h^{i+1} = b^{fl}(h^i, \omega^i) \quad (27)$$

$$A^{tpt}(q^{i+1}, \omega^i)\omega^{i+1} = b^{tpt}(q^{i+1}, \omega^i) \quad (29)$$

donde el superíndice *i* indica el número de la iteración. Las matrices *A* y *b* de flujo y transporte pueden construirse con cualquier método. El orden de resolución de las ecuaciones propuesto (flujo, velocidades, transporte) es el más habitual. Sin embargo, se han encontrado casos en que comenzar por la resolución de la ecuación de transporte conduce a una convergencia más rápida (Ackerer, 2006).

Una alternativa es aplicar el método de Newton-Raphson a ambas ecuaciones a la vez. El método se basa en expandir las ecuaciones (22) y (23), lo que conduce a:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f^{fl}(h^i, \omega^i)}{\partial h} & \frac{\partial f^{fl}(h^i, \omega^i)}{\partial \omega} \\ \frac{\partial f^{tpt}(h^i, \omega^i)}{\partial h} & \frac{\partial f^{tpt}(h^i, \omega^i)}{\partial \omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta h \\ \Delta \omega \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f^{fl}(h^i, \omega^i) \\ f^{tpt}(h^i, \omega^i) \end{pmatrix} \quad (30)$$

donde Δh y $\Delta \omega$ se usan para actualizar los vectores de niveles y concentraciones:

$$\begin{pmatrix} h^{i+1} \\ \omega^{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h^i \\ \omega^i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta h \\ \Delta \omega \end{pmatrix} \quad (31)$$

Existen dos grandes diferencias entre estos métodos: si hay que resolver *n* ecuaciones para flujo y *n* para transporte, entonces para el algoritmo de Picard hay que resolver dos sistemas matriciales de orden *n*. En el método de Newton, hay que resolver un sistema de orden *2n* (que tarda más del doble en resolverse). Sin embargo, la convergencia del método de Newton es cuadrática, mientras que la convergencia del método de Picard es lineal. Sobre el método de Newton existen muchas variaciones. La matriz de derivadas de (30), por ejemplo, puede calcularse sólo una vez y utilizarse en todas las iteraciones siguientes, o en las *k* iteraciones siguientes (método de Newton modificado). También se puede suponer que algunas derivadas son nulas, como las de la ecuación de flujo respecto de transporte (método de Newton

parcial). Estas modificaciones hacen que la convergencia del método pasa a ser sub-cuadrática, pero ahorran tiempo en el cálculo de la matriz del sistema. Tutti y Paniconi (1995) discuten las ventajas y debilidades de las diferentes alternativas.

Cálculo de las derivadas respecto de los parámetros

Para resolver problemas de optimización (véase la última sección), puede ser preciso conocer las derivadas de los niveles y concentraciones calculadas respecto de las variables de diseño (parámetros en el caso de problema inverso). Hay diferentes maneras de calcularlas, entre ellas el método de derivación directa y el método de perturbación de parámetros.

El método de perturbación de parámetros, utilizado a menudo, se basa en calcular primero $h(p,t)$ y $\omega(p,t)$, donde p es el vector de parámetros, sin calcular derivadas. Después, se perturba cada uno de los parámetros manteniendo los demás constantes. Para calcular la derivada respecto de un parámetro p_i se utiliza una aproximación de diferencias finitas, obtenida con una expansión de Taylor de primer orden:

$$\frac{du}{dp_i}(t) \approx \frac{u(p_i + \Delta p_i, t) - u(p_i, t)}{\Delta p_i}; u = h, \omega \tag{32}$$

donde Δp_i es el incremento del parámetro. Más laborioso pero más preciso es perturbar cada uno de los parámetros dos veces, y utilizar una expresión de diferencias finitas centradas:

$$\frac{du}{dp_i}(t) \approx \frac{u(p_i + \Delta p_i) - u(p_i - \Delta p_i)}{2\Delta p_i}; u = h, \omega \tag{33}$$

El método de la derivación directa se basa en derivar las ecuaciones (22) y (23) con respecto a los parámetros y utilizar las ecuaciones obtenidas para calcular las derivadas del nivel equivalente y de la fracción másica. Es decir, de manera genérica,

$$\begin{aligned} \frac{df}{dp}(h^{k+1}, h^k, \omega^{k+1}, \omega^k, p) &= \frac{\partial f}{\partial h^{k+1}} \frac{\partial h^{k+1}}{\partial p} \\ + \frac{\partial f}{\partial h^k} \frac{\partial h^k}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial \omega^{k+1}} \frac{\partial \omega^{k+1}}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial \omega^k} \frac{\partial \omega^k}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial p} &= 0 \end{aligned} \tag{34}$$

Aplicar esta expansión a las ecuaciones de flujo y transporte permite escribir un sistema matricial para calcular las derivadas del nivel y concentración respecto de los parámetros en el tiempo $k+1$:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f^{fl}(h^i, \omega^i)}{\partial h} & \frac{\partial f^{fl}(h^i, \omega^i)}{\partial \omega} \\ \frac{\partial f^{tpt}(h^i, \omega^i)}{\partial h} & \frac{\partial f^{tpt}(h^i, \omega^i)}{\partial \omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial h^{k+1}}{\partial p} \\ \frac{\partial \omega^{k+1}}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f^{fl}}{\partial h^k} \frac{\partial h^k}{\partial p} + \frac{\partial f^{fl}}{\partial \omega^k} \frac{\partial \omega^k}{\partial p} + \frac{\partial f^{fl}}{\partial p} \\ \frac{\partial f^{tpt}}{\partial h^k} \frac{\partial h^k}{\partial p} + \frac{\partial f^{tpt}}{\partial \omega^k} \frac{\partial \omega^k}{\partial p} + \frac{\partial f^{tpt}}{\partial p} \end{pmatrix} \tag{35}$$

Lo importante de esta ecuación es que la matriz del sistema (jacobiano) es idéntica a la del sistema de Newton-Raphson (30). Por tanto, si se ha empleado dicho método durante la simulación, se puede aprovechar la matriz y, en su caso, la descomposición LU, para el cálculo de sensibilidad. Más importante aún, se pueden resolver todas las sensibilidades respecto a todos los parámetros con la misma matriz, sin necesidad de iterar para cada tiempo y parámetro como en el caso de las perturbaciones.

Métodos numéricos

Hasta aquí nos hemos centrado en el método de elementos finitos porque es muy conocido y, por tanto, apto para introducir los conceptos básicos y particularidades de la modelación de la intrusión marina. Sin embargo, hay muchos más métodos, algunos de los cuales tienen ventajas claras sobre los elementos finitos. Para todos ellos también es válido el análisis hecho anteriormente sobre métodos de acoplamiento, cálculo de derivadas, etc. Hay tres grandes familias de métodos numéricos de discretización: los métodos eulerianos, lagrangianos y los eulerianos-lagrangianos o mixtos. En el Cuadro 1 aparecen diferentes programas que implementan algunos de los métodos que veremos a continuación.

Los métodos eulerianos (elementos finitos, diferencias finitas, elementos mixtos) utilizan una malla fija. Integran la ecuación de balance sobre los elementos de la malla, lo que conduce a un sistema de ecuaciones discretas (p. ej., las ecuaciones (22) o (23)). La ventaja de este modo de proceder es que se

garantiza que la ecuación escogida (p. ej., el balance en elementos finitos) se cumple tanto a nivel local (elementos) como a nivel global (todo el dominio). Además, se pueden implementar las condiciones de contorno de un modo sencillo y correcto, porque las condiciones de contorno (en el fondo, inyecciones o extracciones) son términos fuente-sumidero de las ecuaciones discretas. La principal desventaja es que padecen de oscilaciones y dispersión numéricas, mucho más que los métodos lagrangianos. Se pueden derivar criterios de estabilidad que, si se cumplen, garantizan que las oscilaciones y la dispersión numéricas quedan dentro de límites aceptables. Sin embargo, el cumplimiento de estas condiciones a veces requiere una discretización muy fina, por lo que estos métodos son a veces computacionalmente caros.

En casos de intrusión marina, los métodos eulerianos funcionan bien para la ecuación de flujo. En cambio pueden dar problemas al resolver casos de transporte con frentes abruptos (con un término advectivo dominante), ya que los criterios de estabilidad exigen una discretización muy fina.

El método de las diferencias finitas se utiliza entre otros en HST3d (Kipp, 1987), en SEAWAT-2000 para la parte de flujo (Langevin *et al.*, 2003) y en Rockflow (Kolditz *et al.*, 1998). La descripción del método se puede encontrar en cualquier libro de texto de métodos numéricos y no será repetida aquí. El método requiere una discretización utilizando rectángulos (en dos dimensiones) o prismas rectangulares (en tres dimensiones). Entre las ventajas, cabe destacar la disponibilidad de criterios de estabilidad. Si éstos se cumplen, el método es incondicionalmente estable. Otra ventaja es que el método es relativamente fácil de entender e implementar. Entre las desventajas se incluyen la rigidez de la malla, que muchas veces impone una discretización muy fina incluso en sitios donde no es necesario, y que hace difícil la aproximación de geometrías complejas. Esta rigidez a su vez dificulta el cumplimiento de los criterios de estabilidad antes mencionados. Para ampliar el rango de estabilidad hay métodos de ponderación a contracorriente, aunque introducen difusión numérica.

El método de elementos finitos se ha utilizado mucho en la simulación de la intrusión marina. Códigos que lo implementan, entre otros, son: SUTRA (Voss y Provost, 2002), FEflow (Diersch, 2005), 3DFemfat (Yeh, 1995), Transdens (Hidalgo *et al.*, 2005) o PROSIT (Slooten *et al.*, 2007). El método se ha validado con un amplio rango de problemas de referencia. En los problemas de transporte dominados por la advección, el método a veces da oscilaciones no físicas cerca de frentes abruptos. Se pueden combatir

estas oscilaciones haciendo mallas más finas, o utilizando una esquema de ponderación a contracorriente, que perturba las funciones de forma y estabilizan la solución, pero que introduce dispersión artificial. El método de elementos finitos es un método que no es demasiado difícil de implementar, que conserva masa local y globalmente, y que, dada una malla adecuada, es capaz de simular de forma aceptable los problemas de intrusión marina.

El método de elementos mixtos se obtiene al imponer la continuidad de los flujos de un elemento a otro. Estos flujos, siendo entidades vectoriales, se discretizan mediante funciones de forma vectoriales. Al expresar después los flujos en términos de gradiente de nivel piezométrico o presión, y expresándolos éstos en función de los niveles medios en las aristas y de los elementos, se obtiene un problema que tiene como incógnitas los niveles medios en los elementos y en las caras de los elementos. Bures y Oltean (2000) describen una implementación para problemas de densidad variable que conserva la masa localmente. Los fundamentos del método se describen en muchos textos, por ejemplo, Chavent y Roberts (1991). La ventaja principal sobre el método de los elementos finitos es que proporciona un campo de velocidades continuo, lo que evita problemas de interpolación y facilita el cálculo de líneas de flujo. Estas líneas de flujo son importantes al utilizar métodos eulerianos-lagrangianos para el problema de transporte.

En los métodos lagrangianos, se representa al fluido mediante un conjunto discreto de "partículas" que se mueven con la velocidad del agua. Para cada partícula se escoge un sistema de coordenadas que sigue a la partícula. En ese sistema de coordenadas, se nota sólo el efecto de la difusión, dispersión y reacciones, pero no los efectos de advección. La solución es, entonces, más suave y ello permite el uso de pasos de tiempo mucho más grandes que los que se utilizan en los métodos eulerianos. Esta ventaja es compartida por todos los métodos de esta familia. Si se considera a cada partícula como un nudo de la discretización espacial, la malla va cambiando en cada paso de tiempo y se puede llegar a tener mallas muy irregulares. Esto da un sobrecoste computacional y puede dar problemas de interpolación. De ahí que en la práctica se cambie el método para que utilice una malla fija. El resultado son los métodos eulerianos-lagrangianos como el método de las características (*method of characteristics*, MoC) y el método modificado de las características (*modified method of characteristics* MMoC). En los métodos MoC y MMoC, se discretiza el espacio utilizando diferencias o elementos finitos. En el método MoC, se colocan unas partí-

culas en cada celda, y se las desplaza de acuerdo con el campo de velocidades vigente. En el método MMoC en cambio se utiliza el campo de velocidades para ver el origen de cada partícula en el tiempo de solución anterior. Así, se obtiene una solución con una distribución regular de información. En los dos casos, el problema que aparece es que en la realidad la difusión y la advección tienen lugar a la vez, mientras que en el método numérico se tienen que tratar uno después del otro. Dado que la dispersión depende del gradiente de concentración y éste se ve afectado por la advección, puede que haya diferencias importantes simulando primero la advección o primero la difusión. En la práctica, a veces se toma como gradiente el promedio entre el gradiente anterior y posterior al paso advectivo.

Ruan y McLaughlin (1999) discuten las fuentes de error en ese tipo de esquemas, y mencionan cuatro: i) errores asociados a la interpolación de la velocidad en el espacio y tiempo (disminuyen con una discretización espacial y temporal más fina); ii) errores asociados a la interpolación de la concentración de una partícula (disminuyen con una discretización espacial más finas), iii) errores asociados al tratamiento separado de la advección y la dispersión (disminuyen con una discretización temporal más fina), y iv) errores asociados al cálculo de la difusión y dispersión (disminuyen con una discretización espacial más fina). Se trata entonces de encontrar una discretización espacio-temporal suficientemente fina para que el efecto de estos errores sea pequeño, pero que no haga el problema de cómputo demasiado costoso.

La ventaja principal del método es su robustez cuando el término advectivo es dominante. Desde un punto de vista computacional, el método MMoC lleva a un sistema matricial simétrico y positivo definido, lo cual facilita una resolución más rápida (Galeati *et al.*, 1992). Un problema que presentan estos métodos es que no conservan la masa localmente, ya que la solución entre dos nudos se obtiene en base de una interpolación que no tiene por qué respetar el balance de masa. Tampoco conservan la masa globalmente. El método ELLAM, descrito a continuación, arregla ese segundo inconveniente. Un código que utiliza el método MMoC es SEAWAT-2000 (Langevin *et al.*, 2003).

El método euleriano-lagrangiano localizado adjunto (*Eulerian-Lagrangian localized adjoint method*, ELLAM) (Celia *et al.*, 1990) integra la ecuación de transporte tanto en el tiempo como en el espacio, y utiliza funciones de forma que dependen del espacio y del tiempo. Las funciones se escogen de forma tal que son constantes en las líneas características de flujo a través del tiempo. Estas funciones de forma

ofrecen un método de interpolación con sentido físico y se pueden utilizar para implementar las condiciones de contorno de una manera natural. El método conserva la masa globalmente. Vence así las dos desventajas principales de los métodos lagrangianos. Sin embargo, no parece haber ningún código de flujo y transporte con densidad variable que lo emplee. Esto es tal vez debido a que el método es relativamente joven. Probablemente, es cuestión de tiempo que aparezca alguno.

Problemas de optimización

Desde la perspectiva de la optimización, un modelo es una aplicación de entrada - salida en función de unos parámetros que definen las propiedades hidráulicas (p. ej., transmisividad) y/o las fuerzas externas (p. ej., extracciones). En los problemas de optimización, se puede distinguir entre los de selección de modelos (encontrar la forma de la aplicación), el problema inverso (encontrar los parámetros de las propiedades hidráulicas) y el problema de control (encontrar los parámetros de las fuerzas externas). Para definir matemáticamente el problema de optimización, se utiliza una función objetivo en términos de la salida del modelo, los parámetros y/o las observaciones. Además, se pueden añadir restricciones a los parámetros y a la salida del modelo, rechazando así ciertas soluciones.

El problema inverso consiste en encontrar los parámetros del sistema que den el mejor ajuste posible entre los valores simulados y observados para un modelo dado. Para ello, la función objetivo se define en términos de la diferencia entre los valores simulados y los observados (residuos). El problema de optimización busca el mínimo de esta función. Las restricciones al problema de optimización, si las hay, ponen límites a los valores admisibles para los parámetros. Un estudio del problema inverso de un acuífero aporta conocimiento sobre cuáles son los parámetros fundamentales del sistema, sobre la fiabilidad de las predicciones hechas con el modelo, sobre si las medidas de las que se dispone informan realmente o no sobre el sistema y sobre dónde ubicar nuevos dispositivos de medida. Claves de este estudio son i) un análisis del error de medida, ii) un análisis de sensibilidad de valores simulados a los parámetros y iii) un análisis de correlación entre los parámetros. Información general sobre los conceptos utilizados en el problema inverso se puede encontrar en (Hill, 1998) y en (Carrera *et al.*, 2005). Shoemaker (2004) lleva a cabo estos tres tipos de análisis en un problema de intrusión marina expresado en unos pocos

parámetros, y encuentra que para el acuífero estudiado, los datos de nivel no son suficientes para poder estimar ninguno de ellos. Utilizando los datos de nivel en combinación con datos de salinidad, la sensibilidad de los parámetros a sus observaciones mejora enormemente y aún más combinando observaciones de nivel con observaciones del flujo. El problema inverso en casos de intrusión marina tiene la peculiaridad de que la forma y el movimiento de la zona de mezcla es sensible tanto a los parámetros de transporte como a los de flujo. Los niveles, en cambio aportan más información cuanto más lejos del mar estén (Sanz y Voss, 2006). Consideraciones como ésta son importantes a la hora de diseñar una red de medida

A menudo, los modelos hidrogeológicos se utilizan como herramientas de gestión con las que se quiere evaluar el impacto de futuras acciones sobre los acuíferos modelados. Los fines son tan variados como la descontaminación de acuíferos, abastecimiento de agua o el control de nivel para impedir o garantizar la inundación de ciertas zonas. La medida en la que se alcancen estos objetivos se puede expresar en una función objetivo, las restricciones pueden referirse, por ejemplo, a la posición de la interfaz entre agua salina y agua dulce, a la cantidad total bombeada, etc. Bhattacharjya y Datta (2005) maximizan la cantidad de agua extraída, manteniendo la salinidad bajo ciertos límites. Das y Datta (1999) describen tres problemas de control con dos objetivos cada uno. Por lo tanto, tienen dos funciones objetivo asociada a cada problema. Abarca *et al.*, (2006) comparan dos formulaciones del problema de control aplicadas al mismo sistema de acuíferos, para encontrar los caudales de inyección adecuados en barreras hidráulicas a la vez que se optimizan los caudales de extracción para el abastecimiento de agua.

Hay muchos métodos para resolver problemas de optimización, y se pueden dividir de diferentes formas. Por comportamiento, se puede distinguir entre métodos de búsqueda local y métodos de búsqueda global. Los métodos de búsqueda local empiezan en un punto del espacio de parámetros y calculan una dirección de mejora, para luego perturbar los parámetros en esta dirección. Terminan así yendo al mínimo local más cercano. Los métodos de búsqueda local incluyen pero no están limitados a: el método de Newton, el de Levenberg - Marquardt, los de gradientes conjugados, el de los simplex. Estos métodos poseen una convergencia entre lineal y cuadrática. El número de iteraciones necesarias depende entonces no sólo del número de parámetros a estimar sino también del punto de partida.

Los métodos de búsqueda global en cambio tratan

de muestrear el espacio de parámetros admisibles, y así es más probable que encuentren un mínimo global. Los métodos de búsqueda global incluyen pero no están limitados a: algoritmos genéticos (McKinney y Lin, 1994), *simulated annealing* (Kirkpatrick *et al.*, 1983), Monte Carlo o el método multiobjetivo de optimización de la universidad de Arizona (*multiple objective optimization method - University of Arizona*, MOCOM-UA) (Yapo *et al.*, 1998).

Por aplicabilidad, se pueden distinguir métodos lineales y métodos no lineales. Los métodos lineales sirven si las restricciones y el modelo son funciones lineales de los parámetros. Si éste es el caso, se pueden aplicar los métodos de programación lineal y variantes, que son muy eficientes. Si no es el caso, se tienen que utilizar métodos de programación no lineal, como los citados anteriormente.

El tiempo de cálculo de los métodos no lineales es en general órdenes de magnitud mayor que el de los lineales. Esto es debido al gran número de simulaciones que suelen necesitar, sea para calcular las derivadas de la función objetivo respecto de los parámetros, sea para muestrear el espacio de los parámetros. Esto hace que, en ocasiones, el problema sea computacionalmente inviable y precise de buscar maneras de hacerlo factible.

En problemas de intrusión marina, una primera estrategia es la de linealizar el modelo para poder utilizar métodos de programación lineal, despreciando los efectos de la densidad variable. Hallaji y Yazicigil (1996) utilizaron este método para determinar la posición óptima del bombeo, suponiendo lineal la relación entre descenso en un punto y el caudal extraído. Utilizando un modelo numérico previamente calibrado, se construyó una matriz de respuesta de cada pozo a los caudales extraídos en los demás pozos. Así es posible resolver el problema utilizando la matriz de respuesta y un método de programación lineal (es decir, sin utilizar el método de simulación numérica una vez construida la matriz). Al imponer niveles mínimos en ciertos nudos costeros, es posible controlar el avance de la intrusión marina. Abarca *et al.*, (2006) adaptaron la misma estrategia, pero además emplearon los precios "sombra" (los multiplicadores de Lagrange de cada restricción) para evaluar la eficiencia hidráulica, que resultó de entre 1,4 y 1,7m³ de aumento caudal bombeable por cada 1m³ recuperado. En una segunda fase, extendieron el problema al control de concentraciones. En este caso el problema es no lineal.

Mantoglou (2003) utiliza una estrategia diferente: utiliza un modelo analítico de dos fluidos inmiscibles para modelar la intrusión marina. Compara dos métodos para imponer la restricción de que un pozo no

pueda dar agua salada. Con uno de estos métodos es posible formular una restricción lineal, lo cual abre la vía al uso de métodos de programación lineal.

Qahman *et al.* (2005), en cambio, sustituyen su modelo físico por una red neuronal previamente entrenada. De este modo, tienen un tiempo de cálculo mucho menor por cada ejecución del problema directo, lo cual les permite utilizar métodos de optimización globales con cinco parámetros.

Síntesis

La primera observación es que la ley de Darcy se deduce de manera indirecta de un simple equilibrio de fuerzas. Por ello, la forma natural de escribirla es en términos de presión. Sólo en el caso en que la densidad se suponga constante (o función exclusiva de la presión) puede escribirse la ley de Darcy en términos de nivel piezométrico. En problemas de flujo con densidad variable no existe un potencial del que se pueda derivar el flujo con una ley de tipo Fourier. La principal implicación es que, aunque se pueden dibujar líneas de igual presión o nivel equivalente de agua dulce, los mapas que resultan son poco informativos respecto de las direcciones de flujo.

La ecuación de flujo expresa la conservación de masa de fluido. Si la densidad es constante, la conservación de masa es equivalente a la conservación de volumen, que es lo que expresa la ecuación de flujo que se resuelve habitualmente. Incluso si la densidad sólo depende de la presión, se puede llegar a expresiones análogas. Cuando la densidad depende de la concentración, sólo puede eliminarse de la ecuación cuando se hace la hipótesis de Boussinesq de que las isolíneas de concentración son sub-paralelas al flujo. Esta hipótesis es razonablemente buena para flujo estacionario pero no para transitorio. Por ello, parece más razonable no hacer ninguna simplificación y trabajar directamente con la forma original. Una segunda implicación de que la ecuación de flujo expresa la conservación de masa de fluido es que debe reconocer todos los términos de entrada y salida de masa. Esto es especialmente delicado cuando se utilizan condiciones de contorno de concentración fija en la ecuación de transporte. En ese caso, las fuentes de sal provenientes del contorno deben incluirse en la ecuación de flujo. En la práctica no es un problema especialmente grave, ya que este tipo de condiciones raramente simulan procesos naturales. Sin embargo, es importante desde el punto de vista del desarrollo de códigos y su posterior verificación. Muchos de los problemas tipo incluyen condiciones de esta clase.

Para la resolución numérica de las ecuaciones hay nuevos métodos (elementos mixtos, ELLAM) que tienen claras ventajas sobre los métodos más utilizados (elementos finitos y diferencias finitas). Sin embargo, son métodos relativamente jóvenes y su uso no es aún muy común. La simulación de la intrusión marina sigue siendo computacionalmente costosa, incluso en dos dimensiones. Por esto, desde el punto de vista de las aplicaciones, aún existe el reto los modelos tridimensionales. El problema del coste afecta también a los problemas de optimización. La ausencia de herramientas adecuadas obliga a simplificar y asumir hipótesis que pueden llevar a conclusiones erróneas o imprecisas.

Referencias

- Abarca, E., Carrera, J., Sanchez-Vila, X. y Dentz, M. 2007a. Anisotropic dispersive Henry problem. *Advances in Water Resources*, 30 (4), 913–926.
- Abarca, E., Carrera, J., Sanchez-Vila, X. y Voss, C. I. 2007b. Quasi-horizontal circulation cells in 3d seawater intrusion. *Journal of Hydrology*, en prensa.
- Abarca, E. *et al.* 2006. Optimal design of measures to correct seawater intrusion. *Water Resources Research*, 42 (9), W09415.
- Ackerer, P. 2006. Comunicación personal.
- Bear, J. 1972. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, Amsterdam, 764 .
- Bhattacharjya, R. y Datta, B. 2005. Optimal management of coastal aquifers using linked simulation optimization approach. *Water Resources Management*, 19 (3), 295–320.
- Boussineq, J. 1903. Recherches théoriques sur l'écoulement des nappes d'eau infiltrées dans le sol et sur le débit des sources. *C.R.H. Acad. J. Math. Pures Appliquées*, 10, 5–78.
- Bues, M. A. y Oltean, C. 2000. Numerical simulations for saltwater intrusion by the mixed hybrid finite element method and discontinuous finite element method. *Transport In Porous Media*, 40 (2), 171–200.
- Carrera, J., Alcolea, A., Medina, A., Hidalgo, J. y Slooten, L. J. 2005. Inverse problem in hydrogeology. *Hydrogeology Journal*, 13 (1), 206–222.
- Celia, M. A., Russell, T. F., Herrera, I. y Ewing, R. E. 1990. An eulerian-lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation. *Advances in Water Resources*, 13 (4), 187–206.
- Chavent, G. y Roberts, J. E. 1991. A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite-elements and standard finite-difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems. *Advances in Water Resources*, 14 (6), 329–348.
- Cooper, H. H. 1959. A hypothesis concerning the dynamic balance of fresh water and salt water in a coastal aquifer. *Journal of Geophysical Research*, 64 (4), 461–467.
- Custodio, E. y Llamas, M. R. 1976. *Hidrología Subterránea*,

- tomo II. Ediciones Omega, S.A., Barcelona, España, 1224 .
- Darcy, H. 1856. *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Dalmont, Paris, 647 .
- Das, A. y Datta, B. 1999. Development of multiobjective management models for coastal aquifers. *Journal Of Water Resources Planning And Management-Asce*, 125 (2), 76–87.
- Diersch, H. J. G. 2005. *FEFLOW. Finite element subsurface flow and transport simulation system. Reference manual*. WASY Inst. for Water Resour. Plann. and Syst. Res., Berlin.
- Evans, D. G. y Raffensperger, J. P. 1992. On the stream function for variable-density groundwater-flow. *Water Resources Research*, 28 (8), 2141–2145.
- Frolovic, P. y De Schepper, H. 2000. Numerical modelling of convection dominated transport coupled with density driven flow in porous media. *Adv. Water Resour.*, 24 (1), 63–72.
- Galeati, G., Gambolati, G. y Neuman, S. P. 1992. Coupled and partially coupled eulerian-lagrangian model of fresh-water-seawater mixing. *Water Resources Research*, 28 (1), 149–165.
- Ghyben, B. W. 1889. Nota in verband met de voorgenomen put boring nabij Amsterdam. The Hague. K. Inst. Ing. Tydschrift, pp 8–22.
- Goode, D. J. 1992. Modeling transport in transient groundwater flow: An unacknowledged approximation. *Ground Water*, 30 (2), 257–261.
- Hallaji, K. y Yazicigil, H. 1996. Optimal management of a coastal aquifer in southern turkey. *Journal Of Water Resources Planning And Management-Asce*, 122 (4), 233–244.
- Hassanizadeh, S. M. 1986. Derivation of basic equations of mass transport in porous media, part 2. Generalized Darcy's and Fick's laws. *Adv. Water Resour.*, 9 (4), 207–222.
- Henry, H. R. 1964. Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. Water-Supply Paper 1613-C, U.S. Geological Survey.
- Herzberg, A. 1901. Die Wasserversorgung einiger Nordseebäder. *Jour. Gasbeleuchtung und Wasserversorgung*, 44, 815–819, 842–844.
- Hidalgo, J. J., Carrera, J. y Medina, A. sometido. Fluid mass balance inconsistency in density-dependet flow. *Water Resources Research*, sometido.
- Hidalgo, J. J., Slooten, L. J., Medina, A. y Carrera, J. 2005. *Groundwater And Saline Intrusion: Selected Papers From The 18th Salt Water Intrusion Meeting. 18th SWIM, Cartagena 2004*, Capítulo A Newton-Raphson based code for seawater intrusion modelling and parameter estimation. Número 15 en Hidrogeología y Aguas Subterráneas, IGME, Madrid, 111–120.
- Hill, M. 1998. Methods and guidelines for effective model calibration. Water-Resources Investigations Report 98-4005, U.S. Geological Survey.
- Huyakorn, P. S., Andersen, P. F., Mercer, J. W. y White, H. O. 1987. Saltwater intrusion in aquifersdevelopment and testing of a 3-dimensional finite-element model. *Water Resources Research*, 23 (2), 293–312.
- Kipp, K. 1987. Hst3d: A computer code for simulation of heat and solute transport in three-dimensional groundwater flow systems. *Water resources investigation report*, 86-4095.
- Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. y Vecchi, M. P. 1983. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220 (4598), 671–680.
- Kolditz, O., Ratke, R., Diersch, H.-J. G. y Zielke, W. 1998. Coupled groundwater flow and transport: 1. verification of variable density flow and transport models. *Adv. Water Resour.*, 21 (1), 27–46.
- Konikow, L. y Bredehoeft, J. 1978. Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water. Tech. of Water-Resources investigations Book 7, Chapter C2, USGS.
- Konikow, L. F., Sanford, W. E. y Campbell, P. J. 1997. Constant-concentration boundary condition: Lessons from the hydrocoin variable-density groundwater benchmark problem. *Water Resources Research*, 33 (10), 2253–2261.
- Langevin, C., Shoemaker, W. y W., G. 2003. MODFLOW-2000, the u.s. geological survey modular ground-water model-documentation of the SEAWAT-2000 version with the variable-density flow process (VDF) and the integrated MT3DMS transport process (IMT). *U.S. Geological Survey Open-File Report 03-426*.
- Mantoglou, A. 2003. Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion. *Water Resources Research*, 39 (12), 1335.
- McKinney, D. C. y Lin, M. D. 1994. Genetic algorithm solution of groundwater-management models. *Water Resources Research*, 30 (6), 1897–1906.
- Oberbeck, A. 1879. Ueber die Wärmelaitung der Flüssigkeiten bei Berücksichtigung der Strömung infolge von Temperaturdifferenzen. *Ann. Phys. Chem.*, 7, 271–292.
- Oude Essink, G. 1998. Moc3d adapted to simulate 3d density-dependent groundwater flow. En: *Proc. MODFLOW'98 Conf. Golden, Colorado*, 291–303.
- Putti, M. y Paniconi. 1995. Picard and newton linearization for the coupled model of saltwater intrusion in aquifers. *Adv. Water Res.*, 18, 159–170.
- Qahman, K., Larabi, A., Ouazar, D., Naji, A. y Cheng, A. H. D. 2005. Optimal and sustainable extraction of groundwater in coastal aquifers. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 19 (2), 99–110.
- Reeves, M., Ward, D. S., Johns, N. y Cranwell, R. M. 1986. Theory and implementation of SWIFT II, the Sandia Waste-Isolation flow and transport model for fractured media. Informe Técnico Release 4.84, NUREG/CR-3328, SAND83-1159, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico.
- Ruan, F. y McLaughlin, D. 1999. An investigation of eulerian-lagrangian methods for solving heterogeneous advection-dominated transport problems. *Water Resources Research*, 35 (8), 2359–2373.
- Saaltink, M. W., Carrera, J. y Olivella, S. 2004. Mass balance errors when solving the convective form of the transport equation in transient flow problems. *Water Resources Research*, 40 (5), W05107.

- Sanz, E. y Voss, C. I. 2006. Inverse modeling for seawater intrusion in coastal aquifers: Insights about parameter sensitivities, variances, correlations and estimation procedures derived from the Henry problem. *Advances in Water Resources*, 29 (3), 439–457.
- Shoemaker, W. B. 2004. Important observations and parameters for a salt water intrusion model. *Ground Water*, 42 (6-7), 829–840.
- Slooten, L., Batlle, F. y Carrera, J. 2007. *Process Oriented Simulation and Inversion Tool (PROSIT): Getting Started*. Universidad Politécnica de Cataluña (UPC), Barcelona.
- Voss, C. I. y Provost, A. 2002. SUTRA, a model for saturated-unsaturated variable-density ground-water flow with solute or energy transport. Water-Resources Investigations Report 02-4231, U.S. Geological Survey.
- Voss, C. I. y Souza, W. R. 1987. Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow fresh-water-saltwater transition zone. *Water Resources Research*, 23 (10), 1851–1866.
- Whitaker, S. 1986. Flow in porous media i: A theoretical derivation of Darcy's law. *Transport in Porous Media*, V1 (1), 3–25.
- Woods, J. 2004. *Numerical Accuracy of Variable-Density Groundwater Flow And Solute Transport Simulations*. Tesis Doctoral, University of Adelaide.
- Yapo, P. O., Gupta, H. V. y Sorooshian, S. 1998. Multi-objective global optimization for hydrologic models. *Journal of Hydrology*, 204 (1-4), 83–97.
- Yeh, G. T. 1995. *3DFEMFAT: Users Manual of a 3-Dimensional Finite Element Model of Density-Dependent Flow and Transport Through Saturated-Unsaturated Media*. The Pennsylvania State University, Pennsylvania, USA.

Recibido: febrero 2007

Aceptado: julio 2007