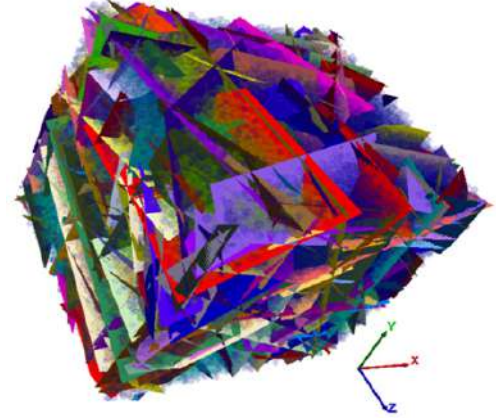


OPTIMIZACIÓN DE PARÁMETROS DE FLUJO EN MEDIOS FRACTURADOS



NADIR BASHIR YAVER ORJUELA

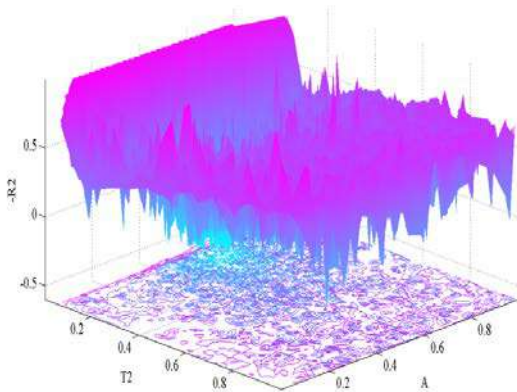
Ingeniero Civil

Tesis de grado presentada para optar por el título de
MAGISTER EN INGENIERÍA – RECURSOS HIDRÁULICOS

LEONARDO DAVID DONADO GARZÓN

Profesor Asistente

Director





UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

SEDE BOGOTÁ
FACULTAD DE INGENIERÍA



Libertad y Orden

Departamento Administrativo de
Ciencia, Tecnología e Innovación
Colciencias

República de Colombia

Este trabajo fue cofinanciado por el Programa Jóvenes Investigadores “Virginia Gutiérrez de Pineda” de COLCIENCIAS, el Grupo de Investigación en Ingeniería de los Recursos Hídricos, GIREH, la División de Investigación de la Universidad Nacional de Colombia y el Programa de Gestión de Proyectos de la Dirección de Bienestar Universitario, mediante el proyecto METRE-1 código 9198.



**UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA**

SEDE BOGOTÁ

DIVISIÓN DE INVESTIGACIÓN



**UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA**

SEDE BOGOTÁ

DIRECCIÓN DE BIENESTAR UNIVERSITARIO
PROGRAMA DE GESTIÓN DE PROYECTOS



OPTIMIZACIÓN DE PARÁMETROS DE FLUJO EN MEDIOS FRACTURADOS.

Resumen

El entendimiento del flujo de agua en medios fracturados es un problema muy complejo, este tipo de rocas tiene un gigantesco número de fracturas con propiedades desconocidas, razón por la cual estos medios son modelados en un marco estocástico. Una de los métodos para la modelación de los macizos fracturados es la aproximación por redes de fracturas discretas (DFN) donde las fracturas son modeladas por medio de funciones de densidad de probabilidad [e.g., Donado, 2009] y de sus propiedades (longitud, orientación, localización, densidad y tamaño). Con el objetivo de hacer el problema posible en términos paramétricos, se usa la metodología propuesta en [1]. Se usaron pruebas hidráulicas, que fueron realizadas en el sitio el Berrocal (Centro de España), cinco familias geológicas fueron identificadas en este macizo. Cuatro algoritmos de optimización fueron utilizados para representar las pruebas, (i) Simulaciones de Monte Carlo, este se fundamenta en la generación de una nube de puntos sobre una distribución uniforme en el espacio paramétrico de la posible solución, (ii) Método de máxima verosimilitud, que consiste en maximizar la probabilidad de observación de los datos medidos contra la probabilidad de los parámetros, (iii) SCE-UA, el cual combina las fortalezas de los algoritmos evolutivos de búsqueda aleatoria controlada (CRS) con el concepto de evolución competitiva [2]. Y (iv) PSO, que es una técnica basada en optimización estocástica inspirada en el comportamiento de aves y peces. Como resultado se obtuvo una representación del sistema que modelo los procesos de flujo en la formación objeto de estudio y se sugiere una metodología para abordar este tipo de casos.

Palabras Claves: Optimización, Estocástico, Funciones de densidad de probabilidad, Medios fracturados, redes de fracturas discretas.

OPTIMIZATION OF FLOW PARAMETERS IN FRACTURED MEDIA

Abstract

The understanding of groundwater flow in fractured media is a very complex, these types of rocks have a gigantic number of fractures with unknown properties, reason why these media are modeled in a stochastic framework. One of the methods for the modeling of fracture massif is the Discrete Fracture Network (DFN) approach where fractures are modeled by means of probability density functions [e.g., Donado, 2009] of their properties (length, orientation, location, density and size). With the objective of having a feasible problem in parametric terms, we use the proposed methodology in [1]. We use hydraulic tests, which were realized, in El Berrocal Site (center Spain), five families of fractures were defined in this massif. Four algorithms of optimization were used to represent the tests, (i) Monte Carlo simulations, which are funded in the generation of a cloud of points over an uniform distribution in the parametric space of the possible solutions, (ii) Maximum likelihood, that consists on the maximization of the observation probability of the measured data against the parameters probability, (iii) SCE-EA, which combines the strength of the evolutionary algorithms of controlled random search (CRS) with the concept of competitive evolution [2]. And (iv) PSO, that is a population technique based on stochastic optimization inspired in the behavior of birds and fishes. The result was a representation of the model system flow processes in order to study the formation and suggests a methodology to address such cases.

Key Word: optimization, stochastic, function de distribution de probability, fracture media, discrete fractures network.

FIRMA DEL DIRECTOR

Nombre del autor:
Nadir Bashir Yaver Orjuela

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Programa Jóvenes Investigadores “Virginia Gutiérrez de Pineda” de COLCIENCIAS, al Programa de Gestión de Proyectos de la Dirección de Bienestar Universitario, a la División de Investigación de la Universidad Nacional de Colombia y al Área Curricular de Ingeniería Civil y Agrícola.

Al Grupo de Investigación en Ingeniería de los Recursos Hídricos, GIREH.

A Leonardo D. Donado G. por su constante colaboración.

Contenido

Resumen.....	III
Lista de Figuras.....	XI
Lita de Tablas.....	XIII
1 Introducción	1
1.1 Identificación del problema	6
1.2 Objetivo general.....	7
1.2.1 Objetivos específicos	7
1.3 Planteamiento.....	7
2 Redes de fracturas discretas	9
2.1 Metodología para la generación de las DFN.....	12
2.1.1 Generación de la red de fracturas discretas.....	13
3 Zona de estudio	18
3.1.1 Visualización de las estructuras mineralizadas.....	19
3.1.2 Visualización de la red de fractura regional.....	19
3.1.3 Visualización de la geometría de las redes de fracturas alrededor de las zonas de los agujeros	21
3.1.4 Modelación de las propiedades del macizo rocoso.....	22
3.1.5 Caracterización de las familias de fracturas.....	22
4 Flujo en medios fracturados	26
4.1 De una DFN a una malla numérica	26
4.1.1 Discretización	28
4.1.2 Estimación de la parametrización	29
4.1.3 Verificación de la discretización.....	31
4.2 Simulación de flujo en una DFN.....	33
4.3 Ecuación de flujo.....	34
4.4 Solución numérica de la ecuación de flujo.....	35
5 Análisis de la prueba hidráulica	37

5.1	Prueba de bombeo.....	37
5.2	Problema inverso.....	37
5.3	Definición de la función objetivo	40
5.3.1	Formulación	40
5.4	Algoritmos de optimización.....	42
5.4.1	Método de máxima verosimilitud	43
5.4.2	Shuffled Complex Evolution method (SCE-UA).....	50
5.4.3	PSO Particle swarm optimization	57
5.4.4	Análisis de Sensibilidad (Monte Carlo Analysis Tool).....	62
6	Metodología	64
6.1	Definición de las DFN	64
6.1.1	Datos de entrada del TRANSIN.....	64
6.2	Datos de Salida	68
6.3	Definición de la función objetivo	69
6.4	Implementación de los algoritmos de calibración	69
6.4.1	Algoritmo de Marquardt	70
6.4.2	SCE-UA (shuffled complex evolution).....	79
6.4.3	PSO (particle swarm optimization).....	95
6.4.4	Análisis de sensibilidad.....	98
6.5	Escalado	100
7	Análisis de resultados.....	106
8	Conclusiones	116
9	Bibliografía	119

Lista de Figuras

<i>Figura N° 2-1 Medios geológicamente fracturados.</i>	10
<i>Figura N° 2-2 Alineamiento de las fracturas. [91]</i>	16
<i>Figura N° 2-3 Generación de una DFN.</i>	17
<i>Figura N° 3-1 Localización general del sitio berrocal, en el centro de España.</i>	18
<i>Figura N° 3-2 Modelo geológico del berrocal [98].</i>	20
<i>Figura N° 3-3 Modelo regional de las redes fracturadas en el berrocal [98].</i>	21
<i>Figura N° 3-4 Modelo tridimensional de la conductividad hidráulica [98].</i>	23
<i>Figura N° 3-5 Vista en planta donde se trazan las fracturas observadas en el campo a la escala de 1:2000. Los pozos de sondeo y un trazado del dique de cuarzo son mostrados [1].</i>	24
<i>Figura N° 4-1 Red conductiva interfracturas propuesta en HIDROBAP-II [72].</i>	27
<i>Figura N° 4-2 Generación de fracturas y la red conductiva [72].</i>	27
<i>Figura N° 5-1 Esquema de descripción general del algoritmo implementado en TRANSIN [102].</i>	49
<i>Figura N° 5-2 Diagrama de flujo del método SHUFFLED COMPLEX EVOLUTION (SCE) [130].</i>	54
<i>Figura N° 5-3 Algoritmo CCE [131].</i>	56
<i>Figura N° 6-1 Datos de entrada del archivo DIM en TRANSIN para la DFN 21.</i>	65
<i>Figura N° 6-2 Condiciones iniciales para la ecuación de flujo.</i>	65
<i>Figura N° 6-3 Abatimiento piezométrico de los pozos.</i>	66
<i>Figura N° 6-4 Características geométricas de los elementos (número del nodo y coordenadas x,y,z)</i>	67
<i>Figura N° 6-5 Características geométricas de los elementos</i>	67
<i>Figura N° 6-6 Zonificación de los elementos</i>	67
<i>Figura N° 6-7 Coeficientes de transmisividad y almacenamiento para cada elemento.</i>	68
<i>Figura N° 6-8 Respuesta del sistema a la discretización en familias.</i>	72
<i>Figura N° 6-9 Ajuste de transmisividad de la familia 1.</i>	73
<i>Figura N° 6-10 Ajuste de transmisividad de la familia 2.</i>	73
<i>Figura N° 6-11 Ajuste de transmisividad de la familia 3.</i>	74
<i>Figura N° 6-12 Ajuste de transmisividad de la familia 4.</i>	74
<i>Figura N° 6-13 Ajuste de transmisividad de la familia 5.</i>	75
<i>Figura N° 6-14 Ajuste de almacenamiento de la familia 1.</i>	75
<i>Figura N° 6-15 Ajuste de almacenamiento de la familia 2.</i>	76
<i>Figura N° 6-16 Ajuste de almacenamiento de la familia 3.</i>	76
<i>Figura N° 6-17 Ajuste de almacenamiento de la familia 4.</i>	77
<i>Figura N° 6-18 Ajuste de almacenamiento de la familia 5.</i>	77
<i>Figura N° 6-19 Algoritmo SCE</i>	80
<i>Figura N° 6-20 Algoritmo CCE</i>	81
<i>Figura N° 6-21 Ecuación de flujo resuelta por diferencias finitas</i>	82
<i>Figura N° 6-22 Tendencia evolutiva del SCE-UA hacia el valor óptimo.</i>	83
<i>Figura N° 6-23 Correlación paramétrica en el espacio de búsqueda (SCE-UA)</i>	84
<i>Figura N° 6-24 Salidas del modelo SCE-UA asociadas a un límite de confianza</i>	84
<i>Figura N° 6-25 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 1 con el SCE-UA.</i>	85
<i>Figura N° 6-26 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 2 con el SCE-UA.</i>	86
<i>Figura N° 6-27 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 3 con el SCE-UA.</i>	86
<i>Figura N° 6-28 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 4 con el SCE-UA.</i>	87
<i>Figura N° 6-29 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 5 con el SCE-UA.</i>	87
<i>Figura N° 6-30 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 1 con el SCE-UA.</i>	88
<i>Figura N° 6-31 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 2 con el SCE-UA.</i>	88

<i>Figura N° 6-32 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 3 con el SCE-UA.</i>	89
<i>Figura N° 6-33 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 4 con el SCE-UA.</i>	89
<i>Figura N° 6-34 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 5 con el SCE-UA.</i>	90
<i>Figura N° 6-35 Tendencia evolutiva de parámetros de familia y coeficientes.</i>	92
<i>Figura N° 6-36 Contornos paramétricos de las transmisividades de la familia uno y dos.</i>	92
<i>Figura N° 6-37 Superficies y contornos paramétricos de coeficientes representativos del medio</i>	94
<i>Figura N° 6-38 Ajuste logrado para con las transmisividades y almacenamientos de cada familia</i>	94
<i>Figura N° 6-39 Ajuste logrado con la transmisividad y almacenamiento regionales.</i>	95
<i>Figura N° 6-40 Tendencia evolutiva del PSO hacia el valor óptimo.</i>	96
<i>Figura N° 6-41 Superficie paramétrica en el espacio de búsqueda (PSO)</i>	97
<i>Figura N° 6-42 Salidas del modelo PSO asociadas a un límite de confianza</i>	97
<i>Figura N° 6-43 Sensibilidad de los parámetros hidrodinámicos de flujo</i>	99
<i>Figura N° 6-44 Salidas del modelo asociadas a un límite de confianza.</i>	100
<i>Figura N° 6-45 Densidad de Probabilidad de transmisividades de Familia 1.</i>	101
<i>Figura N° 6-46 Densidad de Probabilidad de parámetros efectivos de familias.</i>	102
<i>Figura N° 6-47 UpScaling de las Transmisividades (Parámetro Efectivo).</i>	104
<i>Figura N° 6-48 UpScaling de Almacenamientos (Parámetro Efectivo).</i>	105
<i>Figura N° 7-1 Ajuste de la DFN 21 por las distintas metodologías.</i>	108
<i>Figura N° 7-2 Análisis de sensibilidad regional de los parámetros hidrodinámicos</i>	108
<i>Figura N° 7-3 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 6].</i>	110
<i>Figura N° 7-4 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 8].</i>	111
<i>Figura N° 7-5 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 68].</i>	112
<i>Figura N° 7-6 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 69].</i>	113
<i>Figura N° 7-7 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 77].</i>	114
<i>Figura N° 7-8 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 86].</i>	115

Lita de Tablas

Tabla N° 2-1Clasificación de los modelos matemáticos para una fase de flujo. n [3]	12
Tabla N° 2-2 Parametrización de variables del número de posibles procesos de generación. [1]	15
Tabla N° 3-1 Simulación de parámetros para la zona norte a escala 1:2000. P_{21} y P_{32} Son los parámetros de densidad de fracturas en el superficie y el domino tridimensional [1].	25
Tabla N° 3-2 Simulación de parámetros para la zona sur a escala 1:2000. P_{21} y P_{32} Son los parámetros de densidad de fracturas en el superficie y el domino tridimensional [1].	25
Tabla N° 5-1 Localización, profundidad y diámetro de los pozos [56].	37
Tabla N° 6-1 Estadísticos de los ajustes de probabilidad para los diferentes parámetros hidrodinámico de flujo.	78
Tabla N° 6-2 Estadísticos de los ajustes de probabilidad para los diferentes parámetros hidrodinámico de flujo (SCE-UA).	90
Tabla N° 6-3 Resultados obtenidos mediante la aproximación por coeficientes de zonificación.	93
Tabla N° 6-4 Parámetros efectivos del sistema de manera heterogénea.	103
Tabla N° 6-5 Parámetros efectivos del sistema de manera homogénea.	103
Tabla N° 7-1 Resultados obtenidos por las diferentes metodologías de calibración con sus bondades de ajuste	107

1 Introducción

Entre los muchos sistemas acuíferos heterogéneos, los macizos fracturados de baja permeabilidad son sin duda los más difíciles de estudiar. En general, los recursos hídricos son escasos en estas áreas, sin embargo, su uso se hace de manera indiscriminada ya sea para consumo o explotación de recursos naturales como es el caso de la minería. Adicionalmente, el estudio de estas formaciones resulta de gran importancia al momento de realizar prospecciones geológicas para proyectos tales como excavaciones subterráneas de gran longitud que es el caso de proyectos de túneles.

La modelación de diferentes procesos en estos medios es un reto, dada la inherente complejidad geométrica que se deriva de la existente heterogeneidad a todas las escalas, lo que significa que el número de fracturas depende del marco de observación. Por otra parte, el flujo es controlado por una pequeña serie de conductos que transportan la mayor proporción del flujo total; la localización de estos conductos depende de los gradientes regionales y de la anisotropía vinculada a la tectónica [1], y esta localización determina los patrones flujo. El volumen del fluido está conectado a través de vías formadas por las fracturas cuando la permeabilidad de la matriz rocosa es insignificante con respecto a la de las fracturas, especialmente de las rocas de baja porosidad como granitos.

En general todos los procesos en medios fracturados pueden ser modelados desde una serie de enfoques que pueden ser clasificados en tres (3) grupos dependiendo del grado de heterogeneidad [3; 4; 5]: medio poroso equivalente (EPM), medio poroso embebido con fracturas (aproximación mixta), y las redes de fracturas discretas (DFN). Todas estas aproximaciones han sido ampliamente aplicadas para el problema de evaluación y migración de contaminantes.

La aproximación por EPM es la más simple de todas, y está basada sobre la consideración que la heterogeneidad inherente al sistema puede ser descrita completamente por el uso de parámetros representativos de procesos simples. Mayormente, el dominio es modelado como el conjunto de un medio poroso equivalente con un tensor de la conductividad hidráulica [6; 7; 8], y un tensor de dispersión efectiva. La dirección principal del tensor efectivo $\mathbf{K}$ es gobernada por la dirección de las conducciones principales, la cual puede ser asumida del campo de observaciones. Una desventaja de este modelo es la dificultad de definir un volumen elemental representativo (VER) [9]. Así, los valores del tensor de $\mathbf{K}$ cambian con respecto a la escala de interés.

Numerosos experimentos de campo han demostrado que el flujo en medios fracturados altamente heterogéneos toma lugar a través de caminos preferenciales de flujo [10; 11; 12]. Estos caminos o canales pueden representar menos del 30 % del volumen de fracturas [13; 12]. Dada esta alta heterogeneidad de flujo, la aproximación clásica continua para representar las fracturas en rocas, que modela el medio como un medio poroso equivalente, resulta una aproximación pobre, al menos en escalas pequeñas e intermedias de trabajo. La escala de homogeneización, cuando esta existe, es a menudo más grande que el campo de mediciones o el modelo numérico.

El método híbrido representa el medio poroso equivalente con redes de fracturas discretas embebidas. En esta aproximación se asume que las fracturas más relevantes pueden ser detectadas por medio de una intensiva prospección geológica. La exploración debe incluir, como mínimo, cartografía geológica detallada, prospección geológica y sísmica, así como un conjunto de pruebas de flujo y trazadores en pozos [14]. Las fracturas son embebidas determinísticamente en el medio, y sus propiedades son independientes de las del medio poroso equivalente.

El método de las DFN es una aproximación espacial discreta que considera el flujo en macizos rocosos fracturados mediante un sistema de fracturas conectadas. Por esta razón, es necesario crear un conjunto de fracturas que se intersecten, lo cual representa en términos cuantitativos las diferentes familias registradas dentro del dominio tridimensional. Desde este punto de vista se hace importante la caracterización geológica, geométrica e hidráulica de estas fracturas [15; 16; 17].

El fundamento de la mecánica de fluidos sobre fracturas con una matriz de permeabilidad despreciable es resumido en [18; 19], [20] los cuales analizan la difusión dentro de la matriz rocosa bajo la condición de flujo transitorio. La técnica fue creada en la década de los 80 tanto para problemas 2D como para 3D [16; 21; 22; 23; 24; 25; 26] y fue desarrollado continuamente con muchas aplicaciones en ingeniería civil, ambiental, ciencias de la tierra y otros campos de la geingeniería.

El modelo DFN se establece sobre el entendimiento y representación de dos (2) factores: la geometría del sistema de fracturas y la apertura de las fracturas individuales. El primero se basa en simulaciones estocásticas de los sistemas de fracturas, utilizando las distribuciones de probabilidad de los parámetros geométricos de las mismas (densidad, orientación, tamaño, apertura o transmisividad), las cuales son formuladas de acuerdo a resultados de mapeo en campo, además de la hipótesis sobre la forma de las fracturas (circular, elíptica o poligonal en general). El mapeo directo solo puede llevarse a cabo en la superficie expuesta de tamaño limitado, en pozos de diámetros, longitud, profundidades limitadas y en las paredes de las excavaciones subterráneas (túneles, cuevas, pozos, etc.). La fiabilidad de la información de la red de fracturas depende de la calidad de la cartografía y muestro, y por lo tanto su adecuación y fiabilidad es difícil de evaluar. Igualmente es difícil determinar la apertura de la población de las fracturas, debido al hecho que las pruebas In Situ y de laboratorio solo se pueden realizar con un número limitado de muestras de fracturas de lugares restringidos [27].

En repetidas ocasiones se ha encontrado que las superficies de la fracturas pueden exhibir características fractales, que en su mayoría se caracterizan por el exponente de Hurst de una ley de potencia. Aunque el origen de este fenómeno no ha podido ser explicado [27], la ley de potencia indica la existencia de un efecto de escala que puede tener profundas implicaciones en la modelación matemática de las fracturas. Si este efecto de escala existe en todas las escalas con igual o similar grado de importancia, las propiedades físicas de las fracturas deben ser función de los tamaños de fracturas en todos los intervalos, lo que podría presentar un desafío especialmente difícil para la caracterización de las propiedades físicas de grandes fracturas más allá de escalas de laboratorio. Donde un elemento de tamaño representativo (RES) de fracturas, podría no existir. Sin embargo se encontró en [28; 29] y en [30; 31; 32] que el umbral de estacionariedad de la rugosidad superficial es alcanzado con el incremento progresivo de tamaños del área de muestreo, más allá que el efecto de

escalado exista o no. Este descubrimiento indica que algunas escalas de rugosidad pueden existir y el factor de propiedades físicas representativas puede ser caracterizado a esta escala.

Las mediciones topográficas de las superficies de las fracturas hechas con perfilómetros *2D* o *3D*, como todas las otras pruebas de laboratorio sobre muestras de fracturas se realizan generalmente a pequeñas escalas, de varias decenas de centímetros de longitud, y en algunos casos, el umbral de estacionariedad no puede ser alcanzado, dado el hecho, que el tamaño de la muestra es demasiado pequeña o la estructura de estacionariedad no existe (la superficie de la fractura no es nominalmente plana pero es dominada por ondulaciones o inclinaciones). Mediciones detalladas de la rugosidad en grandes escalas rara vez son reportadas, con excepción de [33], el cual utiliza la técnica de estación total, lo cual indica la presencia de múltiples ordenes de rugosidad en la fracturas y correlación en los cambios de longitud. La dificultad es que, cuando este tamaño representativo es más grande que las pruebas de laboratorio, la medición directa de las propiedades físicas se hace difícil porque las pruebas de campo implican más incertidumbre en el control de las condiciones iniciales y de contorno para la prueba.

En las fracturas de la roca la suposición más común es que las paredes son de superficies planas, lisas y en paralelo, para que la ley cúbica pueda ser fácilmente aplicada [27]. Esta simplificación es particularmente conveniente para los modelos DFN a gran escala de un gran número de fracturas. Sin embargo, las superficies de las fracturas son rugosas y la aplicabilidad de la ley cúbica puede ser no apropiada en todas partes [34; 35; 36; 36; 37; 38; 39; 28].

En la práctica común, la apertura hidráulica de la fracturas se deduce en las pruebas de laboratorio, o en pruebas de campo con el supuesto que la ley cúbica es válida [40] con el conocimiento de la geometría de las fracturas y el gradiente de presión. La primera técnica tiene el inconveniente que la condición inicial (in situ) de las muestras de fracturas no se mantiene dada la destrucción que se produce durante el muestreo, por lo tanto el valor de la apertura calculada puede no tener las propiedades del estado inicial, aunque pueden ser determinadas de pruebas de flujo bajo estimaciones normales en la profundidad de muestreo. La última técnica sufre las limitaciones habituales de las pruebas de campo con incertidumbre inicial y condiciones de contorno, la incertidumbre geométrica de las fracturas

ensayadas y los posibles efectos de fracturas ocultas y desconocidas conectadas con la fractura de prueba.

La mayoría de los modelos DFN define por conveniencia que la forma de las fracturas individuales son circulares, ya que la forma real de las fracturas es desconocida. Sin embargo, para grandes escalas de modelos DFN con un alto grado de densidad de fracturas, el efecto de las formas de las fracturas sobre el resultado final puede estar disminuido o reducido. Por otro lado, las formas de las fracturas individuales pueden llegar a ser importantes en las fracturas que afectan la conectividad del sistema, si la población de las fracturas no es tan grande. El asunto de las formas de las fracturas está aún sin resolver y seguirá siendo así por un futuro previsible.

Las simulaciones estocásticas de sistemas de fracturas constituyen la base de las aproximaciones DFN y desempeñan un papel crucial en el rendimiento y fiabilidad de los modelos por DFN. El proceso clave es la creación de funciones de densidad de probabilidad *pdf* del conjunto de parámetros geométricos de las fracturas como densidades, localización, orientación y tamaño, basado en mapeos de campo usando pozos localizados, mapeo de superficies o técnicas geofísicas [41]. La generación de las realizaciones de los sistemas de fracturas de acuerdo a estas *pdf* y suposiciones acerca de la forma de las fracturas (circular, elíptica o poligonal) [42; 43; 44] es entonces un simple proceso numérico inverso. Una cuestión fundamental en esta técnica es el tratamiento del sesgo en la estimación de densidades, orientaciones y longitudes de fracturas. Un notable desarrollo reciente es el uso de ventanas circulares de mapeo [45; 46] que proporcionan un importante adelanto en este sentido.

La principal limitación del enfoque por DFN se da al tratar de acoplar esta aproximación con el problema inverso. La dificultad viene de la combinación de un gran número de fracturas, diferentes parámetros hidráulicos para cada fractura deben ser estimados, y combinados con un gran número de realizaciones. [47] Presentan una metodología para la modelación de flujo en agua subterránea por medio de caminatas aleatorias de tiempo en redes fracturadas y [5] presentan un análisis cuantitativo y cualitativo de la influencia de las propiedades de las fracturas en el comportamiento hidráulico del sistema, dando respuesta a la pregunta acerca de la delimitación y caracterización de las discontinuidades propuesta por [48].

A pesar de las limitaciones del modelo DFN, este goza de amplias aplicaciones para problemas de flujo en medios fracturados, debido principalmente a que hasta la fecha es una herramienta adecuada para modelar fenómenos de flujo, a escalas grandes y pequeñas. La aplicación a escalas pequeñas es donde el dominio de la geometría de la fractura a la misma escala o inclusive moderadas hace que el volumen principal del que se dispone sea inaceptable para aproximaciones continuas en tales escalas. La aplicación de grandes escalas es donde propiedades de grandes volúmenes de roca necesitan ser aproximados a través de un proceso de escalado y procesos de homogeneización usando modelos de DFN con modelos de incrementos de tamaño. Este último es necesario cuando representaciones explícitas de un gran número de fracturas hace que el modelo directo de DFN sea menos eficiente, y la modelación continua con propiedades equivalente sea más atractiva [27].

El concepto de redes de fracturas discretas estocásticas puede ser más adaptable para simular el flujo a escalas pequeñas e intermedias, cuando se espere que se canalice el flujo. En dos (2) dimensiones [49; 50; 51], y en tres (3) dimensiones, [52] se propone el modelo de canalización de flujo a la escala de fractura por discretización de la conductividad de fracturas de acuerdo con las distribuciones estadísticas. Esta aproximación es una mejor presentación de las características de flujo locales con homogeneización.

1.1 Identificación del problema

Al realizar un análisis hidrodinámico de medios fracturados se presenta el problema de identificación de los parámetros efectivos del mismo. Este problema se presenta por la gran cantidad de variables que deben ser tenidas en cuenta a la hora de intentar modelar este tipo de medios. Como se mencionó previamente existen tres metodologías, entre ellas, las redes de fracturas discretas (DFN). Esta última representación simula la red teniendo en cuenta las propiedades geométricas e hidráulicas de cada una de las fracturas que conforman el sistema, lo cual conlleva a trabajar en un entorno con un gran número de parámetros a estimar.

En un entorno con tantas variables a estimar, se da el inconveniente de obtener todo un conjunto de combinaciones de parámetros hidráulicos (conductividad hidráulica $\mathbf{K}$, y coeficiente de almacenamiento S) que logran representar los procesos de flujo para una

condición dada, sin embargo, al intentar simular escenarios distintos al de calibración, todas estas combinaciones arrojan diferentes resultados, debido a que muchas carecen de sentido físico y sólo son respuesta a un problema numérico planteado.

Se dispone de un escenario de simulación, descrito posteriormente, a partir del cual se quiere realizar la optimización del análisis de pruebas de bombeo desde el enfoque del problema inverso utilizando diferentes métodos, es decir, encontrar la combinación óptima de parámetros hidráulicos que representan de la mejor manera las condiciones muestreadas por las pruebas de bombeo.

1.2 Objetivo general

Optimizar el análisis de pruebas de bombeo en medios fracturados representados por medio de DFN.

1.2.1 Objetivos específicos

- Identificar la variabilidad de los parámetros hidráulicos de las familias de fracturas ante el proceso de optimización.
- Realizar el análisis de sensibilidad de los parámetros hidráulicos obtenidos mediante el problema inverso.
- Realizar el proceso de escalado de los parámetros hidrodinámicos y definir así los parámetros efectivos del medio fracturado.

1.3 Planteamiento

El problema inverso consiste en obtener un estimador de los parámetros de la ecuación que representan el problema físico a modelar, utilizando información previa sobre los mismos (obtenida, por ejemplo, mediante ensayos de campo o de laboratorio), su estructura de correlación, así como información acerca de la variable de estado [53]. En el contexto de la hidrogeología subterránea [54] se basa en la estimación de los parámetros de un acuífero (transmisividad, almacenamiento, etc), a partir de medidas directas de los mismos y de variables dependientes de ellos, tales como los niveles el agua.

A diferencia de la modelación tradicional la modelación inversa es más compleja debido a que involucra una gran cantidad de pasos de los cuales la estimación de los parámetros no es necesariamente el más importante ni el que requiere más tiempo, en este caso definir la estructura del modelo puede ser equivalente a describir la estructura física del sistema en términos de parámetros del modelos. Uno de los pasos más importantes en el proceso es la parametrización, la cual consiste en expresar los parámetros físicos como una función de parámetros del modelo, y uno de los problemas que se presentan en la estimación de parámetros es que diferentes conceptualizaciones puede conducir a un modelo de similar rendimiento. Además, si la estructura del modelo es incorrecta, sus parámetros pueden no tener relación con su representación física [55].

Una vez se tenga bien definida la estructura básica del modelo se debe elegir un método adecuado de optimización que permita identificar los parámetros que gobiernan los procesos de flujo en la formación. Aquí se introduce el concepto de caja negra, en donde se conocen las entradas y las salidas pero no el sistema físico a modelar. Las redes de fracturas se generan de forma estocástica basándose en un proceso de prospección geológica que de antemano tiene un alto grado de incertidumbre dada la dificultad en la toma de información, por eso es necesario elegir un método de búsqueda que sea capaz de identificar los parámetros representativos del sistema dentro de una superficie paramétrica con infinitud de soluciones. Este es el punto clave del presente trabajo, evaluar diversas metodologías de búsqueda que han sido aplicadas ampliamente en diferentes campos de la investigación con resultados satisfactorios.

2 Redes de fracturas discretas

Las redes de fracturas discretas son una aproximación especial discreta que permite modelar los procesos de flujo con un elevado nivel de detalle, sin embargo para hacer que este método sea viable, se deben realizar múltiples simplificaciones sobre el sistema físico, el más importante de ellos es agrupar las fracturas en familias, reduciendo así el costo computacional. Esta metodología a diferencia de las tradicionales que suponen un grado de anisotropía en el medio tiene un elevado nivel de dificultad que es inherente a la complejidad de este tipo de formaciones.

El método se basa en reconocer que las fracturas están geológicamente agrupadas en familias, de modo que es posible escribir los parámetros hidráulicos para todas las fracturas que pertenecen a todas las familias como el producto de dos (2) valores, uno específico para cada fractura individual (tomadas de una distribución a priori) y una segunda que es un factor fijo que se aplica a todas las fracturas que pertenecen a una familia determinada. Este último parámetro es el que se va a estimar, lo que reduce el número de parámetros a estimar por órdenes de magnitud, haciendo el problema factible en términos de posibles sobreparametrizaciones [1].

Este método ha sido aplicado en la interpretación de ensayos hidráulicos y de trazadores en el batolito del Berrocal dentro del contexto del proyecto HIDROBAP-II, financiado por ENRESA y la comisión de seguridad nuclear de España (CSN). Interpretaciones de estos mismos ensayos ya han sido validadas en la literatura [56] por medio de aproximaciones con el modelo mixto, el cual permite comparaciones de las dos (2) metodologías.

Los medios geológicamente fracturados son extremadamente complejos y su caracterización es muy demandante tanto en recursos como tiempo. Las redes de fracturas

están presentes en todo el mundo y a todas las escalas de observación, desde fracturas regionales a microscópicas (Ver Figura N° 2-1).

Una red de fractura discreta (DFN) es una representación tridimensional completa de la geometría individual de las fracturas, con sus intersecciones y parámetros hidráulicos. Un mapa de DFN contiene un gran número de fracturas que van desde muy grandes a muy pequeñas, sin tomar en cuenta la importancia hidráulica de cada una.



Figura N° 2-1a



Figura N° 2-1b



Figura N° 2-1c



Figura N° 2-1d

Figura N° 2-1 Medios geológicamente fracturados. Figura N° 2-1a Vista del plano de estratificación de la fractura natural en la formación cretácea Dakota, (cuenca de san juan, 2000), Fuente: <http://www.cspg.org/students/lectures/hart-bruce.cfm>; Figura N° 2-1b Dique del lago punto, (boise state university, 2007), Fuente: <http://www.geology.um.maine.edu/geodynamics/analogwebsite/undergradprojects2007/morgan%20ers%20416%202007/backgroud.html.html>. Figura N° 2-1c Fisura eruptiva en el borde sureste de la caldera del kilauea, (Hawai'i, 1998). Fuente: <http://volcanoes.usgs.gov/images/pglossary/fissure.php>. Figura N° 2-1d Deformación planar vista como imagen microscópica, (2010), Fuente: <http://sciencewise.anu.edu.au/articles/big%20impact>.

El gran desconocimiento del número de fracturas, junto con su localización en la extensión del macizo rocoso obliga a que este tipo de formaciones se estudien desde un marco estocástico, por lo tanto, las fracturas son modeladas por medio de distribuciones de probabilidad de sus propiedades geométricas: longitud, orientación, localización, densidad, apertura y correlación espacial entre fracturas. Este método incluye conceptos tales como geometría fractal, escalado y teorías de percolación [57]. Diferentes métodos de generaciones son sintetizados en la Tabla N° 2-1.

Además de la complejidad de la geometría, cada fractura tiene un comportamiento hidráulico característico. Una fractura individual puede ser modelada como si tuviera una separación constante (enfoque de placas paralelas) o una variable. En el modelo anterior, un valor de transmisividad T se puede definir para cada fractura desde la perspectiva de la ley cúbica, es decir, T es proporcional a b^3 , donde b es la separación entre las fracturas [9; 58; 59]. En realidad, las fracturas varían espacialmente, luego el agua tiende a fluir a lo largo de pequeñas porciones de la fractura, desarrollando canales [60; 50; 61; 62] que cubren pequeñas porciones de las fracturas. En cierto sentido, puede decirse que el agua fluye a través de una red de interconexiones 1-D. La ubicación real de estos canales y sus parámetros hidráulicos relacionados dependen del flujo y pueden cambiar con la variación del tensor de esfuerzos [63; 7; 64].

Los análisis de pruebas de bombeo y de trazadores en redes de fracturas tienen una serie de inconvenientes. Se demuestra que el número de fracturas existentes en un sistema no está definido, ya que las fracturas abarcan todas las escalas. Es decir que el número real de las fracturas en una ventana determinada puede ser modelado usando conceptos de fractales, y por lo tanto es necesario definir valores superiores e inferiores de corte para generar realizaciones de la red con un número finito de fracturas [1]. Además, cada fractura individual debe tener una distintiva característica hidráulica. En la interpretación de pruebas de bombeo, es necesario encontrar el estimativo de un gran número de parámetros en un marco de modelación inversa. Esta labor resulta formidable, pero el problema no radica en la magnitud si no en que se trata de un problema de sobreparametrización.

2.1 Metodología para la generación de las DFN

La generación de la red es iniciada por medio de una distribución espacial de Poisson que localiza de forma aleatoria los nodos, al tiempo que respeta los límites de densidad volumétrica de nodos en un dominio cúbico. Entonces para un determinado umbral de flujo, aumenta el número de nodos con la desviación estándar de la distribución de la conductividad. La consecuencia es que la densidad de nodos puede variar en el espacio y permitir que ésta, una red 3-D, puede ser dividida en entidades designadas como Sub-Redes.

Una vez se siembran los nodos en el volumen del paralelepípedo de la Sub-Red de acuerdo con la densidad volumétrica, el siguiente paso, es dibujar la red de tuberías que hace referencia a una fractura, es decir, se modela el sistema como una red interconectada, por donde solo se mueve el agua. Esta tubería es situada enteramente en el plano de fractura, por lo tanto, su orientación en el espacio puede estar conducida por la dirección de la pendiente más inclinada del plano de fractura y el ángulo de la pendiente más inclinada con respecto al plano horizontal.

Tabla N° 2-1 Clasificación de los modelos matemáticos para una fase de flujo. Estos métodos representan la heterogeneidad del medio geológico fracturado por medio de aproximaciones por dfn [3]

Representación de la heterogeneidad	Parámetro clave	Referencia
DFN con estructura simple	Estadística de la geometría de la red.	[65]
	Distribución de la conductividad hidráulica de las fracturas.	
DFN con matriz de difusión	Estadística de la geometría de la	[66]
	Distribución de la conductividad hidráulica de las fracturas.	
DFN con relación espacial entre fracturas	Porosidad y conductividad hidráulica de la matriz.	[67]
	Parámetros a controlar en el grupo de fracturas, y propiedades fractales de la red	
Discontinuidades equivalentes	Tensores equivalente de la conductividad hidráulica	[68]
	Estadística de la geometría de la red.	
Enfoque continuo para DFN	Distribución de la transmisividad de la red.	[63]
	Estadística de la geometría de la red.	
Estadística de transporte continuo	Distribución de la transmisividad de la red.	[70]
	Parámetros fractales	
Discontinuidad equivalente		[71]

A continuación se presenta una metodología aplicada para modelar flujo en medios geológicamente fracturados por medio de un enfoque de DFN. Esta metodología consiste en una serie de etapas que incluyen la caracterización de las funciones de distribución de, cantidad, tamaño, alineación y ubicación de las fracturas, y que consta de cuatro (4) módulos (cada una hace referencia a una de las funciones de distribución) que se ejecutan de forma secuencial para producir una realización de un sistema fracturado [1] .

En el proceso de generación, la concatenación conceptual de cada uno de los módulos debe seguir el principio de conservación de densidad de fracturas, lo cual implica que cada nueva red de fracturas generada debe respetar las funciones de densidad impuestas: el resultado es un método sintético, en el cual fracturas adicionales pueden ser añadidas fácilmente con el fin de mejorar la conectividad de la red o la inclusión de fracturas específicas que se han observado.

El programa MDF [72], empleado con base en el FRACAS [73] que simula el flujo subterráneo con redes de fracturas discretas, ha sido desarrollado en el École Nationale des Mines de París. En general estos modelos intentan describir el medio fracturado a partir de cada una de las fracturas conductivas. Esto lleva consigo tres (3) pasos: (a) generación de fracturas, implica la necesidad de una definición de las características de dichas fracturas (localización, orientación, buzamiento, densidad de fracturación, propiedades hidráulicas, etc.); (b) de tipo geométrico, que corresponde a la construcción de la red de facturas (seleccionando solo las fracturas conductivas); y (c) de tipo numérico, se refiere a la solución de las ecuaciones de flujo en dichas fracturas [72].

2.1.1 Generación de la red de fracturas discretas

El primer paso es definir un conjunto de familias de fracturas, a partir de observaciones hechas en campo o sobre la tectónica. Cada familia está compuesta por una serie de fracturas cuya ubicación, geometría y orientación se define en términos de funciones de densidad de probabilidad *pdf* con el apoyo de datos de campo como cartografía y geológica [74]. La apertura de las fracturas puede ser definida basándose en el trabajo de campo o en las consideraciones tectónicas, y a través de caracterizaciones por medio de *pdf* .

La red de fracturas es directamente generada a partir de estas *pdf* que pueden estar o no condicionadas a los datos duros. La aproximación habitual es seleccionar una geometría particular que pueda ser fácilmente parametrizada. La forma usual son discos. Una fractura individual se caracteriza en un espacio 3-D por medio de un punto (ubicado en el centro) una longitud (el radio), tres (3) ángulos (orientación) y una distancia de apertura, la cual se considera constante. Todos estos parámetros se han extraído de las *pdf* de forma independiente o conjunta de las distribuciones. En este último caso el procedimiento es seguir un método secuencial, donde los parámetros se han extraído de funciones de densidad condicionadas.

2.1.1.1 Localización espacial de las fracturas

En esta parte de la metodología, la distribución de los centros de fracturas es obtenida. El modelo más ampliamente empleado es el de Poisson, con densidades variables o constantes, sin embargo, otros modelos pueden ser usados, tal como la distribución de Gibbs, "birth-death", o fractales [75]. Independientemente del modelo elegido, es necesario proveer un conjunto de valores a las variables que se parametrizan (Ver Tabla N° 2-2). El área simulada puede ser poblada por realizaciones individuales utilizando diversas técnicas estadísticas, incluidos muestreos al azar, algoritmos genéticos o recocido simulado [76; 77].

2.1.1.2 Cantidad de fracturas

Existen diversas metodologías para especificar la cantidad de fracturas en la simulación de una DFN. Se puede hacer directamente proporcionando un número total de fracturas o dando una densidad (espacialmente variable) y persistencia de las fracturas [78; 79]. El primer método no establece una relación entre las fracturas existentes y el volumen de la roca donde se realiza la generación, mientras que el último relaciona las fracturas con el macizo rocoso.

2.1.1.3 Tamaño de las fracturas

El tamaño de las fracturas es dado por un parámetro simple, que es el radio de la fracturas asociado a una función de densidad de distribución típica, Log-Normal, Hiperbólica, exponencial. En general, estas funciones son restringidas por un número limitado de parámetros [80]. Una modificación simple de un enfoque basado en discos es caracterizar las fracturas como elipses, que están definidas por dos (2) distribuciones de parámetros, uno

para la longitud del semi-eje y otro para el eje de anisotropía. El tamaño de las fracturas también puede ser generado por un área asociada pre-específica, que se convierte en un disco, una elipse, un polígono regular o irregular, o para cualquier superficie rugosa. [81; 82; 83; 42; 84; 78].

Tabla N° 2-2 Parametrización de variables del número de posibles procesos de generación.
[1]

Proceso	Parámetro
Poisson con densidad constantes	Número de fracturas y campos de densidades
Poisson con densidad variable	Número de fracturas, variación espacial de las densidad $P(x)$
Gibbs	Número de elementos y tasa de energía de la función de Gibbs
birth-death	Número final e inicial de elementos y la tasa de aparición y desaparición de ellos
Salvo	Nmero inicial y final de los elementos per Salvo, y la función de distribución de los elementos inicial y final
Fractal	Número de elementos y dimensión fractal

2.1.1.4 Alineamiento de las fracturas

El alineamiento depende de la estructura geológica mapeada asignada a la esfera estratigráfica [85; 86; 87; 88]. Varias distribuciones bivariadas pueden ser utilizadas, como, Fisher esférico, Bingham, o Gauss esférico [89; 90].

Conociendo la localización del nodo número $\#n$, el programa busca otro nodo $\#n+1$, para conectarlo con el primer nodo, una tubería de las familias es seleccionada aleatoriamente de acuerdo a una probabilidad disponible para las familias. Dos (2) ángulos θ y ϕ son dibujados con la correspondiente distribución estadística

Por otra parte, una longitud l es seleccionada de forma aleatoria de una longitud de distribuciones para la familia. Un plano virtual P de ángulo θ y ϕ pasa por el nodo $\#n$. Sobre P un círculo virtual es dibujado en el centro del nodo $\#n$ y de radio l . En el nodo $\#n$ la línea recta (D) es proyectada sobre el plano P y perpendicular a la proyección del gradiente de carga, divide C en dos (2) semicírculos C^+ y C^- . Que corresponden a la dirección positiva y negativa con respecto al gradiente global de carga respectivamente. De acuerdo con la dirección prescrita a lo largo de C^- , el algoritmo busca el nodo cerca a C^- y

situado en un prisma del eje (D) y ángulo α , un parámetro de tolerancia específica. El prisma permite buscar un nodo $\#n + 1$ creando una tubería entre $\#n - \#n + 1$ con pequeñas fluctuaciones sobre los valores prescritos de longitud y los ángulos θ y ϕ .

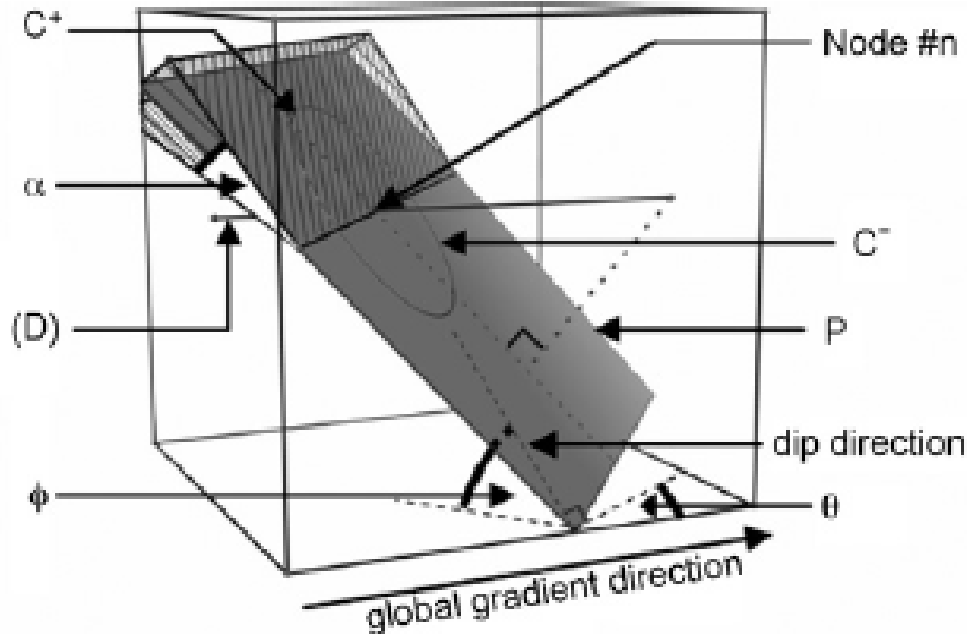


Figura N° 2-2 Alineamiento de las fracturas. [91]

2.1.1.5 Localización de los Pozos

Los pozos pueden ser introducidos en el modelo especificando para cada uno de ellos, su localización, las subredes que lo intersectan, la localización de los nodos de intersección, junto con la tasa prescrita de bombeo. Los valores de conductividad hidráulica asignados a la tubería que representan los pozos son mucho mayores que la asignada a las tuberías. Tal que la carga hidráulica calculada a lo largo del pozo es casi constante [91].

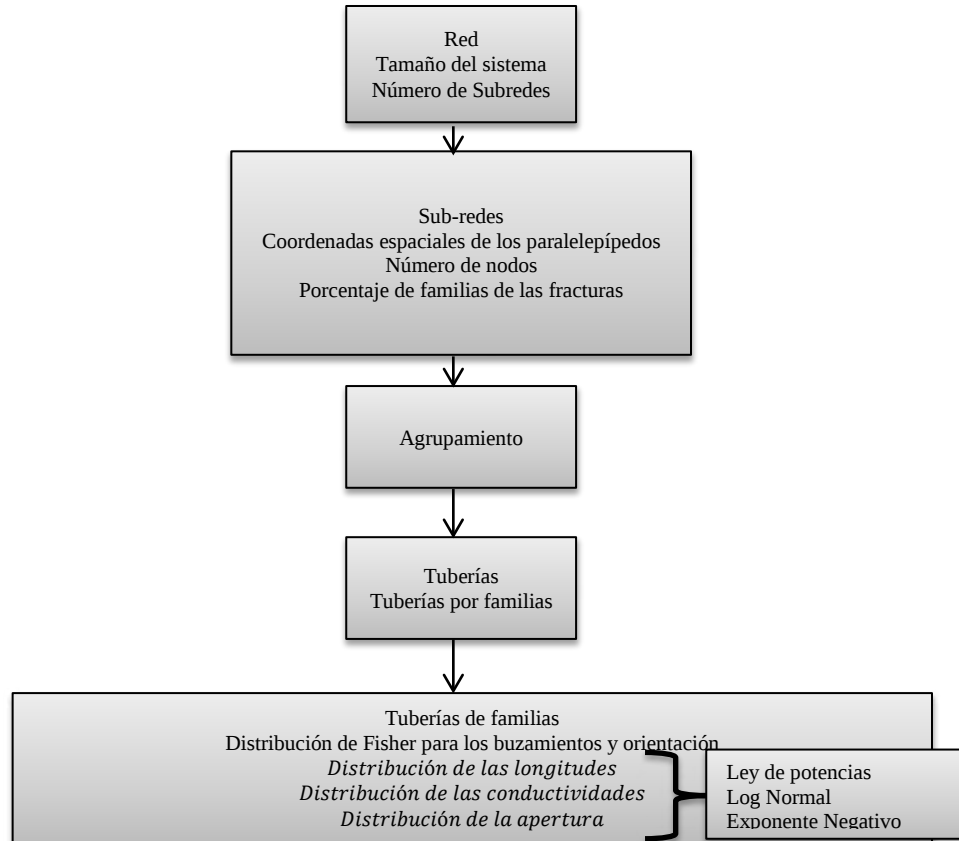


Figura N° 2-3 Generación de una DFN.

3 Zona de estudio

La metodología de generación de las DFN fue aplicada en la interpretación de diferentes pruebas en el sitio el berrocal, localizado en la provincia de Toledo España. Aquí cinco familias de fracturas fueron caracterizadas de acuerdo a propiedades geomorfológicas, la extensión del bloque para la simulación fue de $600 \times 600 \times 300 \text{ m}$ [1].

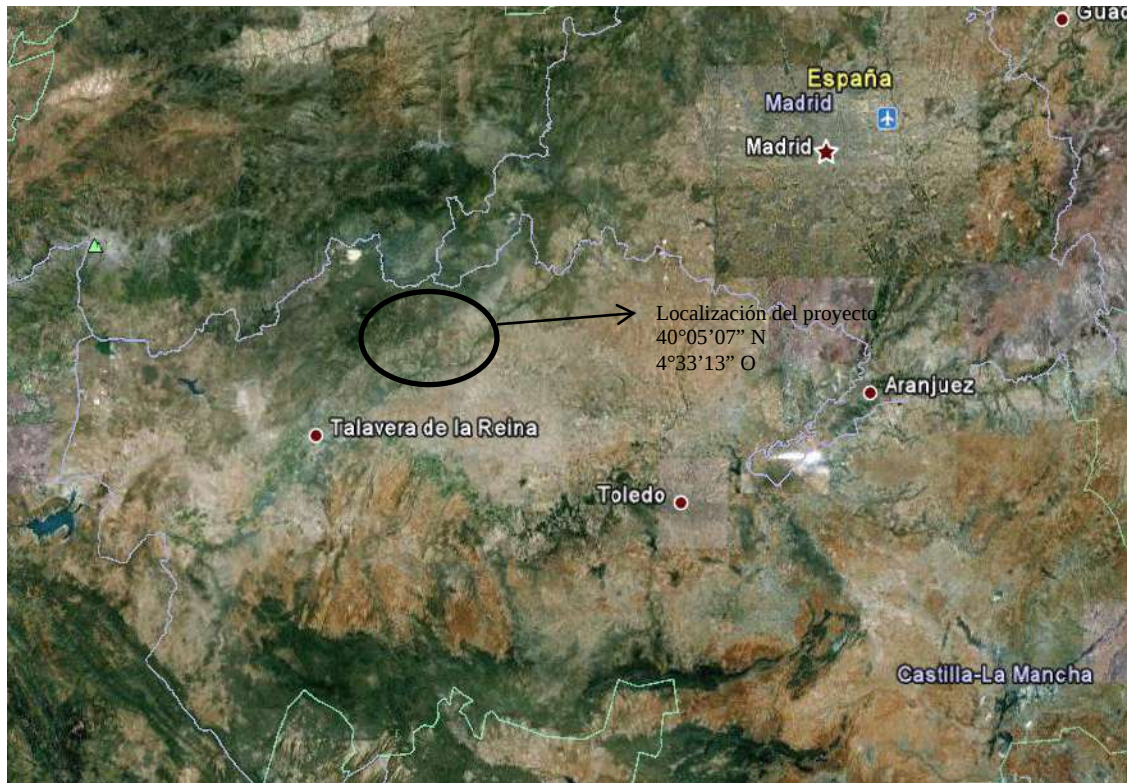


Figura N° 3-1 Localización general del sitio berrocal, en el centro de España.

El proyecto Berrocal es un estudio internacional con el objetivo de entender y modelar los procesos de migración que han controlado la distribución natural de los radionucleicos en una ambiente de fracturas graníticas [92]. La investigación utiliza un enfoque plenamente integrado de las características estructurales, hidrogeológicas y geoquímicas del sitio. Como

parte de la integración de esta investigación a un sistema de modelación geológica, Earth Vision [93] fue utilizado para proporcionar modelos geológicos tridimensionales de estructura del sitio y las propiedades [94; 95].

La visualización de la estructura del Berrocal concentra los siguientes aspectos de investigación

3.1.1 Visualización de las estructuras mineralizadas

Este modelo fue utilizado para ilustrar la relación de las venas de mineral y diques con los pozos y las galerías de acceso. Diferentes cantidades de datos estaban disponibles para la modelación de las características de estos minerales. La vena de mineral de cuarzo (Ver Figura N° 3-2) ha sido mapeada en la superficie, en el acceso de la galería y en los pozos 13, 15 y 16. El dique de Tarica (Ver Figura N° 3-2) ha sido mapeado sobre la superficie y en el agujero 11. La vena de Barite (Ver Figura N° 3-2) fue mapeada solo en la superficie. Para cada una de las estructuras mineralizadas dos (2) mallas dimensionales fueron creadas para la parte superior e inferior de los datos de entrada. Por lo tanto, las características se presentan con una discretización fina. Dados los diferentes datos de entrada, diferentes algoritmos de interpolación se utilizan para generar las redes en dos (2) dimensiones. Para la vena de mineral de cuarzo se usa un algoritmo de mínima tensión [96], para el dique de Tarica se utiliza una combinación de dos (2) rejillas planas y la malla de la vena de Barite se creó mediante la extrapolación de los datos de la superficie.

3.1.2 Visualización de la red de fractura regional

El modelo utiliza datos de superficie y mapeo regional, que es correlacionado con mediciones en los pozos [97] (Ver Figura N° 3-3). Redes individuales representan los planos de fracturas, no solo como superficies planas, sino también como superficies curvas. Este modelo fue utilizado para ilustrar la relación de la estructura de los pozos y la galería de acceso.

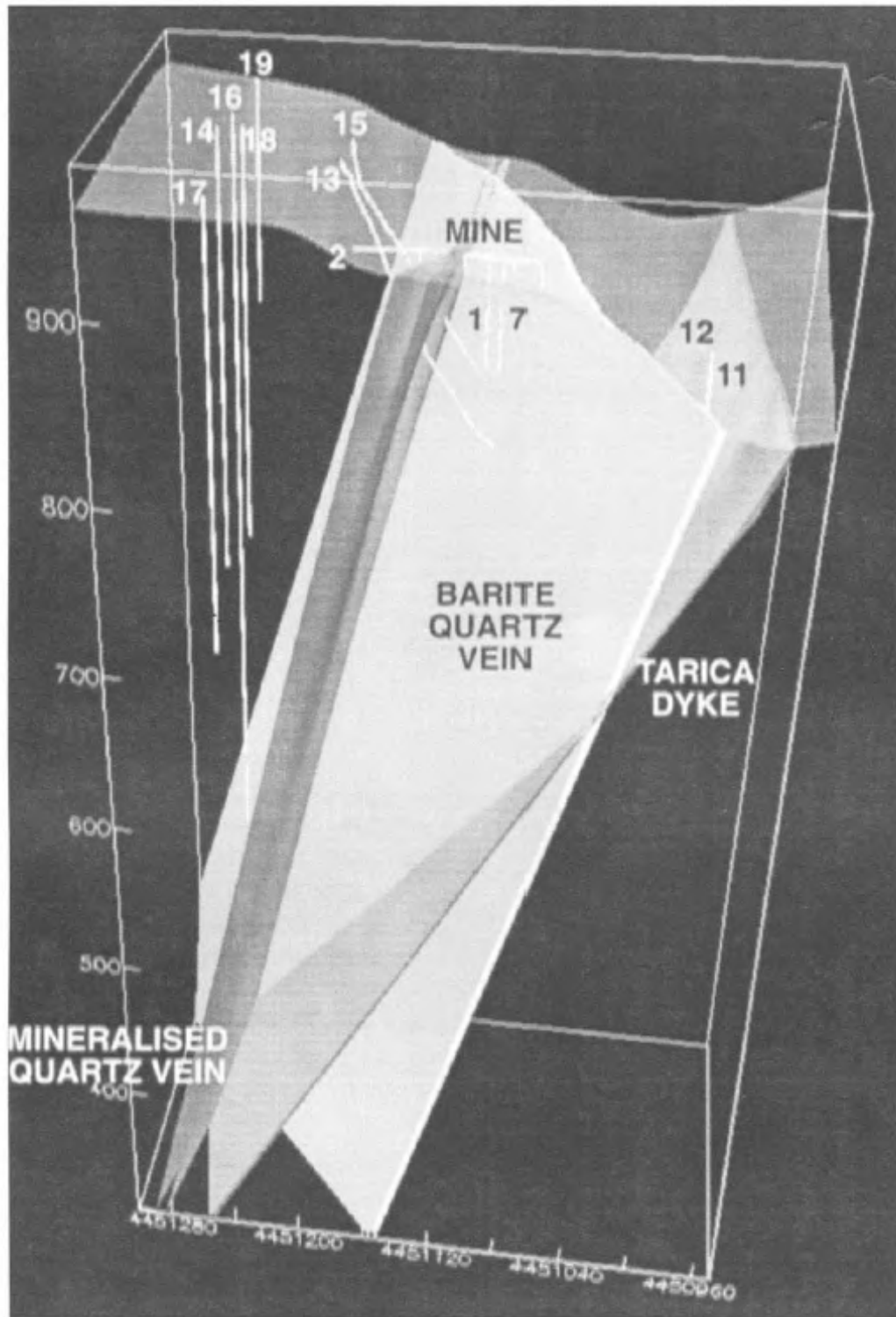


Figura N° 3-2 Modelo geológico del berrocal mostrando la geometría de las principales venas y diques en el granito y su relación con los agujeros de acceso a las galerías. Los números indican estos agujeros [98].

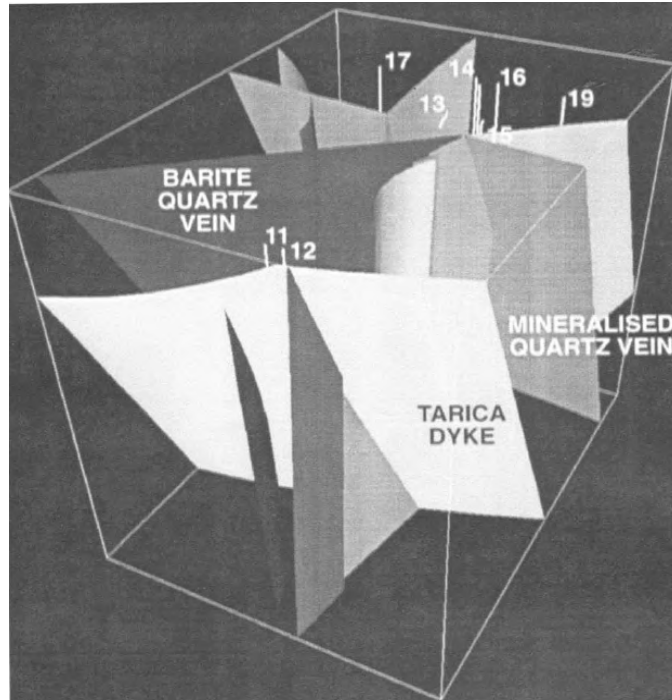


Figura N° 3-3 Modelo regional de las redes fracturadas en el berrocal. Los datos fueron obtenidos desde sensores remotos (landsat – mss, spot y aerial fotografías) y mapeo de la superficie, y han sido vinculados a la información relevante de la perforación [98].

3.1.3 Visualización de la geometría de las redes de fracturas alrededor de las zonas de los agujeros

Durante el proyecto del Berrocal, un Televíwer acústico (TLV) fue utilizado para investigar la geometría de las fracturas en tres (3) zonas principales de perforación [97]. La distancia entre los pozos de sondeo en esta zona es de aproximadamente 20m (Ver Figura N° 3-3).

Estas zonas son:

- Pozos 11 y 12
- Pozos 2, 13, 15 y el acceso a la galería
- Pozos 14, 16 y 18.

La sonda (TLV) mide el intervalo de tiempo de tránsito de una onda acústica a través de la roca. Por lo tanto, fracturas y zonas de facturas son identificadas por el incremento en los tiempos de viaje. Los datos medidos por la TLV fueron separados en tres órdenes, en

función de este tiempo de tránsito. Las fracturas con los tiempos de viaje más grandes fueron comparadas entre los pozos [97].

3.1.4 Modelación de las propiedades del macizo rocoso

Además de la visualización geométrica y las propiedades de las fracturas, se llevaron a cabo modelaciones tridimensionales de la roca y propiedades de flujo. Dos aspectos del sistema agua-roca fueron investigados: en primer lugar, la conductividad hidráulica (K) y en segundo lugar la hidroquímica. Un modelo de variación del $\text{Log}K$ en la zona de pruebas con trazadores se ilustra en la Figura N° 3-4. Este modelo fue construido por la interpolación de 162 mediciones de K [99] utilizando un algoritmo de mínima tensión [96]. En la Figura N° 3-4 las zonas con valores de $\text{Log} K$ menores a -10 han sido removidas. Esto permite visualizar la variabilidad de K en el modelo. Grandes variaciones de $\text{Log} K$ y canalizaciones características están presentes, como habría de esperarse en un granito de baja permeabilidad. Sin embargo hay áreas lejos de los pozos, donde estas grandes variaciones se ven suavizadas. Por lo tanto, el principal uso de este modelo es ilustrar la variación de K cerca de los pozos.

3.1.5 Caracterización de las familias de fracturas

Con el fin de caracterizar las familias de fracturas en el sitio El Berrocal, modelos estocásticos con variables discretas para la forma, tipo y tamaño de fracturas son considerados. Estos modelos se presentan a continuación.

3.1.5.1 Funciones de distribución de la localización y orientación de fracturas

Un proceso de Poisson se consideró representativo de la distribución espacial de los centros de las fracturas. Solo, basándose en datos existentes, dos (2) funciones de distribución fueron encontradas apropiadas para representar la orientación de las fracturas: Fisher univariado y Bingham bivariado. La orientación de las diferentes fracturas fue asumida de datos obtenidos por los televiewer en los pozos S.12 y S.13. Ambos pozos están localizados al sur del dique de cuarzo que claramente separan dos (2) zonas distintas. Resultados de las funciones de ajuste de distribución de las fracturas son presentadas en la Tabla N° 3-1. En un problema $3D$ es posible especificar la distribución dependiendo de la

dirección. Dado que la información detallada no está disponible y trabajando con el principio de parsimonia, se seleccionaron las distribuciones con simetría esférica.

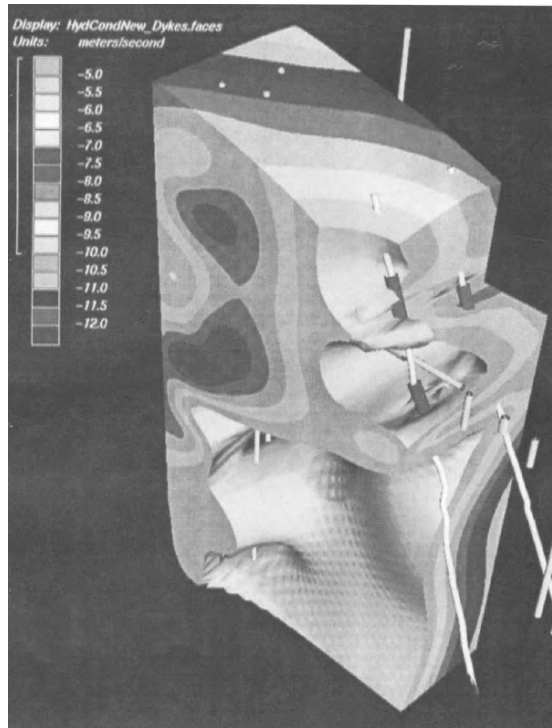


Figura N° 3-4 Modelo tridimensional de la conductividad hidráulica en la zona de ensayo de trazadores. Áreas donde el logaritmo de la conductividad hidráulica es menor que -10 fueron removidas. El modelo ilustra la gran variación de la conductividad hidráulica y la presencia de canalizaciones en la matriz rocosa [98].

3.1.5.2 Funciones de distribución del tamaño de las fracturas

La distribución del tamaño de las fracturas es inferida de la orientación y tamaño de los datos de seguimiento de las fracturas medibles. Dado que las observaciones son siempre parciales, el tamaño de los discos necesita ser reconstruido de las mediciones. Esto se hizo por un método de optimización usando recocido simulado [100].

Dos (2) tipos de distribuciones: (i) LogNormal y (ii) ley de potencia fueron usadas, ambas formas comparten la propiedad de contabilizar solo los valores positivos de la variable de estado [101]. Funciones de ley de potencia ofrecen la posibilidad de integrar diferentes escalas de trabajo, donde se recolectaron datos de campo a dos (2) diferentes escalas: 1:10000 y 1:2000. La principal diferencia en los campos simulados para las dos (2)

diferentes escalas fue los diferentes valores de corte usados en el proceso de generación. Los valores de corte fueron seleccionados tal que el número total de fracturas fuera similar [1].

3.1.5.3 Funciones de distribución de densidad de fracturas

La densidad de fracturas puede ser definida en dominios $2D$ o $3D$, como la longitud total de las fracturas por unidad de área P_{21} , o el total de fracturas por unidad de volumen en la roca P_{32} , respectivamente. La densidad de fracturas es tratada con una función espacial aleatoria esférica con alta incertidumbre. Adicionalmente, la distribución de densidad puede depender de las familias. Esto se relaciona al primer postulado de la reconstrucción de los campos de observación. En la Figura N° 3-5 se muestra una vista en planta de las fracturas observadas en campo, correspondiente a una escala de observación 1:2000. Los problemas de incertidumbre son causados por la escala de información disponible que produce sesgo artificial en la restitución de las alineaciones o en la definición de las densidades de las fracturas en una zona específica y no representan con exactitud toda la zona o el volumen de interés [79]. La geometría fractal ofrece una solución, ya que la dimensión fractal definida por Hausdorff que identifica el comportamiento invariante del medio fracturado incorporando información en todas las escalas. La dimensión fractal en el sitio está en el rango de 0.9 a 1.7 dependiendo de la familia [1] (Ver Tabla N° 3-1 y Tabla N° 3-2).

Después de la definición de la densidad, un algoritmo de recorte, es aplicado para el posicionamiento adecuado de las fracturas en el dominio de la simulación.

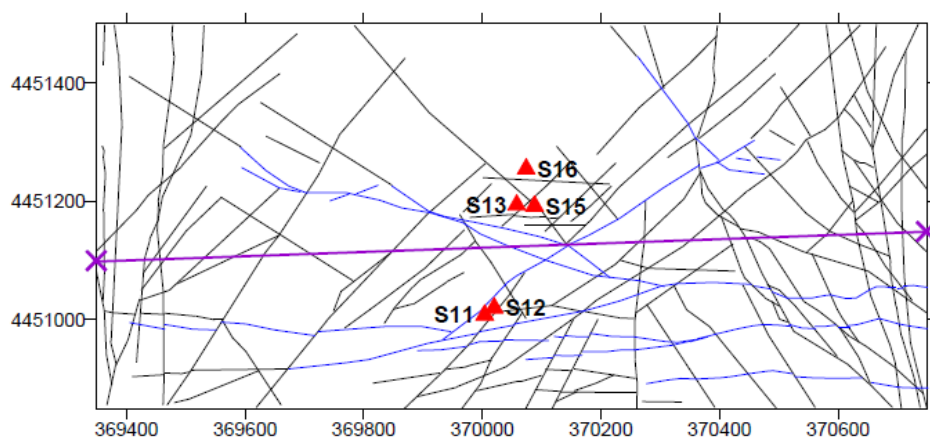


Figura N° 3-5 Vista en planta donde se trazan las fracturas observadas en el campo a la escala de 1:2000. Los pozos de sondeo y un trazado del dique de cuarzo son mostrados [1].

Tabla N° 3-1 Simulación de parámetros para la zona norte a escala 1:2000. P_{21} y P_{32} Son los parámetros de densidad de fracturas en el superficie y el domino tridimensional [1].

Escala 1:2000	Familia A Fisher	Familia B Fisher	Familia C Bingham Bivariado	Familia D Fisher	Familia E Fisher
Dirección; Buzamiento	5.1; 15.9	330.9; 16.7	235.4; 5	69.3; 4.4	108.4; 9.2
<i>pdf</i>	LogNormal	LogNormal	LogNormal	LogNormal	LogNormal
Dimensión Fractal	1.188	1.744	1.676	0.8979	1.596
$P_{21} (m^{-1})$	0.002947	0.007903	0.005265	0.0006084	0.007353
Número de Fracturas	32	53	34	4	51
$P_{32} (m^{-1})$	0.0037199	0.0098891	0.0049653	0.0025898	0.0083553

Tabla N° 3-2 Simulación de parámetros para la zona sur a escala 1:2000. P_{21} y P_{32} Son los parámetros de densidad de fracturas en el superficie y el domino tridimensional [1].

Escala 1:2000	Familia A Fisher	Familia B Fisher	Familia C Bingham Bivariado	Familia D Fisher	Familia E Fisher
Dirección; Buzamiento	180.4; 33.7	317.3; 42.4	47.8; 14.1	68.9; 12.2	276.6; 16.6
<i>pdf</i>	LogNormal	LogNormal	LogNormal	LogNormal	LogNormal
Dimensión Fractal	1.509	1.581	1.417	1.098	1.436
$P_{21} (m^{-1})$	0.01007	0.009086	0.005556	0.001335	0.007091
Número de Fracturas	112	55	33	8	33
$P_{32} (m^{-1})$	0.0137020	0.0159288	0.00628119	0.00108665	0.010352018

4 Flujo en medios fracturados

4.1 De una DFN a una malla numérica

Una vez que la DFN ha sido creada, el siguiente paso corresponde en convertirla en una malla que pueda ser modelada. Se adopta aquí una metodología de conceptualización de flujo en una red de fracturas, como la de una red de canales interconectados. La metodología que se utiliza es una modificación del modelo de canal desarrollado por [69]. Inicialmente se determinan las fracturas conductivas (un conjunto de toda la red). Esta red está formada por grupos de fracturas que están físicamente interconectadas y solo conectadas hidráulicamente por los límites, tal que sean capaces de conducir agua. Encontrar la red conductiva nos permite eliminar sectores que están desconectados de la red principal seleccionada. Remover estas fracturas no conductivas permite simplificar en gran medida los problemas de sobre computo en grandes áreas [102].

La creación de la malla de elementos 1-D (canales) es desarrollada en tres (3) etapas.

- Dos (2) discos que se intersectan son conectados por dos (2) segmentos. Cada uno tiene un final (nodo) localizado en el centro del disco. Estos dos (2) puntos son conectados por la definición de un nodo adicional, localizado en la intersección de las fracturas, (Ver Figura N° 4-1).
- El paso anterior se repite para todos los disco que se intersectan a lo largo de áreas que se interconectan, (Ver Figura N° 4-1).
- Dado que desde el paso uno (1) se deduce que cada elemento e_{ij} generado puede ser asociado a una fractura particular, por lo que es posible transferir propiedades de las fracturas a los elementos. Estas propiedades no solo incluyen parámetros hidráulicos, sino también el hecho que cada elemento puede estar asociado a una de las familias de fracturas, (Ver Figura N° 4-2).

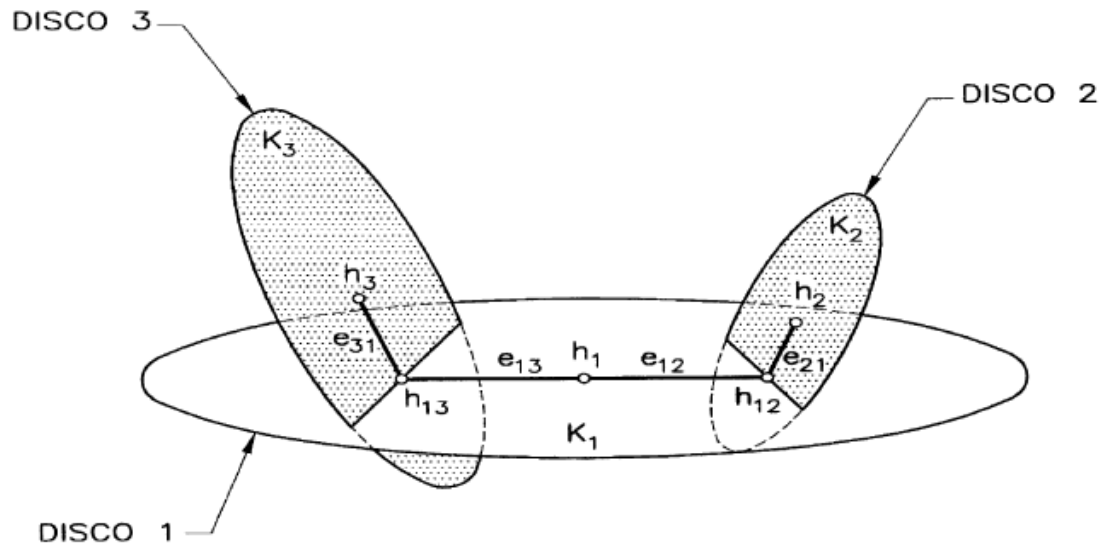


Figura N° 4-1 Red conductiva interfisuras propuesta en HIDROBAP-II [72].

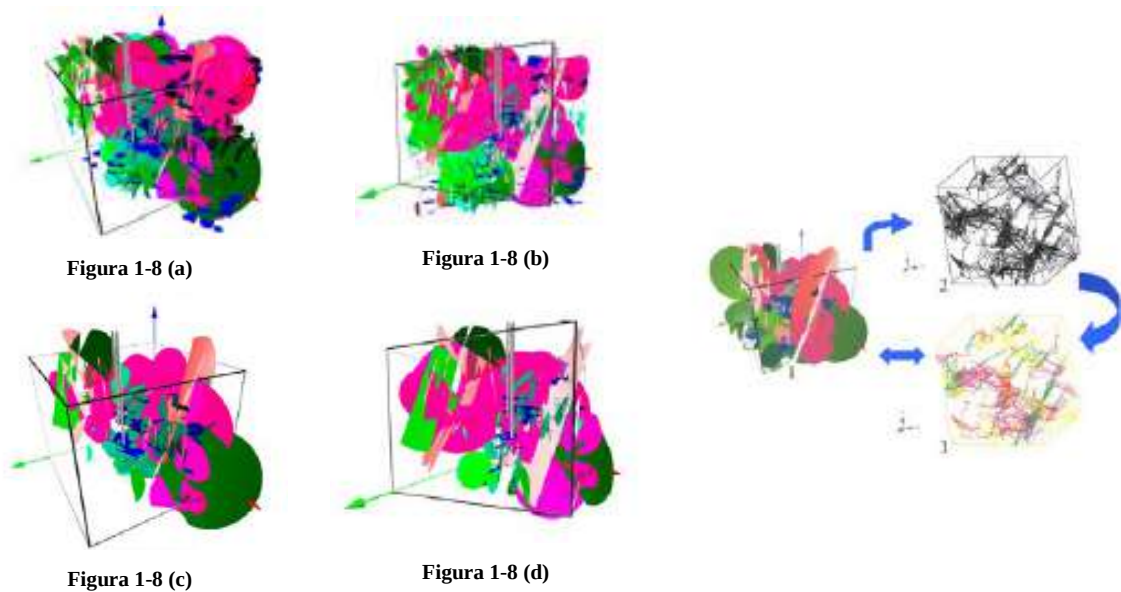


Figura N° 4-2 Generación de fisuras y la red conductiva. (a) corresponde con la red de fisuras generada e intersecada con sondeos sintéticos que representan el s-14 y el s-18; (b) la misma generación vista desde otro ángulo; (c) la red conductiva obtenida, con los dos sondeos; (d) otra vista de (c). El eje x es de norte-sur, el eje y es el este-oeste y el eje z es la vertical [72].

4.1.1 Discretización

La discretización involucra subdividir el dominio espacial en un conjunto de elementos finitos y el dominio del tiempo en un conjunto de intervalos de tiempo. El procedimiento para crear, introducir y verificar la malla de elementos finitos se explicará a continuación [102].

4.1.1.1 Los siguientes son los pasos para la construcción de la malla

- Paso 1: Construcción de un mapa a escala regional, indicando las propiedades hidrológicas de interés. Donde se definen y marcan los límites físicos del área a modelar.
- Paso 2: Marcar la localización de todos los pozos de bombeo y de observación, con el conocimiento previo de las zonas de transmisividad, almacenamiento y parámetros hidrológicos, y los tipos de condiciones de contorno (por ejemplo, el flujo y la carga prescrita).
- Paso 3: Basándose en la información del paso 2, se utiliza el criterio para dibujar las líneas de corriente aproximadas al patrón de flujo que resulta del bombeo y de las condiciones de contorno.
- Paso 4: Sobre la base de la red de flujo que se obtiene en el paso 3, se dibuja una malla de elementos finitos, usando un grupo de reglas básicas que se darán más adelante.
- Paso 5: Número de nodos. Durante la numeración hay que mantener en mente el ancho de banda de la matriz. Esta se reduce al mínimo cuando la diferencia máxima entre los nodos adjuntos es minimizada con respecto a todos los elementos en el dominio. El tiempo de cálculo aumenta a una tasa mayor a la lineal con el ancho de banda de la matriz.
- Paso 6: Establecer un sistema coordenado y registrar de forma secuencial las coordenadas de todos los nodos. Esto se puede hacer mediante el uso de un papel milimetrado, por consideraciones geométricas (si la red es bastante regular), por medio de un digitalizador o por un generador de malla. Este último resulta el más sencillo de utilizar.

Si una coordenada de los nodos es omitida esta puede ser interpolada de formar lineal por TRANSIN (Ver sección 5.4.1.1). Esto puede ser utilizado para simplificar la preparación del archivo de entrada, cuando una secuencia de nodos son alineados y equidistantes, en cuyo caso solo la primera y última coordenada nodal debe ser ingresada. Nótese, sin embargo, que las propiedades nodales de todos los nodos interpolados serán idénticos a las del primer

nodo en la secuencia, a excepción de aquellos en los en los que se ha definido un valor distinto de cero por defecto.

Al preparar el archivo de entrada para los problemas de múltiples capas, cada capa deber ser representada en un plano XY. La coherencia geométrica entre capas se garantiza a través de conexiones 1-D.

Adicionalmente, las siguientes reglas generales pueden ser utilizadas como directrices en la construcción de un elemento finito de red.

- La red debe cumplir con los límites y las interfaces entre materiales con propiedades diferentes.
- Los triángulos no deben tener ángulos obtusos.
- Cuando se resuelven problemas con elementos 2-D o 3-D tratar de evitar elementos especialmente alargados. En especial elementos con forma de tetraedro.
- A pesar que los pozos de bombeo y de observación no deben caer en los puntos nodales, para efectos de precisión se recomiendan que si lo hagan.
- Siempre que sea posible, es aconsejable que la malla se asemeje a la red de flujo. Esto facilita los regímenes de estado estacionario. O cuando los parámetros de flujo no cambian sustancialmente en el tiempo.
- En los problemas de múltiples capas, es conveniente (aunque no obligatorio) tener rejillas con formas similares.
- El aspecto clave en la preparación de la red es su tamaño base. El costo computacional crece a una tasa casi cuadrática con el número de nodos. Este costo es particularmente grande cuando se solucionan problemas no lineales. Por otra parte, los errores numéricos en la solución crecen cuadráticamente con el tamaño de la red. Esto implica que se debe alcanzar una relación entre gasto computacional y precisión requerida. Esto hace que sea imposible definir criterios absolutos para definir tamaños de cuadrícula.

4.1.2 Estimación de la parametrización

Los parámetros hidrodinámicos del acuífero (conductividad hidráulica K y coeficiente de almacenamiento S) son definidos sobre el dominio del flujo y sus límites. Donde, son función del espacio o del tiempo. En lugar de estimar estas funciones, la modelación inversa

requiere expresarlas en términos de un conjunto discreto de incógnitas, llamados parámetros del modelo. El proceso de expresar los parámetros del acuífero como función de los parámetros del modelo es llamado parametrización. Para un acuífero genérico los parámetros varían en el espacio sobre una zona dada (que sea $g(x)$).

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N f_i(\mathbf{x})g_i \quad x \in \text{zona } I \quad 4-1$$

Donde $f_i(\mathbf{x})$ es una función de interpolación prescrita y g_i es el correspondiente modelo paramétrico. Donde g no es constante a través del tiempo.

Aunque los diferentes tipos de funciones de interpolación se pueden incorporar fácilmente en TRANSIN, solo la zonificación fue implementada porque es el mejor marco para los modelos geológicamente basados. Por lo tanto, los parámetros son específicos por zonas, los cuales pueden consistir de uno o varios elementos (o nodos) permitiendo alguna propiedades hidrogeológicas. Entonces, $g(\mathbf{x})$ es definido como:

$$g(\mathbf{x}) = CF(N) \times G(I), \quad 4-2$$

donde x pertenece al elemento N (o el límite del segmento asociado con el nodo N), con un término que pertenece a la zona I . Cuando $g(x)$ depende del tiempo, la E.C. 4-2 se escribe como:

$$g(\mathbf{x}, t) = CF(N) \cdot G(I) \cdot FT(t) \quad \mathbf{x} \in \text{zona } I \quad 4-3$$

donde $FT(t)$ representa un valor de función de tiempo en el tiempo t , en la zona determinada. Nótese que los parámetros del acuífero se toman como constantes dentro de un elemento dado, aunque pueden variar de un elemento a otro. La definición de $CF(N)$ para cada elemento y para cada tipo de parámetro puede ser tedioso, Sin embargo, esto produce significativos grados de libertad para adaptar el código a diferentes necesidades específicas.

La expresión 4-3 es una descripción general suficiente de cualquier parámetro físico asociado con un problema lineal. Sin embargo, esto es complicado cuando el problema es no lineal porque depende de una variable de estado, $h(t)$. Así, por ejemplo, la capacidad de la humedad es una función del grado de humedad que a su vez depende de la carga piezométrica. Se propone una expresión compacta para un parámetro físico que depende de una variable de estado,

$$g(\mathbf{x}, t) = CF(N) \cdot G(I) \cdot FT(t) \cdot FNL(I, h(t)) \quad \mathbf{x} \in \text{zona } I \quad 4-4$$

Aunque no todos los parámetros no lineales pueden expresarse estrictamente de acuerdo a 4-4, la expresión es mostrada con el fin de ilustrar al lector el tratamiento dado por TRANSIN a la no-linealidad. En la 4-4, FNL es un vector que depende del estado de la variable, h . Una diferencia significativa entre FNL , y el resto del factor es que CF , G y FT están prescritos por el modelador. Por el contrario con FNL , el usuario tiene que definir la función FNL . TRANSIN calcula en función del tiempo según el valor actual de la variable de estado en los nodos de los elementos.

Por lo tanto, cada parámetro de la zona, $G(I)$ es capaz de adoptar una forma no-lineal que puede tener asociada un número de funciones no-lineales. Este número, a su vez, conduce a una serie de datos relacionados con las características de la función, que es ingresada por el usuario.

Por otra parte, debido a la naturaleza física, los parámetros genéricos son tratados como “clases” de parámetros tales como la transmisividad, coeficiente de almacenamiento o recarga, aunque pueden tener diferentes significados físicos. Además, los parámetros genéricos son considerados como parámetros potenciales del modelo, es decir se pueden considerar incógnitas.

4.1.3 Verificación de la discretización

La verificación de la malla es el proceso de asegurar que la ecuación de flujo se resuelva con suficiente precisión. Esto involucra “Verificación del código” en lo concerniente a asegurar que se esté utilizando un adecuado método numérico y que este programado sin

errores, TRANSIN ha sido testado exhaustivamente, por lo que se garantiza que errores de este tipo pueden ser descartados [102].

4.1.3.1 Error en los archivos de entrada

Considerando que la definición de la malla es bastante tediosa, se debe asumir que siempre se puede incurrir en errores, incluso si se utiliza un generador de la malla automático. La mayoría de los errores de entrada pueden ser identificados mediante el trazado de la malla, de preferencia con un código que pueda leer la red en el formato de archivos de entrada de TRANSIN, el trazado de la malla puede ayudar a identificar algunos errores geométricos obvios.

Por conveniencia, se pueden distinguir dos tipos de conexiones: conexiones horizontales (conexiones pertenecientes a elementos triangulares o cuadriláteros) y conexiones verticales (conexiones pertenecientes a elementos 1-D). Esta nomenclatura es empleada, porque en la mayoría de los casos los elementos 1-D son usados para definir la conexión entre capas.

<i>NUMNP</i>	Número de nodos
<i>NUMEL</i>	Número de elementos triangulares
<i>NECON</i>	Número de conexiones horizontales
<i>NHOLES</i>	Número de agujeros dentro de la malla (normalmente es cero (0)).
<i>NCEXT</i>	Número de conexiones definidas por los límites (tanto internos como externos)
<i>NGRIDS</i>	Número de redes aisladas.

Estas variables deben satisfacer la siguiente relación

$$NECON = NUMNP + NUMEL + NHOLES - NGRIDS \quad 4-5$$

$$NECON = (3 \times NUMEL + NCEXT) / 2 \quad 4-6$$

4.1.3.2 Tamaño de la discretización

La metodología propuesta en la sección 4.1.3 ayuda a definir errores en la malla, pero no garantiza que la precisión sea la adecuada. Los errores de truncamiento surgen como

resultado de la discretización en el espacio y el tiempo. Estos se reducen, a medida que el tiempo de CPU aumenta, por lo tanto la refinación de la malla incrementa el tiempo de solución. El adecuado refinamiento se basa en el costo de la exactitud y la capacidad de asumir un tiempo de cálculo dado.

El método más sencillo para la evaluación de los errores de truncamiento que se dan en una discretización espacio-temporal es por comparación con una solución analítica. En la mayoría de los problemas prácticos con geometría compleja no existe solución analítica. Sin embargo, en estos casos, se puede modificar un poco el problema con el objetivo que puedan ser comparados con una solución analítica. Por ejemplo, en el caso de problemas lineales, si se está modelando la respuesta de bombeo o inyección, es posible modificar los parámetros del modelo para hacer el acuífero isotrópico y homogéneo, de manera que se pueda comparar con una solución analítica. Sin embargo, esta comparación con la solución analítica es una prueba incompleta, es decir, nos permite descartar insuficiencias en las redes, pero no garantiza que la red es la adecuada para la real representación.

4.2 Simulación de flujo en una DFN

Los parámetros asociados con cada elemento en una malla de canales 1-D son la conductividad hidráulica (K) el coeficiente de almacenamiento (S) para flujo saturado. Condiciones de contorno (BC) deben aplicarse a todos los elementos que intersectan una geometría predefinida, una caja externa que contiene toda la red.

En principio los problemas de flujo pueden admitir todo tipo de condiciones de frontera, pero estas no son fáciles de seleccionar sobre la base de consideraciones físicas. Cuando se analiza una prueba de bombeo, la mejor forma es seleccionar una geometría externa, tal que ésta no se vea afectada por el ensayo (por ejemplo abatimiento nulo en todas las fronteras).

La interpretación de las pruebas de bombeo implica un proceso de calibración. Esta puede realizarse en principio, usando metodologías determinísticas o geoestadísticas. Cualquier código que pueda manejar elementos 1-D en una malla 3-D puede ser usado. Los puntos de observación deben pertenecer a uno de los elementos 1-D de la red conductora. Donde estos elementos no corresponden a ninguna familia, una familia externa debe ser creada (si fuera necesaria una nueva familia por cada punto de observación).

Con el fin de llevar a cabo el problema inverso, se considera que los valores de parámetros en cada elemento individual es dado por el producto de dos (2) valores: (a) un número específico, basado en la geometría y consideraciones de conectividad, y uno extraído de una *pdf* previamente especificada. Y (b) un factor de escala (parámetro de familia), que es un valor desconocido que es el mismo para todos los elementos asociados a una determinada familia y estos últimos son los que se calibran, por lo tanto, el parámetro final particular para la *pdf* de una familia dada es solo rescaldo de los valores iniciales asignados [1].

4.3 Ecuación de flujo

A continuación se hará una descripción de la ecuación de flujo que resuelve TRANSIN. Donde una combinación de alternativas relacionadas tanto con la dimensionalidad (1D, 2D, 3D) del problema y la naturaleza del flujo (confinado, inconfinado, no saturado) resulta en una formulación particular de la ecuación de flujo, que deriva en una forma genérica de la ecuación [102].

$$\frac{\partial \theta}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla(\mathbf{K} \nabla h) + q \quad \text{sobre } \Omega \quad 4-7$$

Donde $h[L]$ es la carga piezométrica, $h = (p / \gamma) + z = \psi + z$; $p[F / L^2]$ es la presión del agua, $\gamma[F / L^3]$ es el peso específico, $\psi([L])$ es la carga de presión y $z[L]$ es la posición vertical a un nivel de referencia. $\mathbf{K}$ Es el tensor de conductividad hidráulica, $q[T^{-1}, L / T, L^2 / T]$ es una recarga instantánea por tamaño de elemento (longitud para elementos 1-D, área para elementos 2-D, y volumen para elementos 3-D), θ es el contenido volumétrico del agua definido como:

$$\theta = \phi S_w f \quad 4-8$$

Donde ϕ es la porosidad, S_w es el grado de saturación y f es un factor que depende de la dimensionalidad y el tipo de problema.

4.4 Solución numérica de la ecuación de flujo

Una vez que se definen los valores de los parámetros, se puede resolver la ecuación de flujo. En el caso general, esta no tiene solución analítica, solo se puede emplear métodos numéricos en el contexto del agua subterránea, diferencias finitas o elementos finitos que han sido extensamente usados [103]. En estos casos, se seleccionan el método de elementos finitos porque se adaptan fácilmente a la irregularidad de los límites. Se resuelve la ecuación de flujo usando una semidiscretización del método de elementos finitos [104] donde la variación espacial y temporal es considerada por separado. Aplicando una discretización espacial a elementos finitos en la ecuación de flujo, se obtiene diferentes sistemas. Ese sistema es finalmente resuelto usando diferencias finitas.

$$\mathbf{A}(\mathbf{h})\mathbf{h} + \mathbf{D}(\mathbf{h})\frac{\delta\mathbf{h}}{\delta t} = \mathbf{b}(\mathbf{h}) \quad 4-9$$

Donde $\mathbf{A}, \mathbf{D}$ son matrices que dependen de la forma de los elementos, parámetros de flujo y de la variable de estado ($\mathbf{h}$) y $\mathbf{b}$ es un vector que depende del área de recarga, parámetros de los límites y de la variable de estado. Aplicando diferencias finitas se obtiene para el caso lineal lo siguiente:

$$\left(\theta_f \mathbf{A} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{D} \right) \mathbf{h}^{k+1} = \theta_f \mathbf{b}^{k+1} + (1 - \theta_f) \mathbf{b}^k + \left((\theta_f - 1) \mathbf{A} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{D} \right) \mathbf{h}^k \quad \text{E.C. 4-10}$$

Donde θ_f es el peso de los parámetros de flujo ($0 \leq \theta_f \leq 1$); si $\theta_f = 0$ es un esquema explícito si $\theta_f = 1$ es implícito; si $\theta_f = 1/2$ es un esquema de Crank-Nicolson de segundo orden en el tiempo, para el resto de los valores, el esquema es de orden 1), $\mathbf{h}^{k+1}$ es el arreglo de las cargas en el tiempo $k + 1$. Este sistema es resuelto secuencialmente iniciando con h_0 .

El procedimiento adoptado en TRANSIN consiste en calcular $g_{k(j)}$ con el promedio de los valores de h por elemento. Por otra parte, este es evaluado en el tiempo $k + \varepsilon$ (donde ε es un vector de error de balance de masa), diferente del $k + \theta$ el cual es usado para calcular

la variable explícita, $\mathbf{h}^{k+\theta_f}$ [105], en resumen, este sistema fue resuelto iterativamente por medio del método de Newton-Raphson:

$$f(\mathbf{h}) = \mathbf{A}^{k+\varepsilon} \mathbf{h}^{k+\theta_f} + \frac{\mathbf{D}^{k+\varepsilon}}{\Delta t} (\mathbf{h}^{k+1} - \mathbf{h}^k) - \mathbf{b}^{k+\theta_f} \quad 4-11$$

$$\mathbf{A}^{k+\varepsilon} = \mathbf{A}(\mathbf{h}^{k+\varepsilon}) \quad 4-12$$

$$h^{k+\theta_f} = \theta_f h^{k+1} + (1 - \theta_f) h^k \quad 4-13$$

La base con la que se resuelve el sistema es actualizando el vector de incrementos $\Delta h^{k+1,l+1}$, basándose en una aproximación previa de $f(h^{k+1,l})$ tal como se indica a continuación:

$$\frac{\delta f(h^{k+1,l})}{\delta h^l} (h^{k+1,l+1} - h^{k+1,l}) = f(h^{k+1,l}) \quad 4-14$$

El sistema es resuelto sucesivamente hasta que converge, de donde se obtiene h^{k+1}

A continuación se describe la aplicación del Método de Newton-Raphson

- Se inicializa el estado de la variable $h^{k+1,l}; l = 1$.
- Se calculan las matrices del problema físico $\mathbf{A}(h), \mathbf{D}(h), b(h)$.
- Se calcula la función $f(h)$ y el jacobiano $\frac{\partial f(h)}{\partial h}$.
- Se actualiza el estado de la variable $h^{k+1,l+1} = h^{k+1,l} + \Delta h^l$
- Si el método de Newton Raphson converge, se incrementa k y se repite el proceso.
- Si el método de Newton Raphson falla en la convergencia, se reduce el incremento en el paso de tiempo Δt
- Si las reducciones de Δt son demasiadas se detiene.
- Se regresa al paso dos (2)

5 Análisis de la prueba hidráulica

5.1 Prueba de bombeo

Dos (2) tipos de pruebas hidráulicas fueron desarrolladas en el sitio: (i) de agujero simple y (ii) pruebas de largas duración [56]. Las primeras fueron probados en pozos aislados, de más de veinte (20) metros en longitud, con una inyección de carga constante bajo la suposición de flujo radial en $2D$. Las cargas fueron medidas en los pozos S.2, S.13 y S.15 por medio de medidores de presión después de largos periodos de bombeo (alrededor de 4 días) con un caudal constante de $0.1L/min$ en el pozo S.2. La distancia de los pozos de observación S.13, S.15 al pozo de inyección es de 19 m y 22 m respetivamente y se analizó un periodo de recuperación de cuatro (4) días [1].

Tabla N° 5-1 Localización, profundidad y diámetro de los pozos [56].

Pozo	Posición			pendiente	Profundidad	Diámetro
	X	Y	Z		[m]	[mm]
S.2	370056	4451186	900.21	95	30.10	86
S.13	370058	4451194	945.00	20	173.70	101
S.15	370088	4451010	946.50	30	154.76	101

5.2 Problema inverso

El problema inverso consiste en la estimación de los parámetros del modelo a partir de mediciones de la respuesta del sistema y un apropiado conocimiento previo de los parámetros. Mientras que en la modelación tradicional, y en particular la modelación inversa, es vista como una simple rutina de un programa de cómputo, el problema en cuestión es mucho más complejo y debe ser visto bajo una perspectiva más amplia, ya que implica la interacción de varios pasos de los cuales la estimación paramétrica no es necesariamente la más importante ni la que consume más tiempo. Por lo que resulta conveniente distinguir los siguientes conceptos [102].

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

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

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

Es cierto que, la separación de estos tres (3) conceptos es algo arbitrario. Por ejemplo, la localización de los límites entre dos (2) formaciones con diferente transmisividad puede ser un problema de MSI o un problema de estimación de parámetros. La descripción de la recarga puede ser un proceso idéntico a un problema de estimación de parámetros (la tasa de recarga puede ser estimada sobre la base de datos disponibles y despreciar su estimación si el valor es demasiado pequeño). De hecho estos ejemplos sencillos señalan que los tres (3) conceptos dependen del enfoque del modelador [102].

En general, cuando se incrementa el nivel de detalle, los tres (3) conceptos se mezclan y la necesidad de distinguir entre ellos se reduce.

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

En el marco de la actual investigación, el proceso de identificación no suele ser un problema, porque tanto la ecuaciones de la ley de Darcy y de Richards son ampliamente aceptadas para el flujo de las aguas subterráneas. Por lo tanto, ignorar un proceso relevante en el estudio puede ser causado por descuidos. Sin embargo, el almacenamiento y los

mecanismos de recarga, así como la carga piezométrica depende de los parámetros del acuífero y el comportamiento de flujo en las fronteras, las cuales requieren esfuerzos de conceptualización inicial. Actualmente, se puede intentar calibrar diferentes modelos conceptuales y seleccionar el que conduce a mejores resultados. Sin embargo, la información dura (información tomada directamente en campo), rara vez es suficiente para seleccionar un modelo inequívoco, de modo que, tanto como procesos y estructuras del modelo deben ser definidos sobre la base de datos cualitativos, donde sea posible. Después de haber descrito adecuadamente los mecanismos físicos, la identificación de la estructura del modelo se convierte en un punto crítico. En nuestro contexto, la definición de la estructura del modelo puede ser equiparada a la descripción del sistema físico en función de los parámetros del modelo. Uno de los pasos más importantes en el proceso de parametrización, el cual se describe a continuación [102].

Uno de los problemas en la estimación de parámetros del modelo es que muchas conceptualizaciones diferentes pueden dar lugar a una interpretación similar del modelo. Por otra parte, si la estructura del modelo es correcta, sus parámetros pueden no tener ninguna relación con sus contrapartes físicas. Por otro lado, un buen ajuste entre las mediciones y las respuestas obtenidas por el cálculo computacional no garantiza que las predicciones que se puedan realizar sean buenas.

No existen normas precisas ni un enfoque formal para definir el marco conceptual del modelo. De hecho, se podría argumentar que la hidrogeología tradicional está orientada hacia dicho objetivo. El hidrólogo debe incorporar información proveniente de muchas fuentes (geoquímica, litología, geología, estructural, sedimentológica, botánica, etc.) para crear una descripción coherente del sistema. Esta coherencia se pone a prueba a través de la modelación inversa, pero está claro que no se puede lograr resultados significativos si en primer lugar la imagen cualitativa no es buena. Es cierto que, el nivel de detalle necesario para la modelación inversa, el cual involucra geometría, tipos de límites y pautas de zonificación es mucho más alta que la que utiliza el hidrogeólogo. Por lo tanto, hay que dejar un cierto margen de incertidumbre en la definición precisa del modelo conceptual

5.3 Definición de la función objetivo

El ideal de la calibración es encontrar un conjunto de parámetros que hacen que la solución del modelo sean igual a las verdaderas cargas. Este estado ideal nunca puede ser logrado, debido a que algunos errores no pueden ser estudiados de forma separada [102], a continuación se describen los más usuales.

La diferencia entre la solución exacta de la ecuación de flujo y las verdaderas cargas piezométricas. Esta diferencia proviene de parámetros erróneos y errores en el modelo conceptual, además del hecho que las ecuaciones de flujo se derivan de la simplificación del sistema físico.

Diferencia entre las cargas piezométricas reales en algunos puntos específicos y tiempos sobre un punto. Estos errores en la medición son causados por la interpretación errónea de datos, mediciones inapropiadas, entre otros.

Ninguno de estos errores puede determinarse de forma individual, pero la suma de todos ellos sí, es decir, la diferencia entre los datos medidos y calculados. Por esta razón, la definición correcta debe ser la diferencia entre el valor verdadero y la solución exacta, la cual debe satisfacer el planteamiento del problema en términos de diferencia entre mediciones y datos computados (a veces llamados residuos). A continuación, se utilizará z para simbolizar los valores computados y z^* para los valores medidos.

5.3.1 Formulación

Con el objetivo de definir un buen arreglo entre los valores definidos y computados, se debe definir matemáticamente que es un “buen arreglo”. Lo usual consiste en definir una apropiada función de distancia entre z y z^* , tratando de minimizar tal distancia. Muchas distancias han sido utilizadas en el contexto de la hidrogeología [106; 107]. Los métodos pueden ser divididos en dos (2) grupos: los que definen una distancia sin ninguna consideración adicional acerca de los datos, y las que usan un marco estadístico, los más utilizados son:

- (1). Mínimos cuadrados, a pesar que muchas de las formulaciones no se plantean directamente como un problema de mínimos cuadrados, la función objetivo final se asemeja a la de los mínimos cuadrados. La función objetivo a minimizar es

$$F = (z - z^*)^t (z - z^*) \quad 5-1$$

- (2). Mínimos cuadrados generalizados, este método se asemeja al anterior, pero incluye la posibilidad que las mediciones en diferentes lugares y tiempos puedan tener diferentes niveles de confianza, y los errores se pueden correlacionar. En este método todos los puntos tienen un peso relacionado con el grado de su confianza. En este caso la función se escribe como.

$$F = (z - z^*)^t \mathbf{W}(z - z^*) \quad 5-2$$

Donde $\mathbf{W}$ son los pesos definidos en una matriz simétrica definida.

- (3). Máxima verosimilitud (ML), este método consiste en la maximización de la probabilidad de observación de los datos medidos en campo con respecto a los parámetros (es decir maximizar la probabilidad de los parámetros). En contraste con los métodos anteriores, se debe seleccionar un modelo estadístico con el fin de poder aplicar el método. En este enfoque se maximiza la probabilidad, dados los datos observados. En este método los parámetros son fijos pero desconocidos debido a la falta de conocimiento básico del sistema físico.
- (4). Maximización de la probabilidad a posteriori. Esta consiste en maximizar la probabilidad de los parámetros dados en las observaciones. Al igual que en el caso anterior, es necesario definir un modelo estadístico para la aplicación de este. En la mayoría de los casos, ambos métodos dan lugar a algoritmos similares.

Algunos otros métodos menos utilizados en el problema de modelación inversa en aguas subterráneas son el método de los momentos o la estimación Bayesiana, entre otros.

Los métodos (1) y (2), así como los (3) y (4) se utilizan bajo la suposición de una función de distribución Gaussiana, pueden ser vistos como casos particulares de una norma en $\mathbf{R}^n$, más específicamente, una norma $\|\cdot\|_2$. (sumatoria de la diferencias entre los datos medidos y observados elevados a una potencia $n = 2$) Otros autores usan diferentes normas, por ejemplo $\|\cdot\|_1$ [108; 109]:

$$F = \sum_{i=1}^n |z_i - z_i^*| \quad \text{E.C. 5-3}$$

Cada norma tiene ventajas y desventajas, $\|\cdot\|_2$ da un peso excesivo a datos con grandes residuos, $\|\cdot\|_1$ esta no es diferenciable en el origen, etc.

Los primeros dos grupos de métodos (1) y (2), se pueden obtener como un caso particular de *ML* cuando una distribución normal es asumida se supone el error de la carga piezométrica y concentración.

Se seleccionó el *ML* por tres (3) razones fundamentales: (i) información previa acerca de los parámetros puede ser introducida fácil y rápidamente [110]. (ii) Este ha sido usado exitosamente para la estimación de parámetros de flujo [111]. (iii) *ML* conduce naturalmente al criterio para selección de la estructura del modelo [111]. Como se mencionó antes, *ML* puede ser pensado como un $\|\cdot\|_2$ en $\mathbf{R}^2$. Las desventajas están asociadas a grandes residuo, pero los pesos que se asignan a la variable pueden reducir considerablemente las grandes variaciones de estos datos.

5.4 Algoritmos de optimización

En este apartado se hará una breve descripción de las técnicas de optimización que se implementaron con el objetivo de lograr las mejores bondades de ajuste entre los valores simulados y las pruebas hechas en campo.

5.4.1 Método de máxima verosimilitud

Definición del método. Sea R un conjunto de observaciones (medidas de cargas piezométricas) y sea H una hipótesis acerca del problema físico (parámetros del modelo y ecuación de flujo). Sea $f(R/H)$ la función de densidad de probabilidad de los datos observados R dada una hipótesis H de acuerdo a un modelo estadístico dado. La probabilidad de H dado R es definida como $L(H/R) = kf(R/H)$, donde k es una constante arbitraria. Debe tenerse en cuenta que la constante k tiene un sólo valor para todas las hipótesis, dados los mismos datos y marco de modelo estadístico.

El cociente de probabilidad entre dos (2) hipótesis para algunas observaciones se define como la relación entre probabilidades. Esta se define como $L(H_1, \frac{H_2}{R}) = \frac{L(H_1/R)}{L(H_2/R)}$.

El método de máxima verosimilitud consiste en definir los parámetros que maximicen el valor $L(H/R)$. La base de este método radica en el axioma de verosimilitud [110], que considera los criterios de estimación se basan sobre los residuos, es decir, la diferencia entre el valor computado y el valor medido. La estructura del error es generalmente desconocida. La única información a la que se puede tener acceso, es una pequeña idea sobre la estructura de error en las mediciones. Las fuentes de error pertenecen a uno de los siguientes tres (3) grupos: conceptuales, computacionales y errores de medición. Los errores conceptuales se deben a la simplificación errónea con respecto a la mayoría de los fenómenos físicos importantes (condiciones inadecuadas de frontera, el análisis erróneo de los procesos pertinentes, etc.) y a la heterogeneización de parámetros (las zonas no representan la variabilidad espacial con precisión). Los errores de cálculo se deben al algoritmo numérico. Se relacionan con la discretización espacial y temporal y la zonificación de parámetros. Los errores de medición provienen de una interpretación incorrecta de los datos y de la exactitud de los instrumentos de medición. En conclusión, el gran número de fuentes de error que están presentes pueden justificar el uso del teorema de limite central, es decir, suponiendo que los errores se ajustan a una distribución Gaussiana. Esta hipótesis será la que conforma el marco estadístico en el cual se buscarán los parámetros con máxima verosimilitud.

Los estimadores de máxima verosimilitud tienen algunas buenas propiedades. Sea ϕ la transformación uno a uno en el espacio paramétrico. La tasa de probabilidad entre dos (2)

diferentes hipótesis es transformada por sustitución directa de p por $\phi(p)$ cuando un conjunto de parámetros de p es transformado en un nuevo ϕp , y si el estimador de máxima probabilidad de p es $\hat{p}$, luego el estimador para $\phi(p)$ es $\phi(\hat{p})$ [110]. Esta propiedad permite hacer una transformación adecuada para convertir la distribución de un parámetro en Gaussiana en caso que estos no se ajusten a ésta. Las transmisividades son un claro ejemplo de esto. Para éstas se asume una distribución de tipo Log-Normal. Así, en lugar de trabajar con transmisividades, se trabaja con su logaritmo, entonces los parámetros transformados tendrán una distribución Gaussiana. Una vez se obtiene la estimación de máxima verosimilitud para las Log-Transmisividades, se aplica el anti-logaritmo para obtener el estimativo de la transmisividad [102].

Con la hipótesis de los residuos y la información previa de la distribución normal, de cargas piezométricas, la función de probabilidad puede escribirse como:

$$L = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (|C_h||C_p|)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (h - h^*)^t C_h^{-1} (h - h^*) + (p - p^*)^t C_p^{-1} (p - p^*) \right], 5-4$$

donde h es la respectiva carga computada, h^* es la de carga medida, p son los parámetro computados, p^* es obtenido de información previa, y C_h y C_p son la matrices de covarianza de cargas, y parámetros (si los diferentes tipos de parámetros no se correlacionan, la última matriz tiene una estructura de bloque diagonal, un bloque para cada tipo de parámetro, siendo esta la hipótesis usual) y n el número total de datos (la suma de las cargas y parámetros de información previa).

5.4.1.1 TRANSIN

El TRANSIN [112] permite resolver y estimar los parámetros de las ecuaciones de flujo. El programa emplea el método de los elementos finitos para la solución de la ecuación. Estos elementos pueden ser segmentos, triángulos, rectángulos, tetraedros, y prismas de base triangular. Es decir, el programa puede trabajar con dominios espaciales unidimensionales, bidimensionales, cuasi-tridimensionales (simetría radial y multicapas) y tridimensionales. El régimen puede ser estacionario o transitorio. La estimación de los parámetros del modelo se hace a través de la minimización de una función objetivo derivada de la Teoría de Máxima

Verosimilitud que permite incluir información previa sobre el valor de los parámetros [113]. El programa permite estimar los parámetros de flujo.

En esta sección se hace una breve descripción del uso básico del TRANSIN y algunos detalles. El aprovechamiento del código requiere un conjunto amplio de temas. Esto incluye la hidrogeología básica, estadística y métodos numéricos. Lo primero que se necesita es la formulación de un modelo conceptual junto con ayudas estadísticas y por ultimo un conocimiento mínimo en métodos numéricos que permita la minimización de errores numéricos.

Para la representación del medio fracturado se disponía del código FRACAS [73] que genera redes de fracturas discretas pero no resuelve el problema inverso, acoplado al código TRANSIN que calibra automáticamente. Este ensamble permite realizar calibraciones automáticas para el flujo en los modelos de redes fracturadas discretas y fue mejorado al implementar: diferentes tipos de condiciones de contorno (por ejemplo, condición de goteo).

Como se mencionó, se dispone de un algoritmo de calibración que permite estimar los parámetros hidrodinámicos de flujo mediante la aplicación de un algoritmo de Máxima Verosimilitud (Método de Levenberg Marquardt). Que viene incluido en el programa TRANSIN [102].

Esta familia de metodologías pertenece a la clase de métodos de paso restringido, que tratan de reducir la dificultad de algunos métodos basados sobre aproximaciones cuadráticas. Este método resuelve el sistema como sigue [102]:

$$\left(\mathbf{H}^{(m)} + \mu^{(m)} I \right) \Delta \mathbf{p}^{(m)} = -\mathbf{g}^{(m)}, \quad 5-5$$

donde $\mathbf{H}^{(m)}$ es el Hessiano de la función objetivo (usualmente una aproximación) en el punto $\mathbf{p}^{(m)} \in \mathbb{R}^n$, $\mu^{(m)} \in \mathbb{R}^+$, $\mathbf{g}^{(m)}$ es el gradiente en el punto $\mathbf{p}^{(m)}$, y $\Delta \mathbf{p}^{(m)}$ es un parámetro de incremento, $(\mathbf{p}^{(m+1)} = \mathbf{p}^{(m)} + \Delta \mathbf{p}^{(m)})$. El parámetro $\mu^{(m)}$ es actualizado cada iteración (m) . Este parámetro controla la dirección del incremento paramétrico, $\Delta \mathbf{p}^{(m)}$. Si $\mu^{(m)} = 0$,

el método de Marquardt coincide con el método de Gauss-Newton. Donde $\mu^{(m)}$ se incrementa, la longitud $\Delta p^{(m)}$ decrece [114]. El criterio es similar al propuesto por [115].

$$(\mathbf{E}^{-1}\mathbf{H}^{(m)}\mathbf{E}^{-1} + \mu^{(m)}\mathbf{I})\mathbf{E}^{-1}\Delta\mathbf{p}^{(m)} = -\mathbf{E}^{-1}\mathbf{g}^{(m)} \quad 5-6$$

donde

$$\mathbf{H}^{(m)} = \mathbf{J}_h^t \mathbf{V}_h^{-1} \mathbf{J}_h + \lambda_c \mathbf{J}_c^t \mathbf{V}_c^{-1} \mathbf{J}_c + \sum_i \lambda \mathbf{V}_i^{-1} \quad 5-7$$

$\mathbf{g}$ Es computado como

$$\mathbf{g}^{(m)} = \mathbf{J}_h^t \mathbf{V}_h^{-1} (h - h^*) + \mathbf{J}_c^t \mathbf{V}_c^{-1} (c - c^*) + \mathbf{V}_p^{-1} (p - p^*) \quad 5-8$$

$$\mathbf{V}_p = \begin{pmatrix} \lambda_1 \mathbf{V}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \mathbf{V}_n \end{pmatrix} \quad 5-9$$

Donde n es el número de diferentes tipos de parámetros en la estimación, $\mathbf{J}_h$ y $\mathbf{J}_c$ son los Jacobianos, $\mathbf{V}_h$, $\mathbf{V}_c$ y $\mathbf{V}_i$ son matrices simétricas definidas positivas que contiene parámetros de estructuras de covarianza y λ_i es $\frac{\tau_h}{\tau_i}$, donde τ_h , τ_i son escalares desconocidos. $E = \sqrt{H_{ij}\delta_{ij}}$, donde H_{ij} se encuentra el elemento de la fila i columna j de la matriz.

5.4.1.2 Criterio de convergencia

El objetivo final de cualquier algoritmo de optimización consiste en encontrar una secuencia de convergencia $\{\mathbf{p}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ con límite $\hat{\mathbf{p}}$ (el mínimo de f) tal que la secuencia de imágenes de la función objetivo $\{f(\mathbf{p}_n)\}$ es decreciente a $f(\hat{\mathbf{p}})$. Este concepto, aunque fácil de definir desde un punto vista analítico, involucra una difícil decisión numérica. Por ejemplo, nadie puede generar una secuencia infinita, solo un número finito de términos. Esto lleva a la decisión sobre el número de miembros de la secuencia que se debe generar. La respuesta correcta, por supuesto, sería detenerla cuando $\|\mathbf{p}_n - \hat{\mathbf{p}}\|$ sea lo suficientemente pequeño, pero $\hat{\mathbf{p}}$ representa lo que se quiere saber, así que se deben buscar otros criterios [102].

El otro camino es imponer una mínima condición matemática ($g = 0$), pero la implementación práctica es muy difícil. Ya que g nunca puede ser idéntico a cero (0) por los errores de redondeo y truncamiento. De hecho, en problemas reales, la solución puede estar muy cerca del mínimo y g ser muy grande. Por lo tanto, una serie de criterios son utilizados como indicadores de convergencia y se describen brevemente a continuación. En general, se puede decir que un buen postulado de convergencia del problema inverso y que cualquiera de los criterios descritos a continuación pueden identificar correctamente el mínimo. Por otro lado, los problemas de inestabilidad pueden detener el algoritmo antes que el criterio de convergencia sea alcanzado [102].

TRASIN detiene el proceso iterativo cuando los siguientes criterios son alcanzados.

- Número de iteraciones (MAXITER). Este criterio es definido por seguridad, si el problema se detiene por esta razón, es probable que el criterio de convergencia haya sido alcanzado.
- Norma del gradiente (GNORM): Este hace referencia al delta de ajuste que se obtiene con el proceso iterativo, si este es demasiado pequeño, la solución está cerca del óptimo y el proceso iterativo es detenido. Esta variable depende de muchos factores y es difícil de seleccionar hasta que el problema no se ha corrido por primera vez.
- Reducción relativa de la norma del gradiente con respecto a la primera norma del gradiente (GNORM1): debido a las dificultades en el establecimiento de un límite absoluto para el límite de la norma. A menudo es conveniente establecer un valor relativo, donde las iteraciones se detienen si:

$$\frac{\|g_i\|}{\|g_1\|} < GNORM1, \quad 5-10$$

donde $\|g_i\|$ es la norma del gradiente en la iteración i y $\|g_1\|$ es la norma del gradiente inicial. Teóricamente, este es un pobre criterio porque depende del punto inicial. Sin embargo, existe un criterio que es un indicador fiable de convergencia real, el cual indica que si las iteraciones se detienen como resultados de E.C-5-11, quiere decir que la solución se está acercando al mínimo

- Reducción relativa de la función objetivo por iteración (DMINF): El algoritmo es detenido si la reducción en el valor de la función objetivo es cerca a ser despreciable, que es, si

$$\left| \frac{J^i - J^{i-1}}{J^i} \right| < DMINF, \quad 5-11$$

donde J^i es la función objetivo en la iteración actual y J^{i-1} es el valor de la iteración previa.

De hecho, cerca del óptimo, o en zonas de baja sensibilidad de la función objetivo de los parámetros, la reducción del valor de la función objetivo puede ser pequeña y los parámetros calculados aún pueden estar lejos del óptimo. En resumen, este criterio a menudo indica la incapacidad del método para reducir aún más la función objetivo, en lugar que la convergencia se allá alcanzado.

- Máximo cambio en valores de parámetro. Este es el último criterio utilizado por TRASIN hace referencia al cambio máximo de parámetros por iteración.

La calibración automática no es tan simple como se sugiere. Es complicada por dos (2) tipos de problemas. El primero está relacionado con la conceptualización y el segundo con los problemas de estabilidad o convergencia. Rara vez la conceptualización inicial del modelador es satisfactoria al calibrar el modelo correspondiente, es necesario revisar los supuestos iniciales, a menudo en el sentido de aumentar su complejidad y el número de parámetros del modelo.

En la Figura N° 5-1 se muestra un esquema con el proceso de solución que se encuentra implementado dentro del TRASIN en general el algoritmo consta de tres (3) partes; (i) la primera resuelve el problema directo, (ii) la segunda actualiza el estado de variable en el tiempo, y la última que actualiza el conjunto de valores de los parámetros.

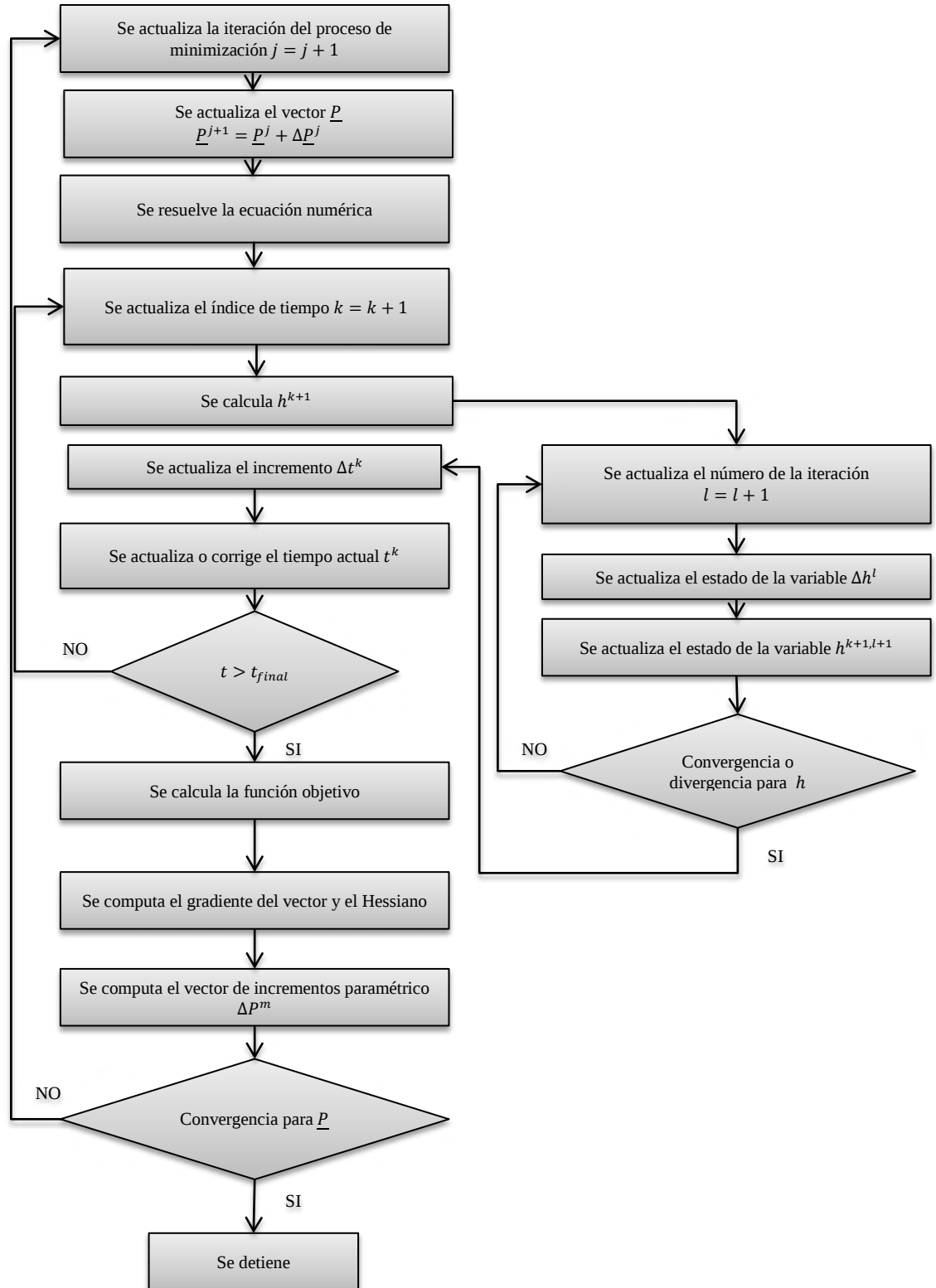


Figura N° 5-1 Esquema de descripción general del algoritmo implementado en TRANSIN [102].

5.4.2 Shuffled Complex Evolution method (SCE-UA)

El grado de dificultad en la solución de un problema de optimización global depende de ciertas características, relacionadas con las dimensiones del problema y las características de la función objetivo [116; 117] y [118]. Experiencias con problemas prácticos de optimización global en el campo de modelación hidrológica [119; 120; 121] indican que hay cinco (5) principales características que complican el proceso de solución.

- Pueden haber varias regiones es la que pueda existir una convergencia, es decir, la existencia de múltiples zonas en las que la función objetivo presenta ajustes similares. Este punto en particular es de vital cuidado, debido a la gran incertidumbre que esto genera sobre la solución particular que haya obtenido.
- En cada una de las regiones en las que hay convergencia, pueden existir numerosos mínimos locales. Estos puntos óptimos pueden estar cerca o a distancias mayores de la solución. La existencia de mínimos locales por lo general se debe a la gran sensibilidad numérica que se presentan en algunos problemas de optimización, donde pequeñas variaciones en los parámetros traen consigo criterios de ajustes muy similares. Sin embargo, éstas resultan ser solo pequeñas perturbaciones alrededor de los mínimos locales.
- La superficie de la función objetivo en el espacio multiparamétrico puede no ser lisa e incluso presentar discontinuidades. Las derivadas pueden ser discontinuas y variar de manera impredecible a través del espacio paramétrico. Cuando esto sucede los métodos basados en gradientes resultan poco efectivos ya que sus derivadas pueden caer en alguna de estas zonas, lo que tiene como consecuencia inestabilidad numérica e incluso que nunca se alcance la convergencia.
- Los parámetros pueden presentar diferentes grados de sensibilidad y una gran cantidad de interacciones. Gran parte de las interacciones puede ser no lineales.
- La superficie de respuesta, cerca de la verdadera solución es a menudo no convexa. Cuando esto sucede, se cae en zonas con bajas sensibilidades y con ello se dificulta

la localización del óptimo. En estos casos particulares el criterio de convergencia resulta siendo el número de iteraciones, debido al poco incremento que produce en la función objetivo a medida que se mueve por el espacio de búsqueda.

Un problema de optimización que contiene las cinco (5) características mencionadas anteriormente resulta particularmente difícil de resolver.

El SCE se basa en una síntesis de los cuatro (4) conceptos que han resultados muy útiles para la optimización global.

- Combinación de aproximaciones determinísticas y aleatorias [117; 122; 118].
- El concepto de agrupamiento [123; 124; 125]. Este hace referencia a la conformación de subpoblaciones dentro de la comunidad, cada una de estas puede evolucionar de manera independiente garantizando que las futuras mezclas tengan las mejores propiedades de cada subgrupo.
- El concepto de una evolución sistemática de un conjunto de puntos que abarque el espacio, en la dirección de la mejora global. [126; 127; 128]. Éste hace referencia al ciclo evolutivo que se realiza en cada subpoblación mediante un proceso de generación evolutiva, donde los padres se mezclan dando origen a descendientes con mejores características.
- El concepto de evolución competitiva [129]. Cuando cada una de la subpoblaciones ha evolucionado, éstas están facultadas para mezclarse garantizando con esto que todas las subpoblaciones aporten sus mejores descendientes, una vez sucede esto, el proceso se repite iterativamente hasta lograr la convergencia.

El SCE combina las fortalezas de los algoritmos evolutivos de CRS (búsqueda aleatoria controlada) que fueron utilizados como punto de partida para el método SCE y poseen varias propiedades que son deseables para que la optimización global sea eficaz y eficiente, como por ejemplo, trata cada región del área de muestra de una manera no preferencial, con el concepto de evolución competitiva [129]. La estrategia del SCE es presentada a continuación y se ilustra en la Figura N° 5-2.

Paso 0: Inicializar. Seleccionar $p \geq 1$ y $m \geq n+1$, donde p es el número de Subpoblaciones o comunidades y m es el número de puntos para cada Subpoblacion.

Paso 1: Generar la muestra. Se generan los puntos s sobre el espacio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Se computa la función f_i para cada punto x_i . En la ausencia de información previa, se usa una distribución de muestra.

Paso 2: Categorizar puntos. Clasificar los puntos s en orden de incrementos del valor de la función. Se guardan en un arreglo $D = \{x_i, f_i, i=1, \dots, s\}$, tal que $i=1$ representa el punto con el valor más pequeño de función objetivo.

Paso 3: Partir en subpoblaciones. Se parte D en p subpoblaciones $A^1, \dots, A^p$, cada uno contiene m puntos, tal que:

$$A^k = \{x_j^k, f_j^k \mid x_j^k = x_{k+p(j-1)}, f_j^k = f_{k+p(j-1)}, j=1, \dots, m\} \quad 5-12$$

Paso 4. Evolucion de cada subpoblación: Evolucionada cada Subpoblación $A^k, k=1, \dots, p$ por separado de acuerdo al algoritmo de evolución competitiva CCE.

Paso 5. Se mezclan las subpoblaciones. Se reemplaza $A^1, \dots, A^p$ dentro de D , tal que $D = \{A^k, k=1, \dots, p\}$. Se ordena D en orden creciente de valor de la función objetivo.

Paso 6. Se revisa la convergencia. Si el criterio de convergencia se satisface, se detiene, de otra forma, regresa al paso 3

El algoritmo CCE (competitive complex evolution) es requerido para la evolución de cada subpoblación en el paso cuatro (4) del método SCE, este es presentado a continuación e ilustrado en la Figura N° 5-3.

Paso 0: Inicialización. Se selecciona q, α y β , donde $2 \leq q \leq m, \alpha \geq 1, \text{ y } \beta \geq 1$.

Paso 1. Asignación de pesos. Se asigna una distribución de probabilidad triangular a A^k

$$p_i = 2(m+1-i) / m(m+1), \quad i = 1, \dots, m. \quad 5-13$$

El punto x_i^k tiene la probabilidad más alta, $p_1 = 2 / m + 1$ El punto x_m^k tiene la probabilidad más baja, $p_m = 2 / m(m+1)$.

Paso 2. Selección de los padres. Aleatoriamente seleccionamos q puntos distintos $u_1, \dots, u_q$ para los puntos A^k de acuerdo a una distribución de probabilidad especificada previamente (el punto q define un Subgrupo). Se almacena en el arreglo $B = \{u_i, v_i, i = 1, \dots, q\}$, donde v_i es el valor de la función asociada con el punto u_j . Se almacena en L la localización de A^k la cual es usada en la construcción de B .

Paso 3. Generación del descendiente.

- a) Se clasifican B y L tal que el punto q es ordenado con el incremento de la función objetivo. Se computa el centroide g usando la expresión

$$g = [1 / (q-1)] \sum_{j=1}^{q-1} u_j \quad 5-14$$

- b) Se computa el nuevo punto $r = 2g - u_q$ (paso de reflexión)
- c) Si r está dentro de Ω , se computa el valor de la función f , y se va al paso (d), sino, se calcula el menor hipercubo $H \subset \mathbb{R}^n$ que contiene A^k , aleatoriamente se genera un punto z dentro de H , se computa f_z , se establece $r = z$, y $f_r = f_z$ (paso de mutación).
- d) Si $f_r < f_q$, se reemplaza u_q por r , y se va al paso (f); sino, se calcula $c = (g + u_q) / 2$ y f_c (paso de contracción).

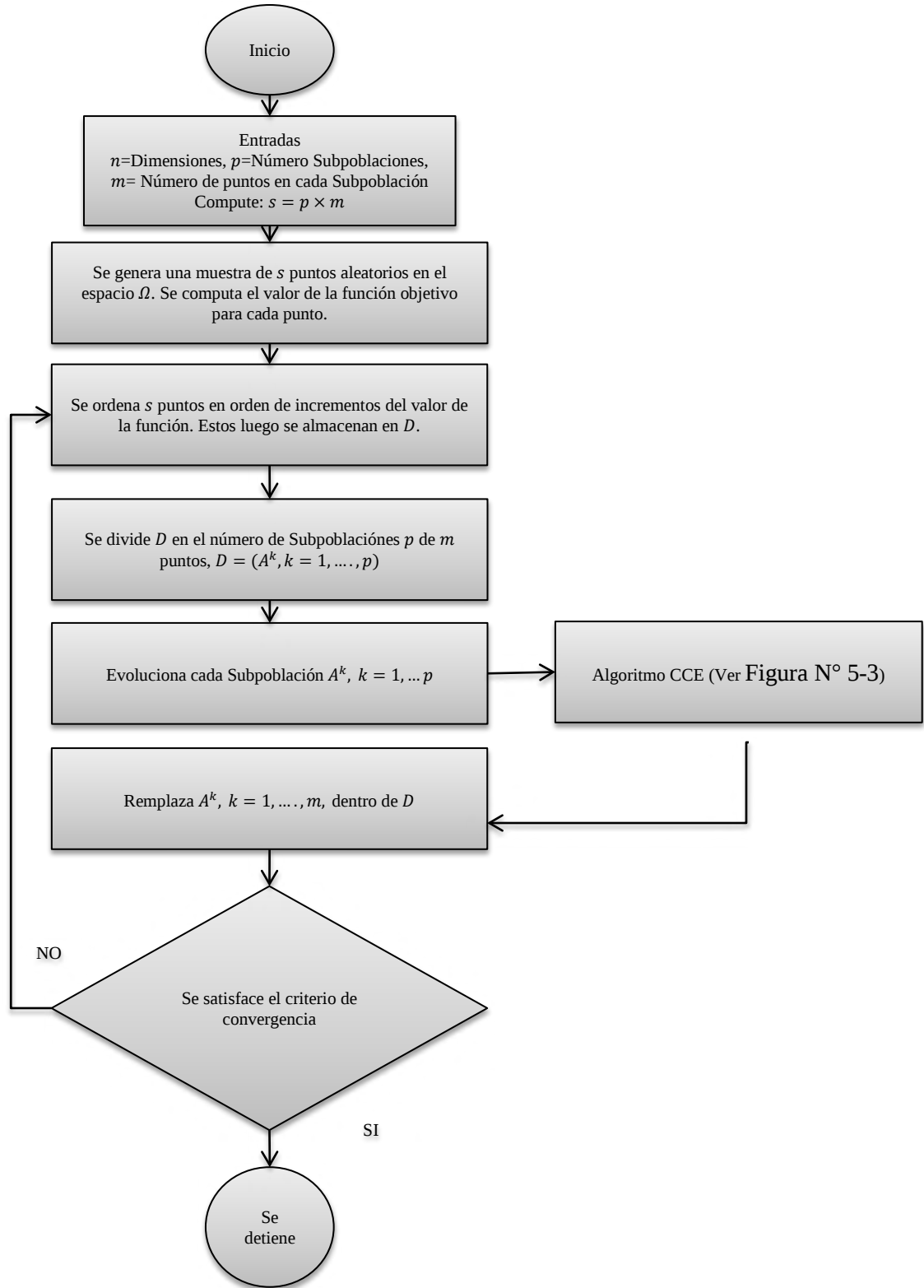


Figura N° 5-2 Diagrama de flujo del método SHUFFLED COMPLEX EVOLUTION (SCE) [130].

- e) Si $f_c < f_q$, se reemplaza u_q por c , y se va al paso (f); sino se genera aleatoriamente un punto z dentro de H y se calcula f_z (paso de mutación). Se reemplaza u_q por z .
- f) Se repite el paso (a) a través de (e) α veces, donde $\alpha \geq 1$ es un parámetro específico del usuario.

Paso 4. Reemplazar padres por descendientes. Se reemplaza B dentro de A^k usando la localización original almacenada en L . Se ordena A^k en orden creciente del valor de la función.

Paso 5. Iteraciones. Se repite el paso uno (1) dentro de cuatro (4) β veces, donde $\beta \geq 1$ es un parámetro especificado por el usuario el cual determina cuantos descendientes pueden ser generados (hasta qué punto cada subpoblación se puede evolucionar).

La filosofía detrás del SCE es tratar la búsqueda global como un proceso natural de evolución. Los puntos de muestreo constituyen una población. La población es fraccionada dentro de varias Subpoblaciones, a cada una de las cuales se les permite evolucionar independientemente. Después de cierto número de generaciones, las subpoblaciones son forzadas a mezclarse, y nuevas subpoblaciones son formadas a través de procesos de mezcla. Esto procedimiento mejora la supervivencia por medio de una intercambio de información ganada independientemente por cada subpoblación.

Cada miembro de una subpoblación es un potencial padre con la habilidad para participar en un proceso de reproducción. Un subgrupo seleccionado de una subpoblación es como un par de padres, excepto que el subgrupo puede consistir de más de dos (2) miembros. Para asegurar que el proceso de evolución es competitivo, se requiere que la probabilidad de contribución del mejor padre en la generación del hijo sea mayor que la de los peores padres. Se usa una distribución de probabilidad triangular asegurando esta competitividad. [131] Aplicaron esta distribución a cada subgrupo al generar la mayoría de

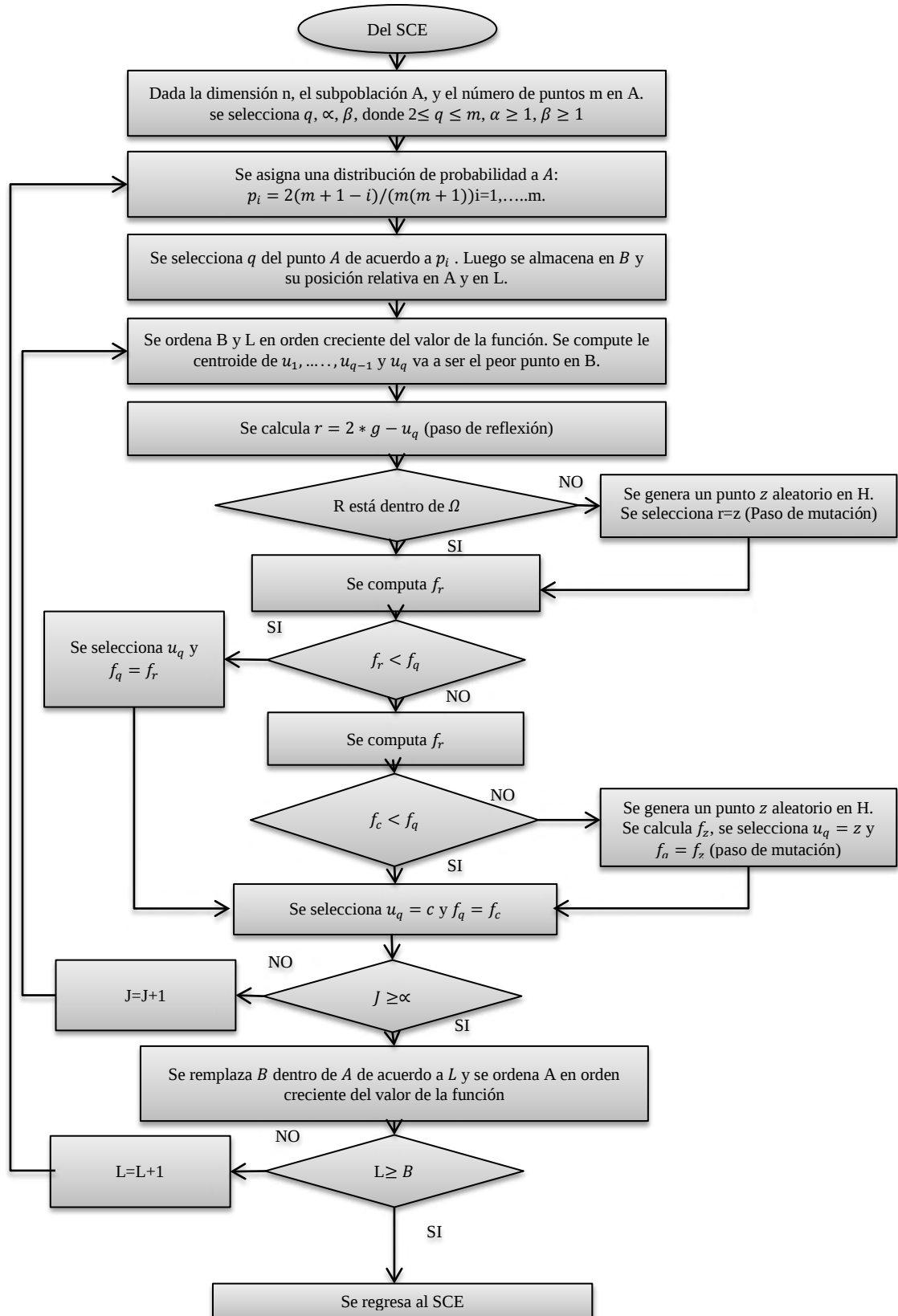


Figura N° 5-3 Algoritmo CCE [130].

las descendencias. Esta estrategia usa la información contenida en el Subgrupo para direccionar la evolución en la dirección apropiada.

El método SCE está diseñado para entregar las mejores características del método CRS, por incorporación del poderoso concepto de evolución competitiva y reordenación compleja. Tanto la evolución competitiva y la reordenación compleja ayudan a asegurar que la información contenida en una muestra es eficaz y bien explotada. Esto nos ayuda a asegurar que el conjunto de información no será degenerada.

En el CSE, el tamaño de una subpoblación m es seleccionado igual a $2n+1$, donde n es la dimensión del problema. El número de descendientes β que pueden ser generados por cada evolución independiente de la subpoblación entre dos mezclas consecutivas es el mismo que el tamaño del Subpoblación $(2n+1)$. El tamaño de cada subgrupo seleccionado para la generación de un descendiente es $n+1$. El valor del parámetro α es seleccionado igual a 1 para que coincida con el procedimiento del CSR. La variable primaria que se selecciona en este método es el número de Subpoblaciones p .

5.4.3 PSO Particle swarm optimization

La idea inicial sobre enjambres de partículas de Kennedy (un sicólogo social) y Eberhart (un ingeniero electrónico) se dirigió esencialmente a la producción de inteligencia computacional por la explotación de analogías simples de interacción social, en lugar de las capacidades puramente cognitivas. La primera simulación [132] fue influenciada por el trabajo de Heppner and Grenander [133] e involucra la analogía con bancos de aves en busca de maíz. El cual pronto se convirtió en el poderoso método de optimización (PSO o Particle Swarm Optimization) [132; 134; 135].

En el PSO, un número de entidades simples (partículas) es colocado en la búsqueda del espacio del problema o función, y cada entidad evalúa la función objetivo en su posición actual. Cada partícula luego determina su movimiento a través del espacio de búsqueda, por combinación de la historia de su actual y mejor localización con uno o más miembros de su colonia, con algunas perturbaciones aleatorias. La siguiente iteración tiene lugar después que todas las partículas se han movido. Eventualmente, la colonia en su conjunto, como una

bandada de pájaros en busca de alimento probablemente que se mueva cerca del óptimo de la función objetivo.

Cada individuo en la colonia de partículas se compone de tres (3) vectores dimensionales, donde D es la dimensión del espacio de búsqueda. Estos son la posición actual $\vec{x}_i$, la posición previa $\vec{p}_i$ y la velocidad $\vec{v}_i$.

La posición actual $\vec{x}_i$ puede ser considerada por un conjunto de coordenadas describiendo un punto en el espacio. Sobre cada iteración del algoritmo, la posición actual es evaluada como una solución del problema. Si la posición es mejor que alguna que ha sido encontrada hasta el momento, las coordenadas son almacenadas en vector $\vec{p}_i$. El valor de la función de mejor resultado hasta el momento es almacenado en la variable que se denomina $pbest_i$, para la comparación de iteraciones posteriores. El objetivo, por supuesto, es encontrar la mejor posición y actualizar $\vec{p}_i$ y $pbest_i$. Nuevos puntos son seleccionados añadiendo $\vec{v}_i$ a las coordenadas $\vec{x}_i$, y el algoritmo funciona mediante el ajuste de $\vec{v}_i$, lo que puede ser visto como un tamaño de paso.

La colonia de partículas es más que solo un conjunto de partículas. Una partícula por sí misma no tiene la capacidad de resolver ningún problema; el progreso ocurre cuando interactúan entre ellas.

La solución del problema es un fenómeno en toda la población, que sale de los comportamientos individuales de las partículas a través de sus interacciones. En cualquier caso, las poblaciones se organizan de acuerdo a algún tipo de estructura de comunicación o tipología, a menudo considerado como una red social.

5.4.3.1 Algoritmo PSO

Paso 1: Inicializar un arreglo de población de partículas con posiciones y velocidades aleatorias en el espacio dimensional de búsqueda D .

Paso 2: Para cada partícula, se evalúa la función de optimización.

Paso 3: Se compara la evaluación de la función objetivo de las partículas con su $pbest_i$, si el valor actual es mejor que él $pbest_i$ a continuación, se establece el $pbest_i$ igual al valor actual, e $\vec{p}_i$ igual a la localización actual $\vec{x}_i$ en el espacio dimensional D .

Paso 4: Se identifican las partículas en la zona con el mayor éxito hasta ahora, y se le asigna el índice de la variable g .

Paso 5: Se cambia la velocidad de la partícula de acuerdo a la siguiente ecuación

$$\begin{cases} \vec{v}_i \leftarrow \vec{v}_i + U(0, \phi_1) \otimes (\vec{p}_i - \vec{x}_i) + \vec{U}(0, \phi_2) \otimes (\vec{p}_g - \vec{x}_i), \\ \vec{x}_i \leftarrow \vec{x}_i + \vec{v}_i \end{cases} \quad \text{E.C. 5-15}$$

Si el criterio se cumple (usualmente un suficientemente buen arreglo o un máximo número de iteraciones), se termina el algoritmo. $\vec{U}(0, \phi_i)$ representa un vector de números aleatorios uniformemente distribuidos en $[0, \phi_i]$, el cual es aleatoriamente generado para cada iteración y para cada partícula.

5.4.3.2 Parámetros

El PSO descrito arriba tiene un pequeño número de parámetros que deben ser fijados. Un parámetro es el tamaño de la población, que este se fija a menudo de forma empírica sobre la base de la dimensionalidad y la dificultad perceptiva del problema. Los valores de partículas de 20 a 50 son bastante comunes.

Los parámetros ϕ_1 y ϕ_2 en (5-16) determinan la magnitud de las fuerzas de azar en la dirección del $\vec{p}_i$ (mejor posición personal) y $\vec{p}_g$ (mejor posición de grupo). Estos son llamados coeficientes de aceleración. El comportamiento del PSO cambia radicalmente con el valor de ϕ_1 y ϕ_2 . Resulta interesante que se puedan interpretar las componentes $\vec{U}(0, \phi_1) \otimes (\vec{p}_i - \vec{x}_i)$ y $\vec{U}(0, \phi_2) \otimes (\vec{p}_g - \vec{x}_i)$ en (5-16) como fuerzas de atracción

producidas por fuentes de rigidez al azar, y que aproximadamente pueden interpretar el movimiento de una partícula como la integración de la segunda ley de Newton.

5.4.3.3 Peso de la inercia

Motivados por el deseo de controlar mejor el alcance de la búsqueda, se reduce la importancia de la velocidad máxima $V_{\max}$ y tal vez eliminarla por completo. La siguiente modificación del PSO actualiza la ecuación y fue propuesta por [136]:

$$\begin{cases} \vec{v}_i \leftarrow \omega \vec{v}_i + U(0, \phi_1) \otimes (\vec{p}_i - \vec{x}_i) + \vec{U}(0, \phi_2) \otimes (\vec{p}_g - \vec{x}_i), \\ \vec{x}_i \leftarrow \vec{x}_i + \vec{v}_i \end{cases} \quad 5-16$$

Donde ω es denominado “peso inercial”. Nótese que si interpretamos $\vec{U}(0, \phi_1) \otimes (\vec{p}_i - \vec{x}_i) + \vec{U}(0, \phi_2) \otimes (\vec{p}_g - \vec{x}_i)$ como fuerzas externas, $\vec{f}_i$, actuando sobre la partícula, se puede cambiar la velocidad de la partícula y puede ser escrita como $\Delta \vec{v}_i = \vec{f}_i - (1 - \omega) \vec{v}_i$. Tal que, la constante $1 - \omega$ actúa efectivamente como un coeficiente de fricción, y así ω puede interpretarse como la fluidez del medio en el cual se mueve la partícula.

5.4.3.4 Topología de la población

Los enjambres de partículas [132] evolucionaron a partir de simulaciones de bandadas de aves del tipo descritas por [137; 133]. En estos modelos, la trayectoria de cada ave que vuela es modificada por la aplicación de varias reglas, incluyendo algunas que toman en cuenta las aves que están cerca del espacio físico. Así, al principio de las PSO la topología se basaba sobre la proximidad en el espacio de búsqueda. Sin embargo, además de ser computacionalmente demandantes, este tipo de estructuras tiene propiedades de convergencia indeseables.

5.4.3.4.1 Topología estática

La siguiente topología introduce el *gbest*, donde la vecina con mejor posición influencia el destino de la partícula. Si bien esto puede ser conceptualizado con un gráfico completamente conectado, en la práctica esto solo significa que el programa necesario para

no perder de vista el mejor resultado de la función se ha encontrado, y el índice de la partícula que lo encuentra.

gbest es un ejemplo de topología estática, ya que uno de los vecinos no cambia durante una ejecución. La topología *lbest* es otra topología estática, la cual fue introducida en [134] es una simple red en forma de anillo al que está conectando cada individuo a dos miembros adyacentes en un arreglo poblacional con ajuste toroidal. Esta topología tiene la ventaja que permite búsqueda en paralelo, con subpoblaciones que podrían converger en diversas regiones del espacio de búsqueda. Cuando puntos óptimos iguales son encontrados, es posible que la población se estabilice con partículas en las regiones buenas, pero si una región es mejor que otras, esto conduciría a atraer partículas hacia sí misma, Así, esta búsqueda en paralelo resulta más exhaustiva, aunque converge más lentamente que la tipología *gbest*. *lbest* es menos vulnerable a la atracción de los óptimos locales.

5.4.3.4.2 Dinámica de las topologías

[138] sugirió que, como la topología *lbest* parece mejor para explorar el espacio de búsqueda, mientras *gbest* converge más rápido, esta puede ser una idea para empezar la búsqueda con *lbest* y poco a poco aumentar el tamaño de la vecindad, hasta que la población esté completamente conectada para el final de la corrida.

[139] utilizaron una distancia euclidiana ponderada en la identificación de parejas para las partículas. Para cada vector de elementos, se encuentra la partícula que tienen el más alto “índice de distancia de actitud” (FDR), por ejemplo, la tasa de la diferencia entre la actitud de la partícula objetivo y la actitud de los vecinos a la distancia entre ellos en el espacio de búsqueda en esa dimensión. Estos algoritmos utilizan ésta y *gbest* para influir en la partícula. La relación de (FDR) asegura que el vecino seleccionado tiene un buen desempeño y disminuye la probabilidad que la partícula interactúe con vecinos en una distante región del espacio de búsqueda.

[140] dispone las partículas en una jerarquía dinámica, en la cual cada partícula está influenciada por su éxito anterior y el de las partículas directamente sobre él. Las partículas con mejor rendimiento se mueven hacia arriba en la jerarquía, el resultado es que estas

tienen más efecto sobre que las peores partículas. El resultado fue un mejor rendimiento en los problemas de referencia considerados.

5.4.4 Análisis de Sensibilidad (Monte Carlo Analysis Tool)

El Monte Carlo Analysis Tool es una colección de funciones de visualización y funciones de Matlab integradas a través de una interfaz gráfica. El paquete puede ser usado para el análisis de resultados de muestreos experimentales o de métodos de optimización que están basados en técnicas de evolución de población, por ejemplo algoritmo genéticos [141]. Un gran número de poderosas técnicas son incluidas en esta herramienta para investigar la estructura, sensibilidad, y la incertidumbre y parámetros de modelos matemáticos. A pesar que esta herramienta ha sido desarrollada dentro del contexto de la investigación hidrológica, todas las funciones pueden ser usadas para la investigación de modelos matemáticos dinámicos.

Muchas de las herramientas disponibles en el MCAT tienen como objetivo ayudar a investigar la identificabilidad de un modelo. Un modelo bien identificado es visto como un modelo con comportamiento de parámetros dentro de una región relativamente pequeña del espacio. La evaluación de la identificabilidad del modelo es importante si el modelo se va a utilizar para las pruebas de hipótesis científica y análisis de incertidumbre.

Una de las posibles causas de problemas en la identificabilidad del modelo. Si los estados internos del modelo no se conocen, hay a menudo múltiples combinaciones de los estados internos que se combinan para producir resultados similares [142].

El núcleo de la herramienta está basado en el concepto de análisis de sensibilidad regional [143; 144] y su extensión a la estimación generalizada de la probabilidad de incertidumbre (GLUE) técnica desarrollada en la Universidad de Lancaster [145; 146]. En GLUE no se define un único parámetro óptimo, más bien un conjunto de comportamientos del modelo son seleccionados en los que cada modelo tiene una cierta probabilidad de ser la correcta representación del sistema.

La metodología de GLUE introduce el concepto de probabilidad en un concepto más amplio que la estadística tradicional. La probabilidad es una medida de rendimiento que puede ser usada para diferenciar que tan probable es que el modelo sea representativo del

sistema. La probabilidad debe incrementarse de manera monotonía, desde cero hasta uno. El MCAT transforma objetos en probabilidades de acuerdo al siguiente pseudo código

$$\begin{aligned} LHOOD &= 1 - OBJ \\ IF MIN(LHOOD) < 0 THEN LHOOD &= LHOOD - MIN(LHOOD) \\ LHOOD &= LHOOD / SUM(LHOOD) \end{aligned}$$

Donde *OBJ* es el valor de la función objetivo y *LHOOD* es el valor de probabilidad resultante.

El principal problema práctico en la aplicación de la metodología GLUE viene con la elección subjetiva de la función de probabilidad y la evaluación de un umbral de riesgo entre los modelos de comportamiento. La flexibilidad del método de muestreo de Monte Carlo permite ajustar el procedimiento de estimación de la incertidumbre a través de la selección de la función objetivo. El funcionamiento del método de incertidumbre puede, y debe, ser probado por la verificación de datos independientes, de manera similar a la validación y calibración del modelo.

6 Metodología

A continuación se presenta la metodología propuesta para realizar la optimización de modelación de procesos de flujo en formaciones geológicamente fracturadas, mediante la aproximación de redes de fracturas discretas.

6.1 Definición de las DFN

La definición de las DFN (redes de fracturas discretas) fue un proceso que conlleva una gran cantidad de pasos, que van desde el mapeo de campo hasta la implementación numérica de las mismas. Sin embargo, esta etapa fue abarcada dentro del proyecto el Berrocal [102], por lo que se dispone de dicha información. Se cuenta con cien generaciones de fracturas que representan todo el espacio volumétrico del macizo rocoso, estas fueron construidas con base en las *pdf* (funciones de densidad de probabilidad) que se obtuvieron de la respectiva prospección geológica ejecutada en la zona de estudio. Se cuenta con el código TRANSIN el cual se detalla en la sección 5.4.1.1 del presente documento, el cual permite simular los procesos de flujo en este tipo de formaciones.

6.1.1 Datos de entrada del TRANSIN

TRANSIN hace uso de 6 archivos de entrada que se encuentran en formato plano (dado que fue desarrollado en lenguaje de programación FORTRAN) y serán descritos a continuación.

El primero de ellos es el archivo de entrada DIM que contiene todos los parámetros dimensionales y condiciones de contorno de la red, en éste se define el tipo de régimen, número de elemento, número de familias, número de tiempo de observación, criterios de convergencia, entre otros (Figura N° 6-1). Si el lector desea una descripción detallada de

cada parámetro puede remitirse a [102], ya que esto no hace parte del presente trabajo de investigación.

```

0      1      0
1      -1     1      1      0      0      0      0      0      1      0      0
451    345    2      1      110    4      10    72      1      10    0      0
6      6      0      4      1      0      0      0      0      0      0      0
1      1      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0
10     0      1      0      1      0      0      0      0      0      0      0
10     0      1      0      0      0      0      0      0      0      0      0
0.000E+00      2      5      0.100E-01      0.400E+00      0.100E-08      0.100E-09      0.100E-10      0.500E-05
1      1.000000      0.900000      0.000010      30      15
0.1000E+010.1000E+010.0000E+000.0000E+000.0000E+000.0000E+000.0000E+00
0.0000E+000.0000E+000.0000E+000.0000E+000.0000E+000.0000E+000.0000E+00
8
1000.      100.0      10.00      1.000      0.1000      0.1000E-010.1000E-020.1000E-03
-1

```

Figura N° 6-1 Datos de entrada del archivo DIM en TRANSIN para la DFN 21.

En el archivo GRI se encuentra toda la caracterización geométrica de las fracturas, definiendo la localización espacial de los nodos en el sistema cartesiano (Figura N° 6-4). La ubicación de estos nodos sirve como base para la construcción de los elementos que representan el sistema de tuberías (Ver Figura N° 6-5 y Figura N° 6-6). Aquí se define el número del elemento, el nodo final y el nodo inicial del mismo y la zonificación a la que pertenece (familia).

El archivo INI contiene las condiciones iniciales para la ecuación de flujo (Ver Figura N° 6-2). Se definen los niveles piezométricos iniciales en los nodos.

```

NIVELES PIEZOMETRICOS INICIALES EN LOS NUDOS
1      0.
345    0.

```

Figura N° 6-2 Condiciones iniciales para la ecuación de flujo.

En el archivo OBS se especifica el abatimiento del nivel freático para los tiempos de observación dados, en nuestro caso se trata de las pruebas de bombeo realizadas en el sitio y que son descritas en la sección 5.1, de ahí se obtienen las curvas de abatimiento recuperación tanto para el pozo de bombeo como para los tres pozos de observación. El tiempo se encuentra en horas y descenso del nivel en metros (Ver Figura N° 6-3).

En el archivo PAR (Ver Figura N° 6-7) se detalla el coeficiente de transmisividad y almacenamiento para cada elemento, el cual fue extraído en el proceso de generación de las *pdf*, en este mismo archivo se definen los parámetros de familia, los cuales van a ser

calibrados para lograr representar los datos de la prueba de abatimiento-recarga que se introducen en el archivo OBS.

El archivo TIM contiene información concerniente a los tiempos de discretización y la función de tiempo. Este archivo consta de tres (3) grupos que son: (i) tiempo de observación, (ii) función de tiempo y (iii) peso temporal de los parámetros.

Con estos seis archivos se definen todas las características geométricas e hidráulicas de la formación Batolítica objeto del presente estudio.

INTERVALO --->	42	TIEMPO --->	0.8125000
1 -29.53992 0.00000		S-2.1	
2 -0.59265 0.00000		S-13.1	
3 -2.65179 0.00000		S-13.2	
4 -0.74215 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	43	TIEMPO --->	0.8958333
1 -29.51404 0.00000		S-2.1	
2 -0.64624 0.00000		S-13.1	
3 -2.65497 0.00000		S-13.2	
4 -0.74551 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	44	TIEMPO --->	0.9791667
1 -29.53168 0.00000		S-2.1	
2 -0.72601 0.00000		S-13.1	
3 -2.69177 0.00000		S-13.2	
4 -0.74888 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	45	TIEMPO --->	1.312500
1 -29.50085 0.00000		S-2.1	
2 -0.87236 0.00000		S-13.1	
3 -2.77002 0.00000		S-13.2	
4 -0.87390 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	46	TIEMPO --->	1.645833
1 -29.48450 0.00000		S-2.1	
2 -0.99598 0.00000		S-13.1	
3 -2.81635 0.00000		S-13.2	
4 -0.94265 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	47	TIEMPO --->	1.979167
1 -29.48279 0.00000		S-2.1	
2 -1.10150 0.00000		S-13.1	
3 -2.86188 0.00000		S-13.2	
4 -0.94336 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	48	TIEMPO --->	2.312500
1 -29.46637 0.00000		S-2.1	
2 -1.14294 0.00000		S-13.1	
3 -2.87457 0.00000		S-13.2	
4 -1.01636 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	49	TIEMPO --->	2.645833
1 -29.47925 0.00000		S-2.1	
2 -1.20859 0.00000		S-13.1	
3 -2.88727 0.00000		S-13.2	
4 -1.05321 0.00000		S-15.2	
INTERVALO --->	50	TIEMPO --->	2.979167
1 -29.44831 0.00000		S-2.1	
2 -1.27110 0.00000		S-13.1	
3 -2.90002 0.00000		S-13.2	
4 -1.02839 0.00000		S-15.2	

Figura N° 6-3 Abatimiento piezométrico de los pozos.

0	0	0	0	0	0	0	0	0.
1	412.988	537.606	369.292	0.000				
2	383.336	560.604	405.153	0.000				
3	401.555	564.077	391.234	0.000				
4	436.726	579.253	368.271	0.000				
5	372.179	531.282	426.938	0.000				
6	407.289	565.601	411.095	0.000				
7	296.149	571.510	291.317	0.000				
8	346.167	512.910	221.393	0.000				
9	349.339	514.944	215.226	0.000				
10	342.578	533.094	222.252	0.000				
11	350.774	520.572	338.141	0.000				
12	348.590	511.380	365.958	0.000				
13	345.583	531.420	333.648	0.000				
14	328.508	549.040	370.370	0.000				
15	349.432	540.609	339.660	0.000				
16	339.617	537.765	222.380	0.000				
17	325.482	535.759	201.131	0.000				
18	316.228	556.850	207.374	0.000				
19	306.713	563.369	200.148	0.000				
20	339.329	572.835	253.533	0.000				
21	320.264	530.086	207.195	0.000				
22	328.884	562.715	206.026	0.000				
23	279.751	591.410	205.827	0.000				
24	307.980	608.431	287.988	0.000				
25	259.049	521.615	423.592	0.000				
26	245.289	518.039	438.616	0.000				
27	250.183	540.146	424.180	0.000				
28	239.132	522.738	426.754	0.000				
29	218.689	532.036	434.512	0.000				
30	299.430	518.095	367.594	0.000				
31	307.974	519.972	351.056	0.000				
32	292.500	538.808	355.406	0.000				
33	314.060	533.537	342.532	0.000				
34	305.359	548.936	353.383	0.000				
35	400.468	521.924	331.846	0.000				
36	407.326	529.826	319.757	0.000				
37	392.871	523.311	339.842	0.000				
38	400.634	538.044	299.072	0.000				
39	398.815	529.542	349.012	0.000				
40	224.375	543.251	413.614	0.000				

Figura N° 6-4 Características geométricas de los elementos (número del nodo y coordenadas x,y,z)

1	1	2	1	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	2	5	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	1	2	1	3	3	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	1	2	6	3	4	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	1	2	1	4	5	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	1	2	7	4	6	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	1	2	8	9	7	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	1	2	10	9	8	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	1	2	11	12	10	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	1	2	14	12	11	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	1	2	11	13	12	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	1	2	15	13	13	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	1	2	10	16	14	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	1	2	7	16	15	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	1	2	10	17	16	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	1	2	21	17	17	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	1	2	10	18	18	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	1	2	22	18	19	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	1	2	10	19	20	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	1	2	23	19	21	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	1	2	10	20	22	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
22	1	2	24	20	23	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	1	2	25	26	24	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	1	2	28	26	25	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	1	2	25	27	26	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
26	1	2	29	27	27	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27	1	2	30	31	28	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
28	1	2	33	31	29	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
29	1	2	30	32	30	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30	1	2	34	32	31	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
31	1	2	35	36	32	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
32	1	2	38	36	33	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
33	1	2	35	37	34	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
34	1	2	39	37	35	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
35	1	2	28	40	36	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
36	1	2	43	40	37	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
37	1	2	28	41	38	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
38	1	2	29	41	39	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
39	1	2	28	42	40	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
40	1	2	44	42	41	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
					42	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Figura N° 6-5 Características geométricas de los elementos

Figura N° 6-6 Zonificación de los elementos

436	2.880	161.4		
437	4.067	85.55		
438	4.247	74.24		
439	8.246	175.1		
440	7.302	76.16		
441	7.471	297.6		
442	6.364	100.3		
443	6.105	77.45		
444	6.885	60.91		
445	10.88	112.8		
446	6.556	67.18		
447	4.192	46.76		
448	6.977	59.31		
449	4.241	58.53		
450	2.996	91.55		
451	3.384	91.94		

1	1	0.9712	1	3.000	1.000
2	1	0.1465	1	3.000	1.000
3	1	0.3667	1	3.000	1.000
4	1	0.9979	1	3.000	1.000
5	1	0.0748	1	3.000	1.000
6		1100.00	0	0.000	0.000
18.891E-009			1	3.000	0.430E-08
25.943E-008			1	3.000	0.430E-08
39.578E-007			1	3.000	0.430E-08
41.988E-007			1	3.000	0.430E-08
51.047E-011			1	3.000	0.430E-08
60.4300E-05			0	0.000	0.000E+00
1	1.000		0	0.000	0 0.000
2	1.000		0	0.000	0 0.000
3	1.000		0	0.000	0 0.000
4	1.000		0	0.000	0 0.000
1	1.000		0	0.000	1 0.000

Figura N° 6-7 Coeficientes de transmisividad y almacenamiento para cada elemento.

6.2 Datos de Salida

El TRANSIN presenta cuatro (4) archivos de salida, que son: RES, PLT, MSH, MHH. De estos sólo se hace necesaria la atención a los dos (2) primeros, en los cuales se encuentra el valor de los parámetros calibrados por el algoritmo de Marquardt si es el caso, y el abatimiento del nivel freático simulado por el modelo para todos los pozos. Los datos que entrega el archivo PLT son los que se utilizan como un estimativo de buen ajuste, ya que deben coincidir con las pruebas hechas en campo, y si es el caso se podrá inferir que los parámetros obtenidos son los que gobiernan los patrones de flujo para la generación dada. Este punto es de vital cuidado ya se puede incurrir en varios errores, entre ellos, que el valor óptimo sea un mínimo local.

Cuando se utiliza como método de calibración el algoritmo de Marquardt, en el archivo RES se presenta el proceso de convergencia iterativo, y los valores óptimos de los parámetros hidráulicos.

6.3 Definición de la función objetivo

Como criterio de buen ajuste se empleó el coeficiente de correlación de Nash, que es el cociente entre la varianza de los residuos y los datos. Dado que estas formaciones se consideran prácticamente impermeables es de esperarse que el abatimiento en los pozos de observación sea muy bajo comparado con el pozo de bombeo, lo que resulto un inconveniente a la hora de definir un buen criterio de ajuste.

Hubo la necesidad de dar el mismo peso a todos los datos, lo cual se logró a través de la normalización de los mismos, evitando que los algoritmos de calibración solo ajustaran el abatimiento en el pozo de bombeo, dado que éste presenta el mayor descenso, y si se desea reducir el error al mínimo se deben minimizar las mayores distancias entre datos medidos y observados. Lo anterior tiene como consecuencia que el ajuste en los pozos de observación fuese pobre. Con la normalización se forzó a que los algoritmos dieran la misma importancia a los cuatro pozos, y se obtuviera un buen criterio de ajuste en todos ellos.

Cabe resaltar que este tipo de ajustes presentan múltiples mínimos, lo cual quiere decir que una gran cantidad de combinaciones de parámetros pueden representar de forma adecuada el medio. Sin embargo, no todos son válidos, muchos se pueden descartar de manera inmediata porque carecen de sentido físico o simplemente son pequeñas variaciones del mínimo global que se obtuvo.

6.4 Implementación de los algoritmos de calibración

Como objeto de ejemplo del presente estudio se utilizará la DFN 21 para ilustrar el procedimiento que se siguió a lo largo del documento, ésta se eligió por ser una red con pequeño ancho de banda por lo que los procesos numéricos tienen un menor tiempo de computo.

La adecuada elección del algoritmo de calibración resulta fundamental, dado que los procesos numéricos son bastante demandantes y no se desea incurrir en gastos computacionales innecesarios. Cuatro (4) metodologías de calibración fueron implementadas, pero una de ellas se utilizó para realizar el respectivo análisis de sensibilidad paramétrico que es uno de los objetivos planteados en este trabajo.

El ideal del proceso descrito anteriormente, es lograr que la diferencia entre los datos medidos en las pruebas de campo y el modelo numérico sea la mínima posible, partiendo del supuesto que nunca a va a ser igual a cero por todos los errores numéricos y simplificaciones que se realizan durante la concepción del modelo. Sin embargo, se espera que la mayoría de la pruebas puedan lograr ajustes satisfactorios.

El acople del método de diferencias finitas que resuelve la ecuación diferencial de flujo dentro del TRANSIN (algoritmo desarrollado en FORTRAN) fue implementado dentro de los algoritmos de calibración, requiriendo un código que vinculara las entradas y salidas desde y hacia los métodos de optimización que se encontraban desarrollados en el entorno de Matlab.

Los procesos numéricos dentro de estos entornos con un alto nivel de complejidad resultan poco eficientes computacionalmente, presentan una gran desventaja debido a que muchas veces los tiempos de cómputo resultan demasiado altos y lo que se desea lograr es una relación óptima entre gasto computacional y ajuste logrado.

A continuación se muestra en detalle la implementación numérica de los métodos de calibración empleados, resaltando sus bondades y desventajas,

6.4.1 Algoritmo de Marquardt

Esta metodología de calibración viene incorporada dentro del TRANSIN y es bastante eficiente en tiempos de cómputo. Sin embargo, en un alto porcentaje de la redes no se presentan buenas bondades de ajuste, comparado con las otras metodologías.

Dado que la convergencia es bastante rápida se procedió a evaluar si la discretización en familias realmente resultaba representativa y conducía a un mejor ajuste. Esto se evaluó con la variación de las zonas a las que pertenecen las fracturas en el archivo de entrada GRI. Se hicieron cuatro aproximaciones y se compararon los resultados a fin de concluir si la zonificación resulta adecuada, o si la integración de todo el medio dentro de una sola zona sería suficiente y podría converger de manera apropiada, representando de manera adecuada las pruebas de campo.

Tres variaciones de zonificación fueron propuestas y para cada una de ellas se estimaron los parámetros hidrodinámicos representativos para las cien generaciones y con ellos se calculó un valor medio que hace referencia al valor de zona. En la primera variación se homogeneizó todo el medio, es decir, solo se estimó un parámetro de Transmisividad T y almacenamiento S . En la segunda se regionalizó la Transmisividad pero se definió un único almacenamiento, en el tercer caso, se optó por definir un único valor de transmisividad y variar el almacenamiento. Por último, se evaluó el caso original en el cual ambos parámetros se encuentran zonificados en las cinco familias geológicas presentes.

Lo anterior permite definir si el valor medio de los parámetros de flujo en los cuatro casos varía de manera significativa y con ello evaluar si la discretización en familias tiene algún beneficio.

Se observa para el caso de ejemplo, como la zonificación trae consigo mejoras en la estimación del modelo numérico. A medida que se discretiza, la respuesta del modelo converge a la representación de las pruebas de campo. Esto quiere decir que la suposición inicial, a mayor discretización mejor aproximación del modelo numérico, resulta cierta (Ver Figura N° 6-8).

A pesar de la subdivisión en familias, el ajuste logrado no satisface lo que se espera de una buena metodología de calibración, claro está, sin llegar a subestimar las ventajas que este presenta sobre los otros métodos. El ideal es lograr una representación clara del sistema, donde las pruebas de campo y los datos simulados coincidan de manera adecuada.

El TRANSIN resulta excelente para una primera aproximación, en casos donde se dispone de poco tiempo o poder de cómputo, ya que en alrededor de tres (3) simulaciones con diez (10) iteraciones en cada una, se puede obtener un valor que representa de manera cercana el sistema físico.

En Tabla N° 6-1 se observan las propiedades estadísticas de las diferentes familias para los 4 escenarios de simulación propuestos, entre los que se destacan los valores medios y las desviaciones estándar de los ajustes de distribuciones obtenidas para las cien (100) generaciones.

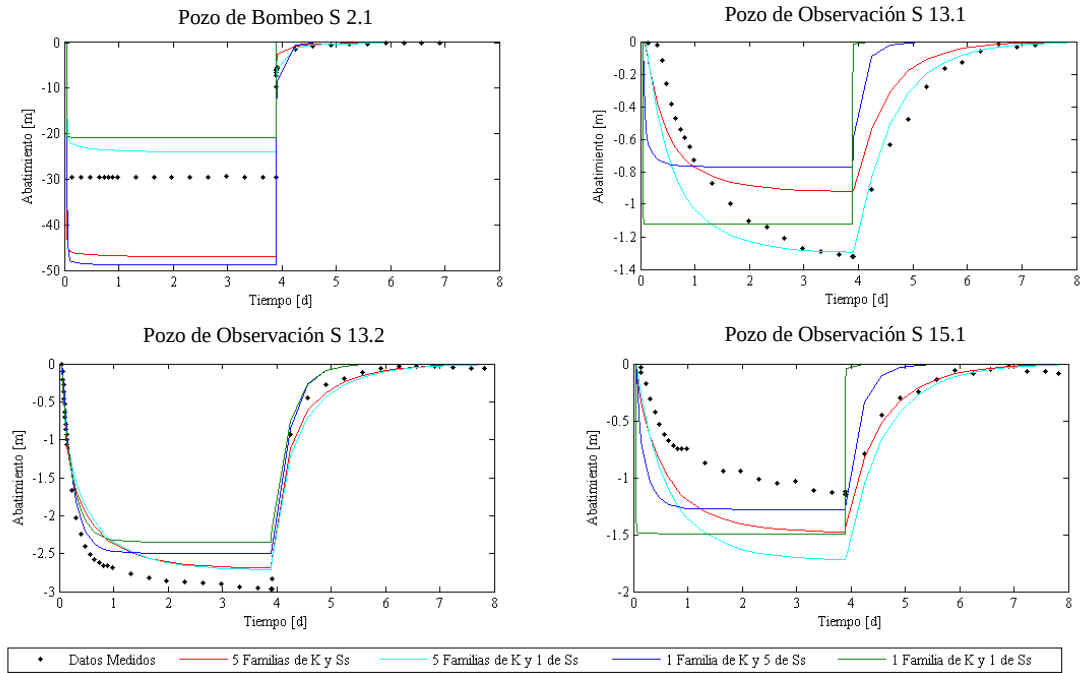


Figura N° 6-8 Respuesta del sistema a la discretización en familias.

Pocas variaciones se presentan en los valores medios de transmisividad y almacenamiento, sin embargo estas ocasionan grandes perturbaciones en la respuesta del modelo, lo que es un indicador de alto grado de sensibilidad numérica del sistema.

Los ajustes de distribución de probabilidad de las familias para las transmisividades y almacenamientos fue de tipo Log-Normal y coincide con la utilizada para la generación de las DFN (Ver Figura N° 6-9 a la Figura N° 6-18). En el caso de las transmisividades se observa un claro ajuste en los valores obtenidos, las densidades de probabilidad están alrededor del 40% observándose una media claramente identificable, al igual que para los almacenamientos.

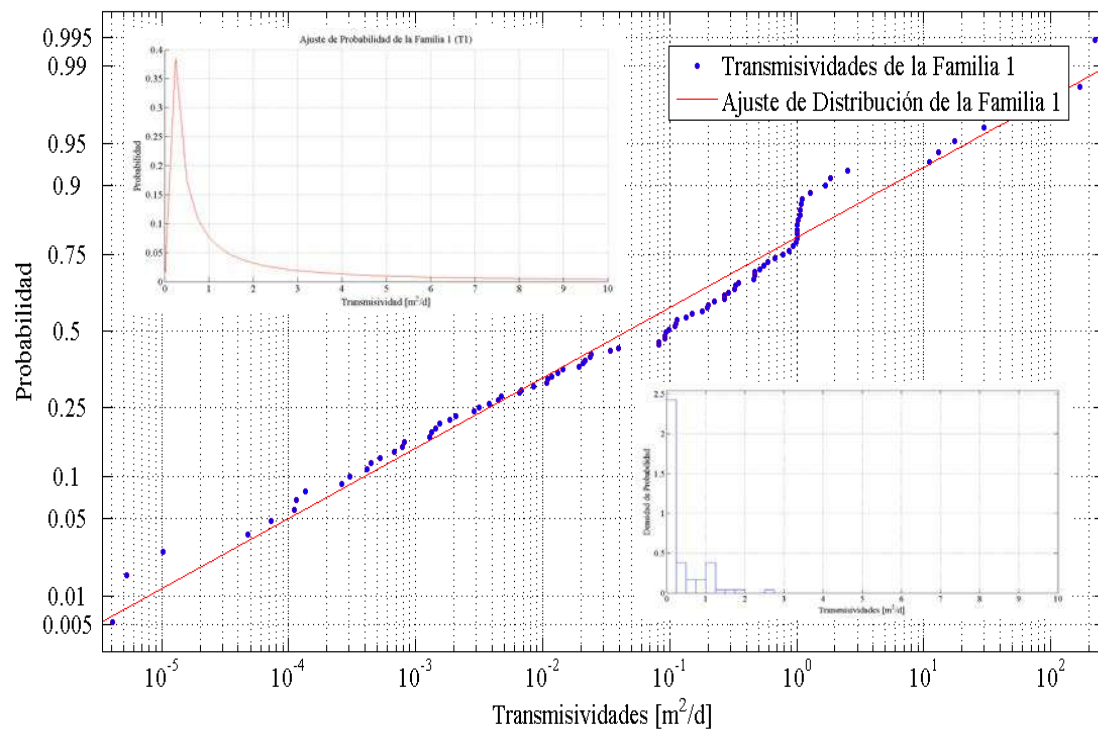


Figura N° 6-9 Ajuste de transmisividad de la familia 1.

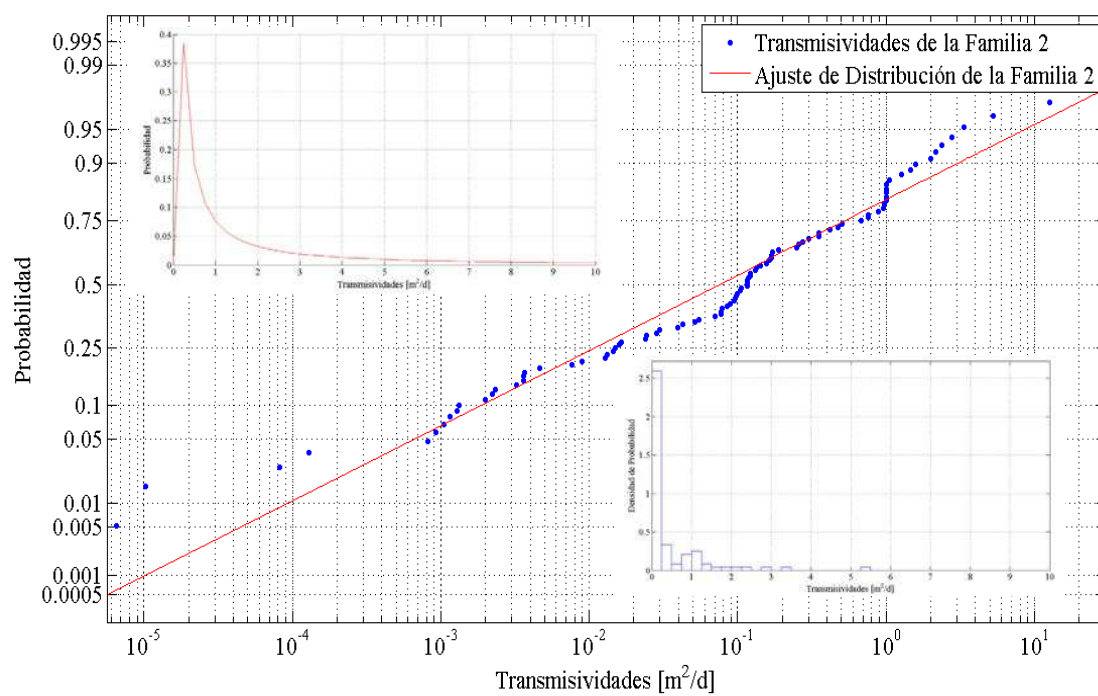


Figura N° 6-10 Ajuste de transmisividad de la familia 2.

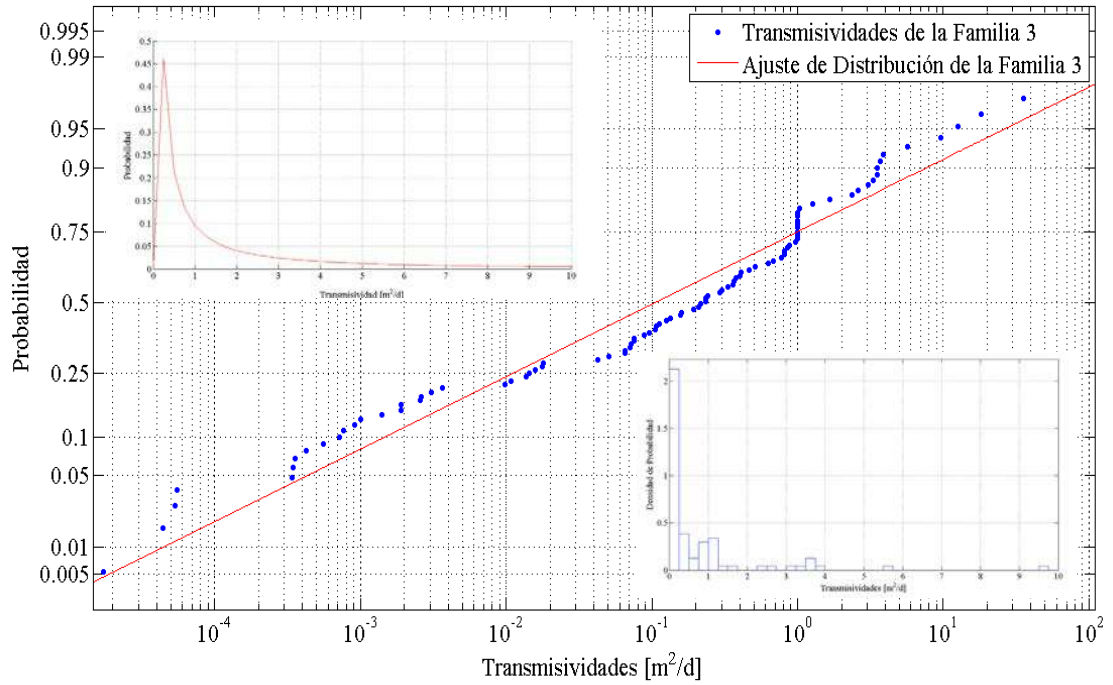


Figura N° 6-11 Ajuste de transmisividad de la familia 3.

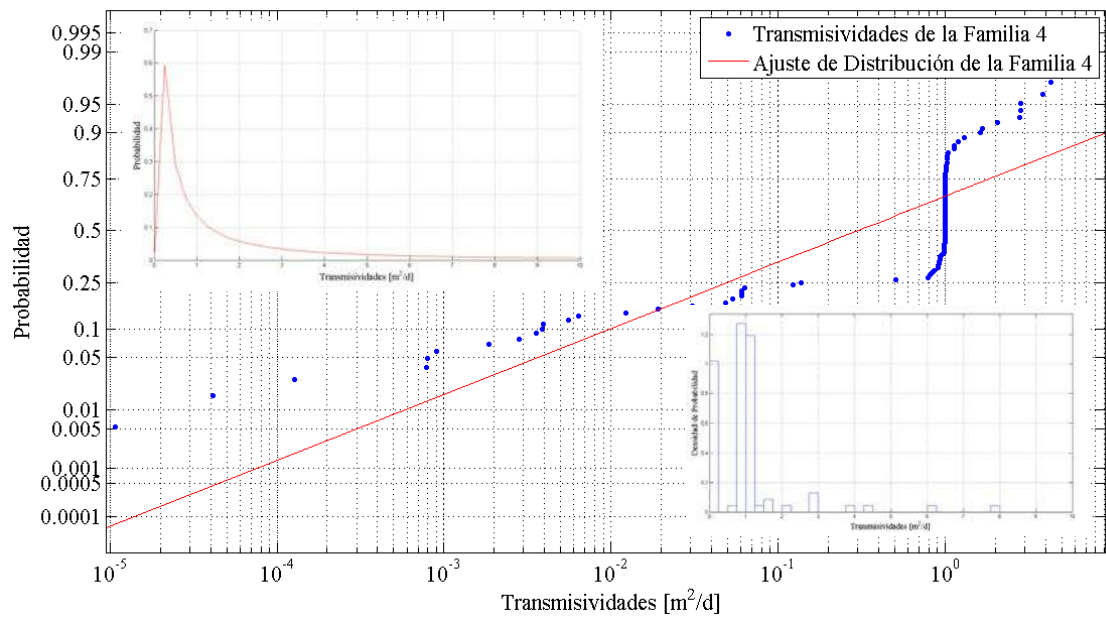


Figura N° 6-12 Ajuste de transmisividad de la familia 4.

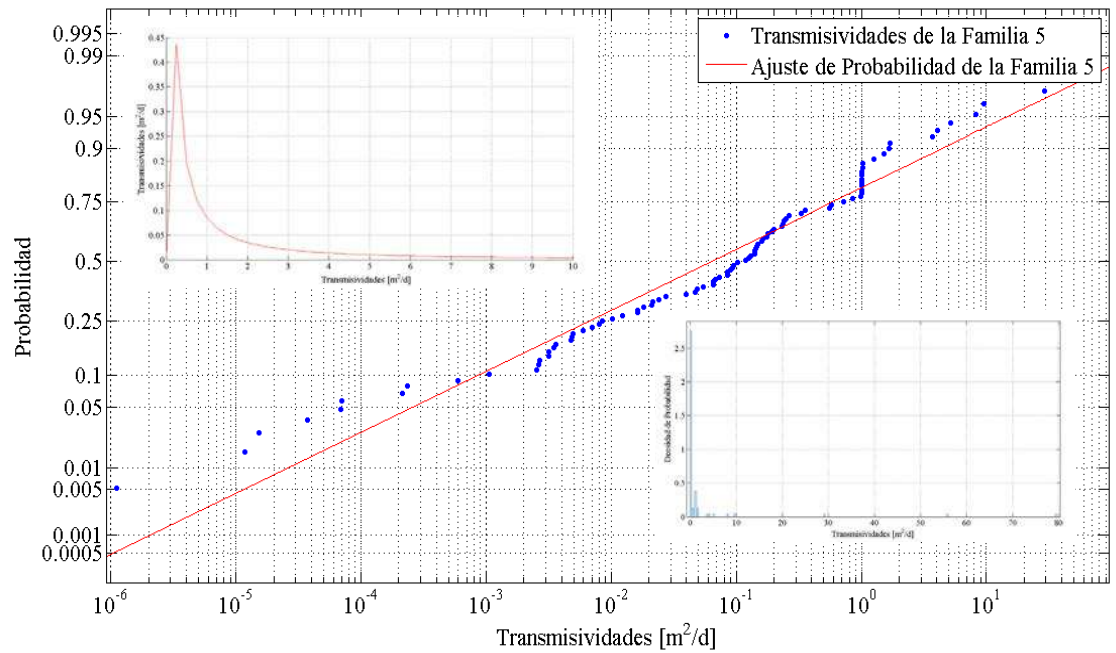


Figura N° 6-13 Ajuste de transmisividad de la familia 5.

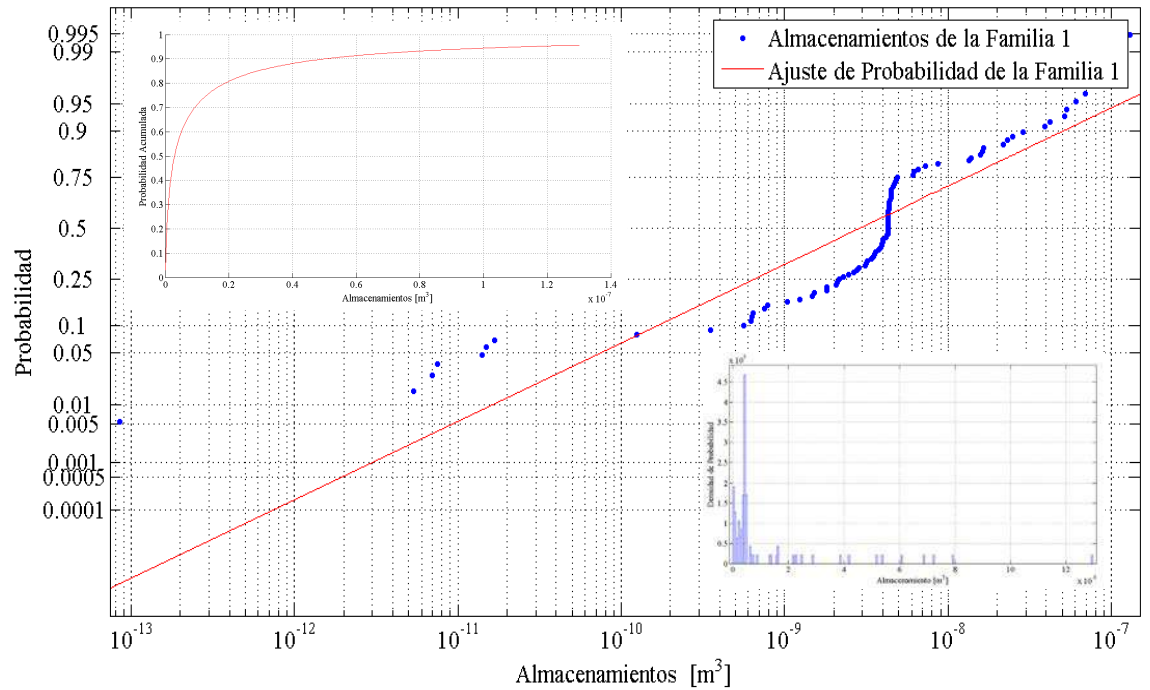


Figura N° 6-14 Ajuste de almacenamiento de la familia 1.

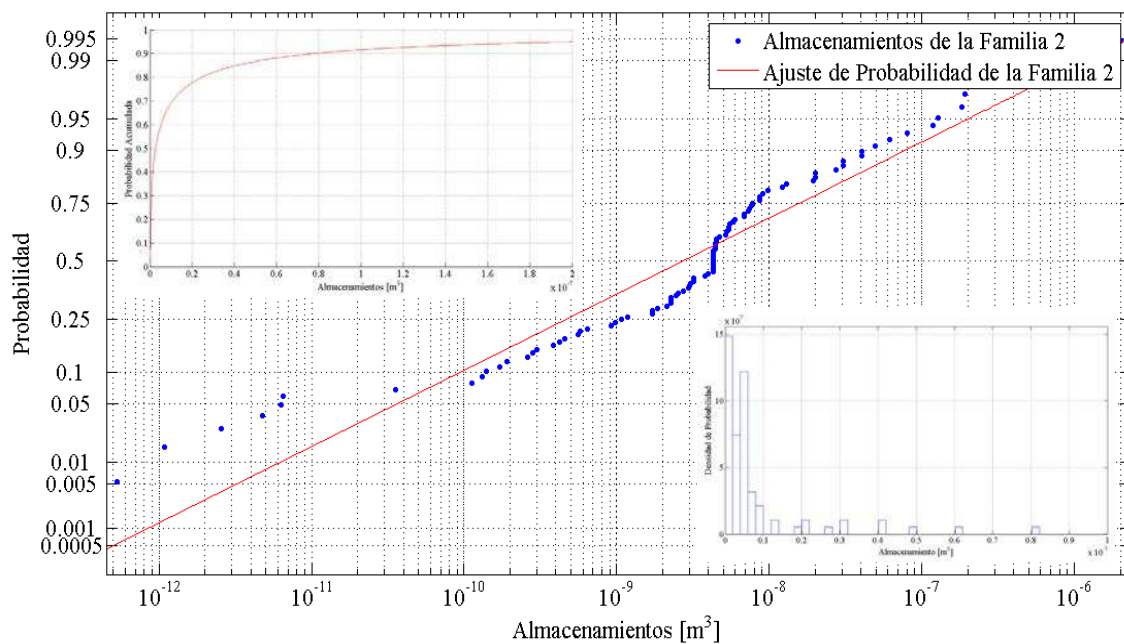


Figura N° 6-15 Ajuste de almacenamiento de la familia 2.

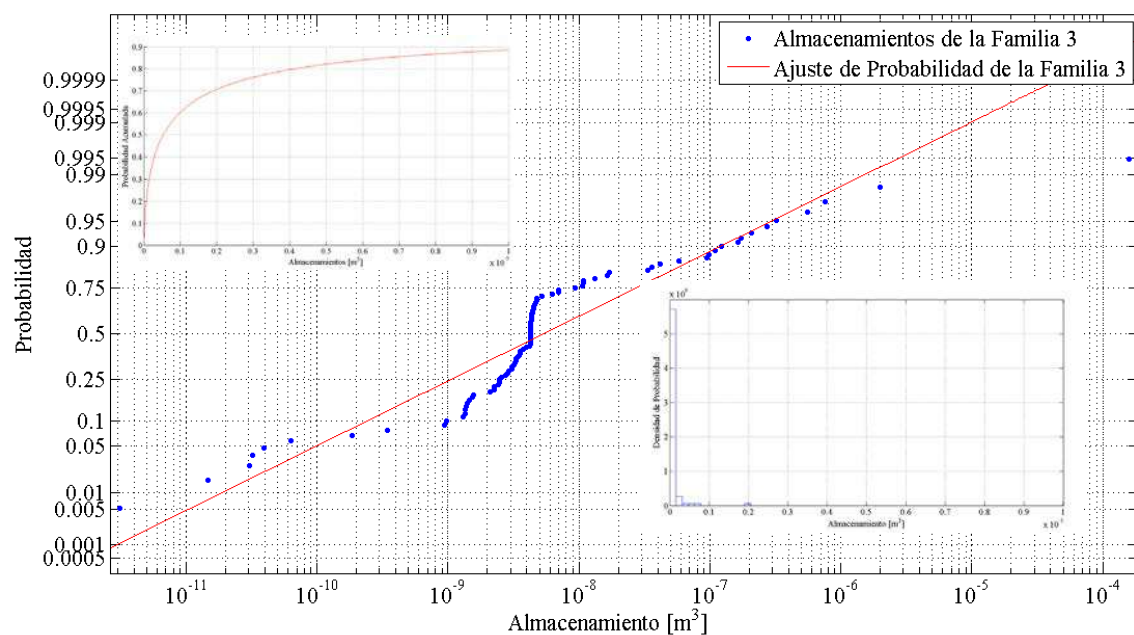


Figura N° 6-16 Ajuste de almacenamiento de la familia 3.

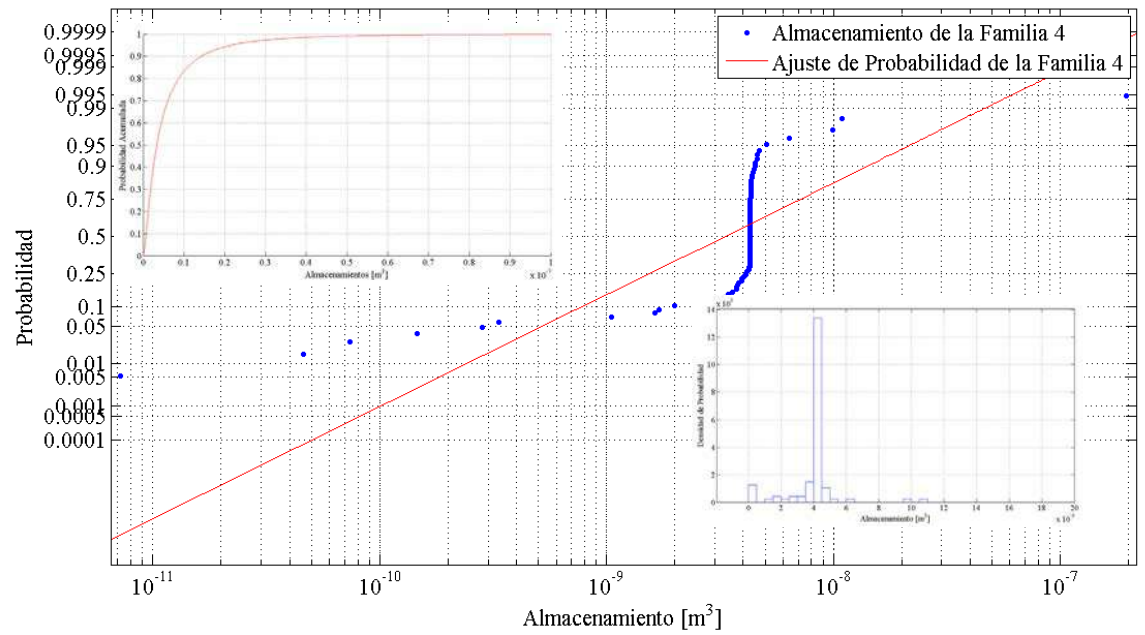


Figura N° 6-17 Ajuste de almacenamiento de la familia 4.

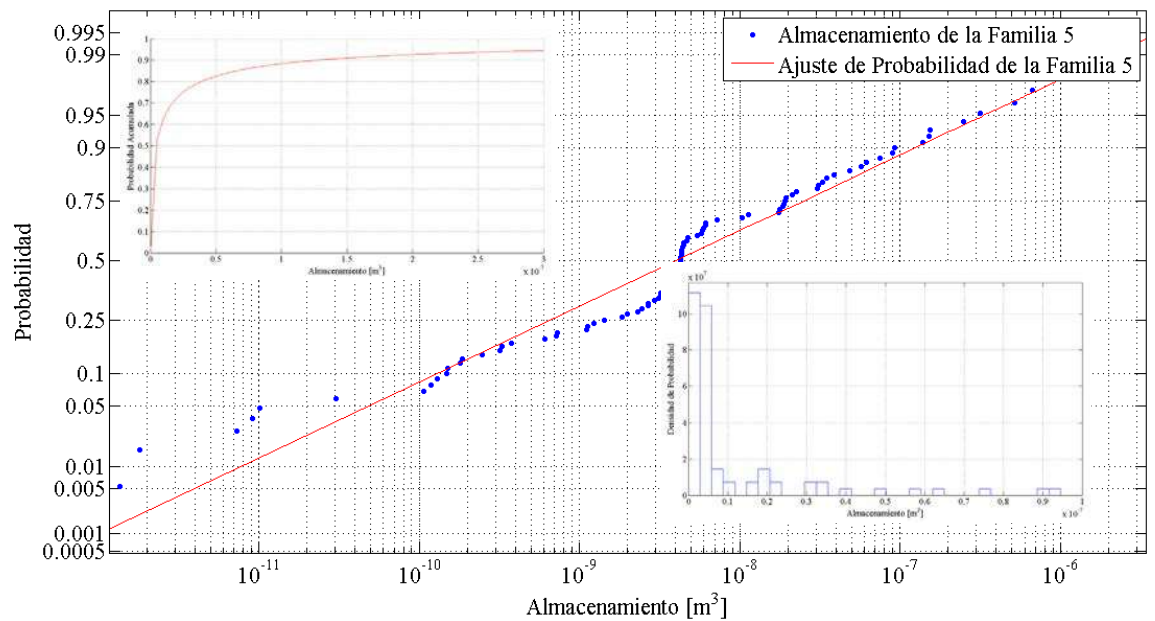


Figura N° 6-18 Ajuste de almacenamiento de la familia 5.

Los parámetros considerados como representativos tras el proceso de calibración en algunas familias no se ven claramente identificables como es el caso de la familia 4, en donde las distribuciones de probabilidad no se ajustan de manera adecuada, poniendo en duda la veracidad de la información obtenida y por ello se plantea la utilización de técnicas de búsqueda más robustas.

Tabla N° 6-1 Estadísticos de los ajustes de probabilidad para los diferentes parámetros hidrodinámicos de flujo.

Media						
	Parámetro					
	T1	T2	T3	T4	T5	
	5 Familias de T y S	0.0465	0.0745	0.1062	0.2991	0.062
	5 Familias de T y 1 de S	0.0504	0.0691	0.0821	0.3039	0.0678
	1 Familia de T y 5 de S	0.168				
	1 Familia de T y 1 de S	0.2104				
	Parámetro					
	S1	S2	S3	S4	S5	
	5 Familias de T y S	0.2885*10(-8)	0.2725*10(-8)	0.5327*10(-8)	0.3351*10(-8)	0.4048*10(-8)
	5 Familias de T y 1 de S	4.1233*10(-9)				
	1 Familia de T y 5 de S	0.3378*10(-8)	0.3852*10(-8)	0.6275*10(-8)	0.3408*10(-8)	0.4251*10(-8)
	1 Familia de T y 1 de S	4.476*10(-9)				
Desviación Estándar						
	Parámetro					
	T1	T2	T3	T4	T5	
	5 Familias de T y S	42.1414	17.9174	28.3977	14.5845	28.134
	5 Familias de T y 1 de S	47.5809	20.759	40.0621	16.2049	30.4706
	1 Familia de T y 5 de S	6.6995				
	1 Familia de T y 1 de S	5.9301				
	Parámetro					
	S1	S2	S3	S4	S5	
	5 Familias de T y S	9.264	13.6065	11.3834	3.0952	14.6919
	5 Familias de T y 1 de S	16.563				
	1 Familia de T y 5 de S	6.9222	13.0504	8.3985	4.553	9.8446
	1 Familia de T y 1 de S	13.4202				

6.4.2 SCE-UA (shuffled complex evolution)

En la sección 5.4.2 se encuentra una descripción detallada del fundamento teórico del método. La implementación de este algoritmo requirió un elevado nivel de trabajo, para realizar un acople entre el TRANSIN y SCE-UA. Esto se realizó de forma individual para las cien generaciones ya que cada una de ellas posee sus propias características geométricas particulares.

El TRANSIN se encarga de simular el flujo en la red de fracturas, mientras que el SCE-UA permite la calibración automática. Como resultado del ensamble se obtiene un algoritmo robusto capaz de realizar ajustes satisfactorios en tiempos computacionales aceptables. El SCE-UA permite definir los espacios de búsqueda paramétrica y los criterios de convergencia, los cuales son similares a los de la metodología de Marquardt (sección 5.4.1). El criterio de ajuste se fundamenta en comparar los datos simulados con los medidos, entre menor sea el error, mejor se considera el ajuste.

Se modificó el archivo de entrada GRI de tal forma que los algoritmos de calibración sean capaces de actualizar los parámetros de familias a medida que la convergencia se realiza, modificación que resulta ideal cuando se trata de metodologías de búsqueda globales.

A continuación se detalla en forma de diagrama de flujo la interfaz que se implementó para el acople de los códigos, (Figura N° 6-19 , Figura N° 6-20, y Figura N° 6-21). Las figuras presentadas permiten ver el elevado gasto computacional, ya que la función objetivo debe ser evaluada una gran cantidad de veces, y cada vez que esto se hace, se debe resolver la ecuación diferencial de flujo discretizada, lo cual ocasiona que se tengan que manejar gran cantidad de ciclos computacionales, que conllevan a que los procesos numéricos sean lentos. La optimización de estos procesos se propone como tema de otra investigación.

A pesar que la convergencia numérica es lenta en algunas redes, esta metodología fue la que arrojó mejores resultados obteniendo ajustes similares a técnicas que requieren un tiempo computacional mucho mayor. A diferencia de la metodología PSO existen procesos evolutivos donde los mejores padres son los que transfieren una mayor cantidad de información a sus descendientes y esto conduce a que la convergencia sea más rápida y con cada nueva generación la información se va depurando.

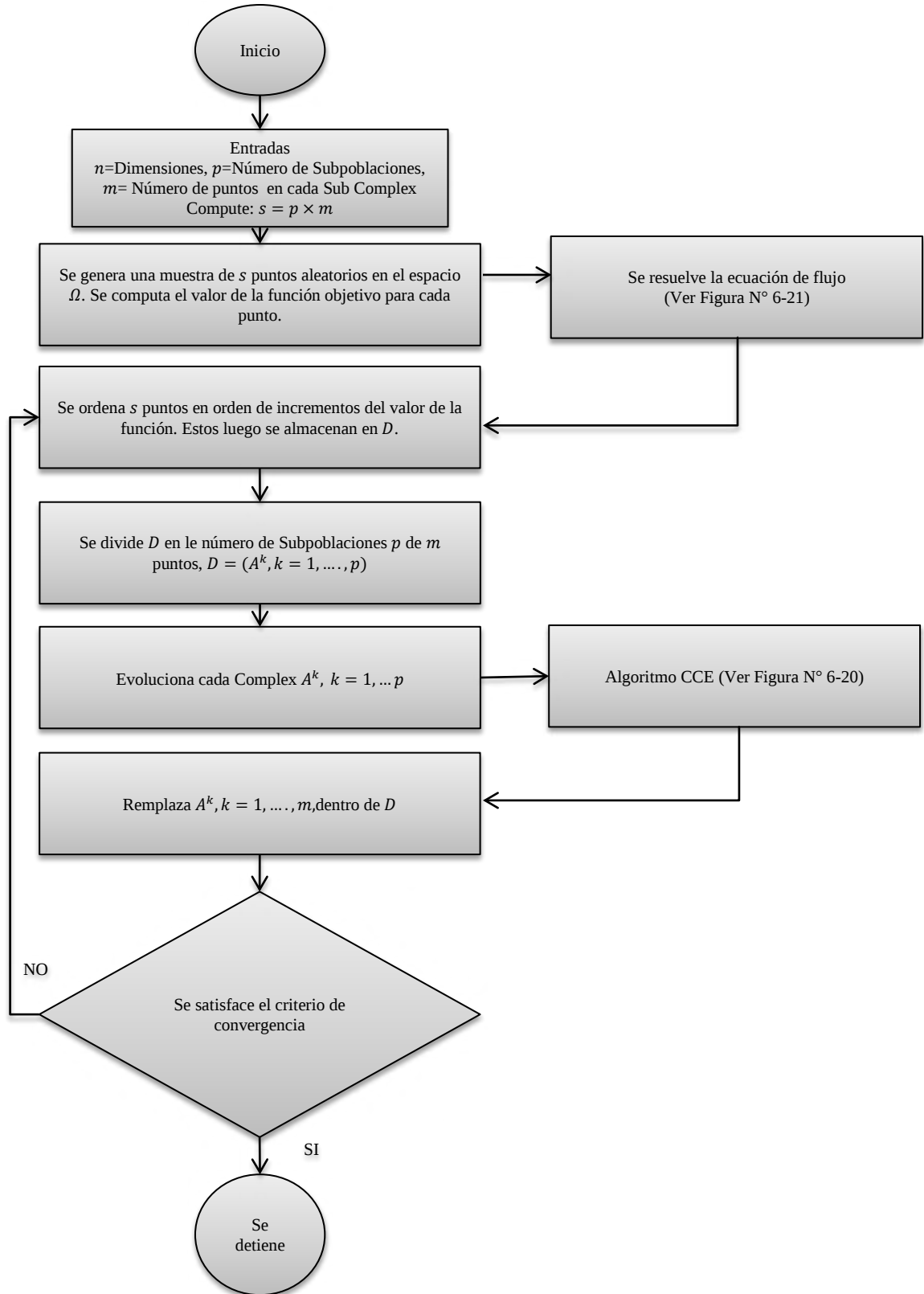


Figura N° 6-19 Algoritmo SCE

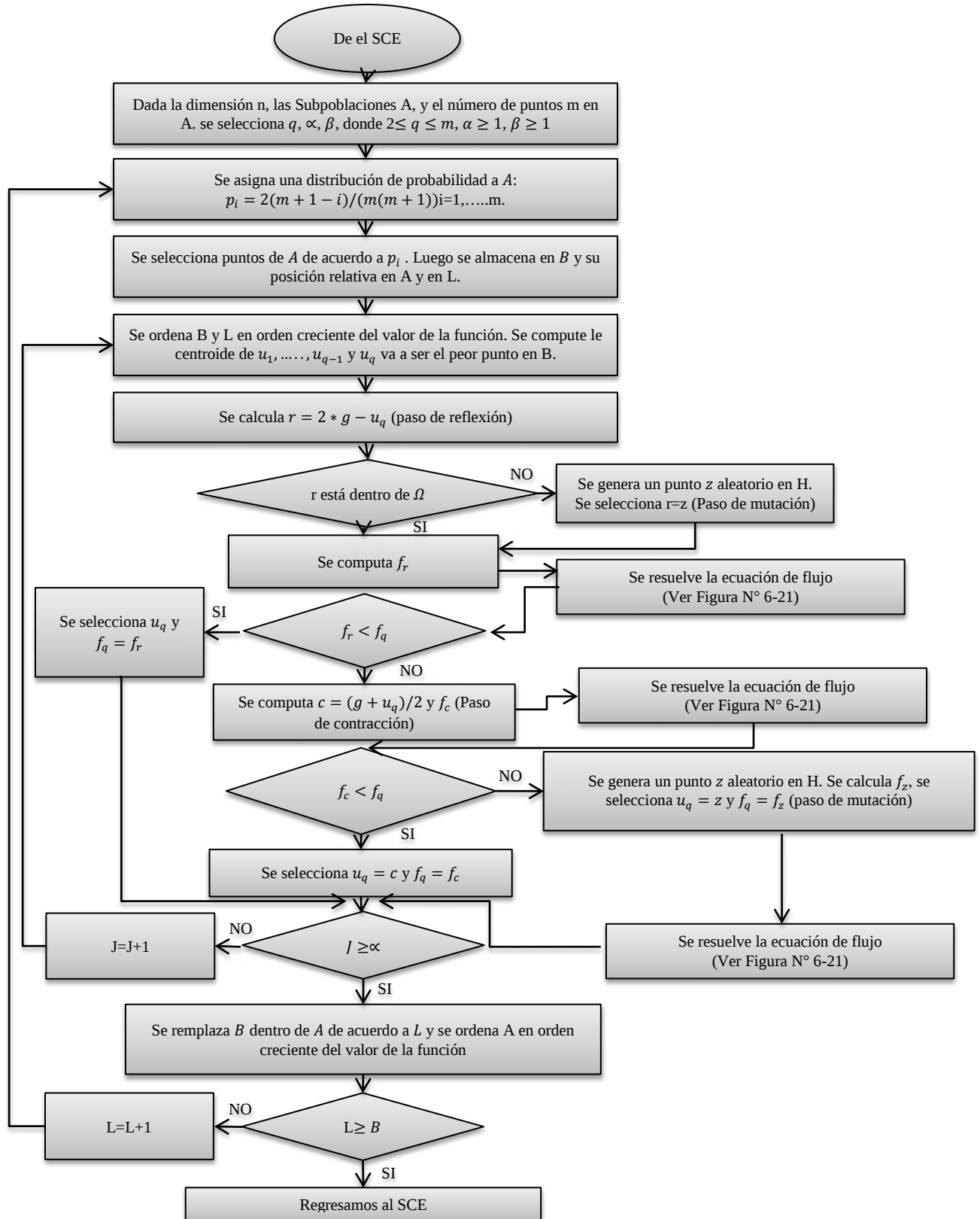


Figura N° 6-20 Algoritmo CCE

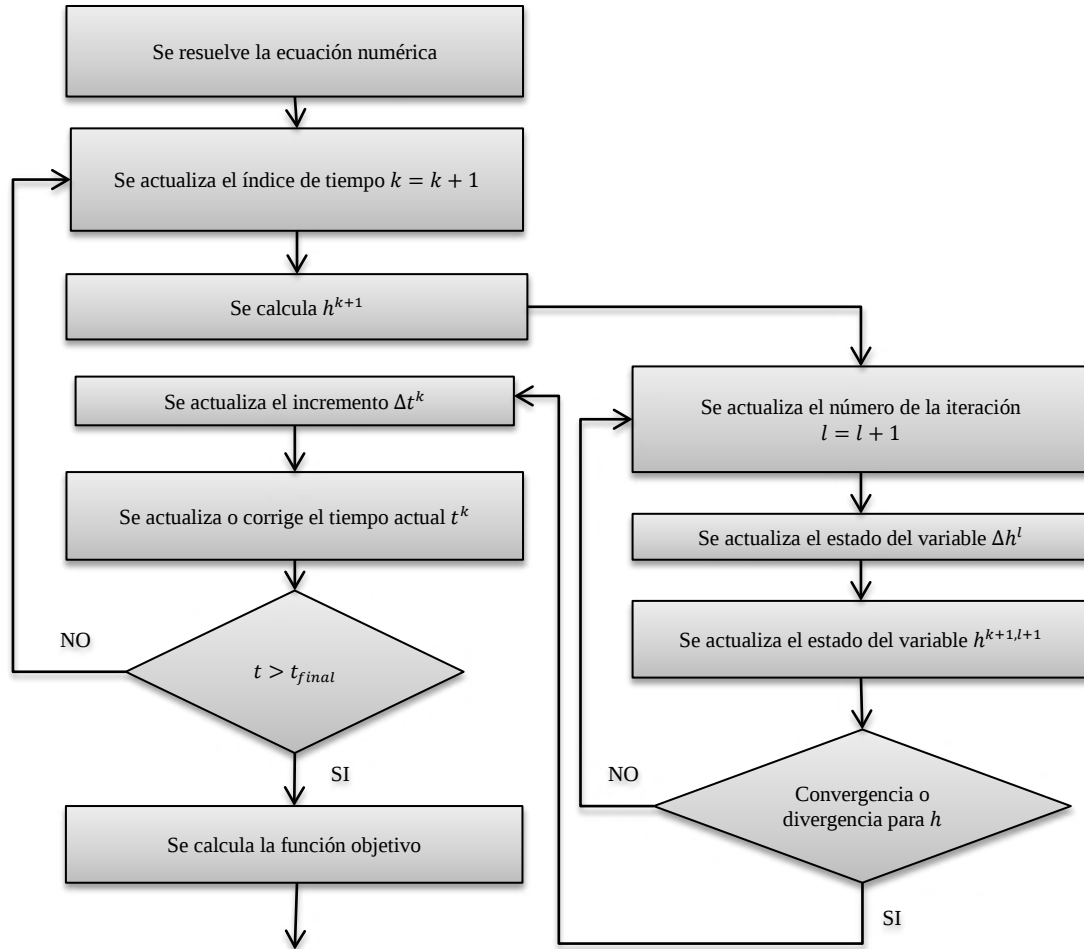


Figura N° 6-21 Ecuación de flujo resuelta por diferencias finitas

El SCE-UA es de lejos la mejor metodología de calibración con tiempos de cálculo manejables y ajustes más que satisfactorios con coeficientes cercanos a uno (1). Las metodologías de búsqueda global resultan la mejor elección para este tipo de problemas dada la gran correlación paramétrica y la existente multiplicidad de mínimos locales a lo largo del espacio paramétrico. Dicha metodología resulto idónea para abordar este tipo de problemas arrojando resultados similares a las metodologías basadas en dinámica comportamental como el PSO, las cuales son algoritmos de búsqueda mucho más demandantes en gasto computacional.

Se observa la tendencia evolutiva del algoritmo hacia el óptimo en el espacio de búsqueda paramétrica. Solo en el caso de la transmisividad de la familia dos (2) y el

almacenamiento de la familia cinco (5) se aprecia una tendencia clara hacia el mínimo, en el resto de los casos esta no se hace evidente (Ver Figura N° 6-22).

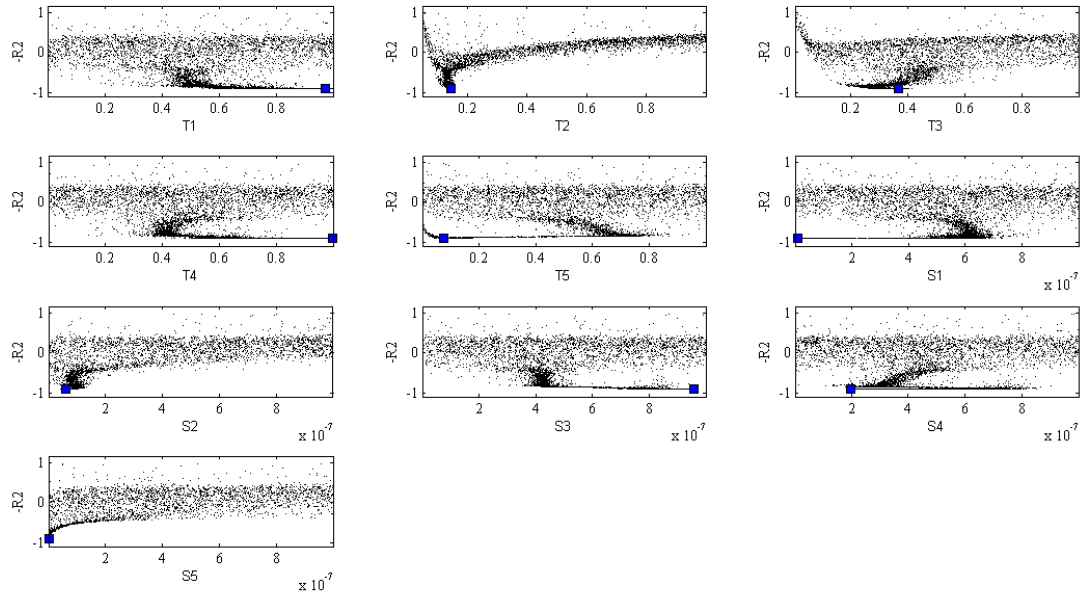


Figura N° 6-22 Tendencia evolutiva del SCE-UA hacia el valor óptimo.

La elevada correlación paramétrica en estas formaciones no permite la identificación de valores óptimos únicos, en vez de eso, se observan multiplicidad de los mismos. Sin embargo, existen algunas directrices que permiten identificar cuáles son las zonas en el espacio paramétrico con mejores ajustes. En la Figura N° 6-23 se puede apreciar claramente dicha directriz, se observa como la transmisividad de la familia dos es el parámetro gobernante.

Con la ayuda de la metodología GLUE (Ver Figura N° 6-24) se puede identificar el intervalo de confianza del modelo, en el que se descartaron el 5% superior e inferior del mismo. Esto quiere decir que con un 90% de probabilidad se puede caer en el límite de confianza. Los datos de campo del pozo de observación S 13.2 caen por fuera del límite establecido, lo que significa que el modelo no representa de forma adecuada este punto.

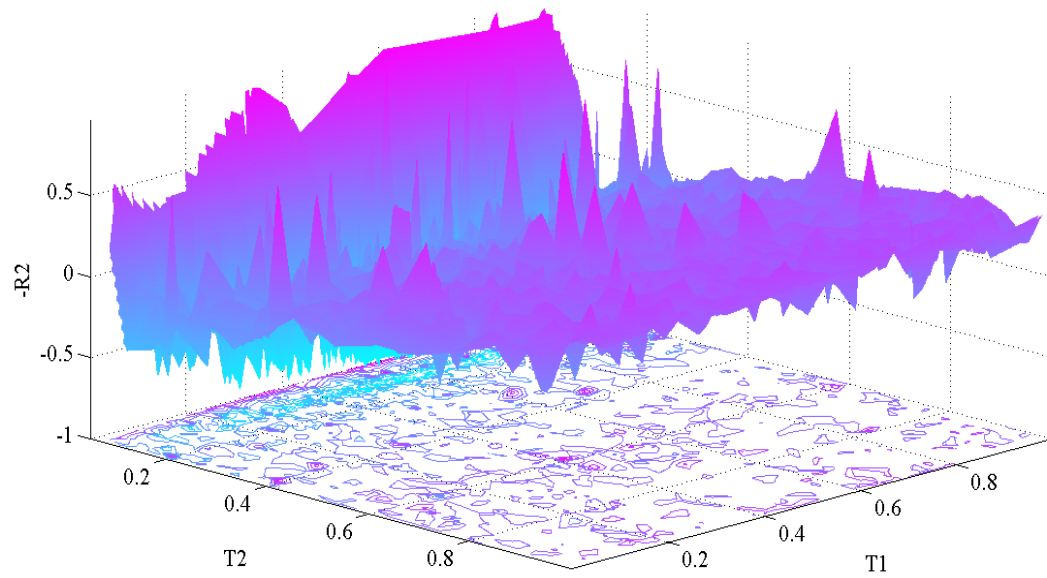


Figura N° 6-23 Correlación paramétrica en el espacio de búsqueda (SCE-UA)

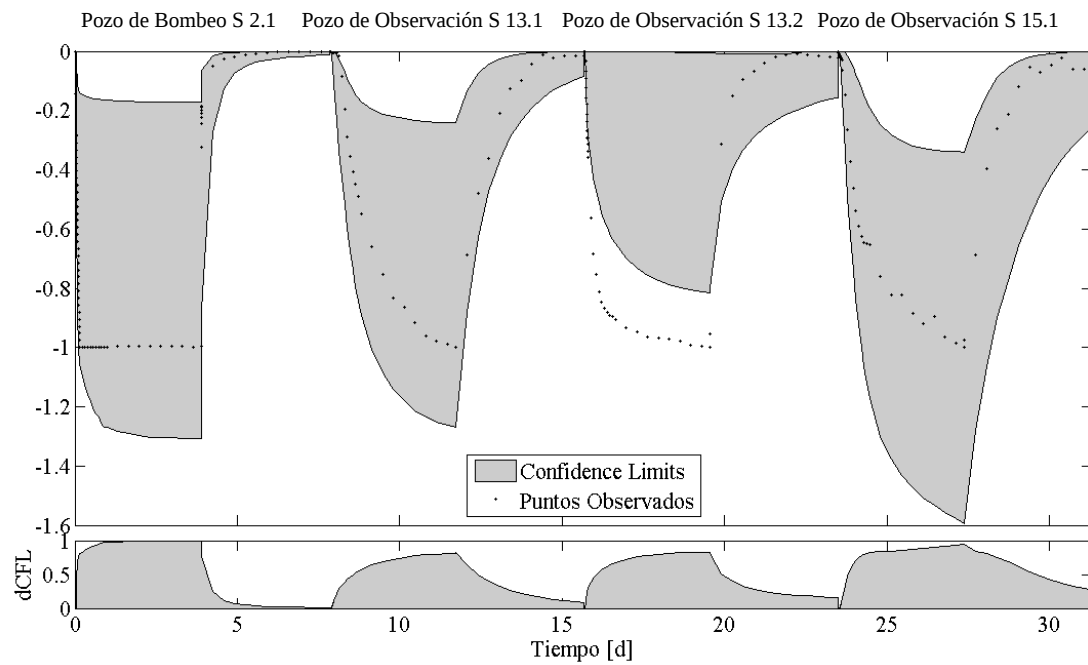


Figura N° 6-24 Salidas del modelo SCE-UA asociadas a un límite de confianza

6.4.2.1 Análisis estadístico

El análisis estadístico permite la identificación de los parámetros representativos del sistema, a diferencia de los que se obtuvieron con el TRANSIN, se espera que los valores alcanzados con la utilización del SCE-UA sean mejores. Se desea lograr una clara identificación de una distribución de probabilidad, que en nuestro caso es una Log-Normal.

Los parámetros que se obtengan de dichas distribuciones serán los que representarán de la mejor forma el sistema físico modelado. Sin embargo, estos valores no serán los efectivos del mismo, debido a la cercanía de los pozos y la gran extensión del medio físico. Para ello se hará un proceso de escalado con el objetivo de extrapolar los parámetros indicados que se calibraron para esta pequeña región a todo el medio, y con ello obtener un conjunto de valores efectivos.

A continuación se presentan los ajustes de distribución para los parámetros de transmisividad y almacenamiento para las cinco familias geológicas

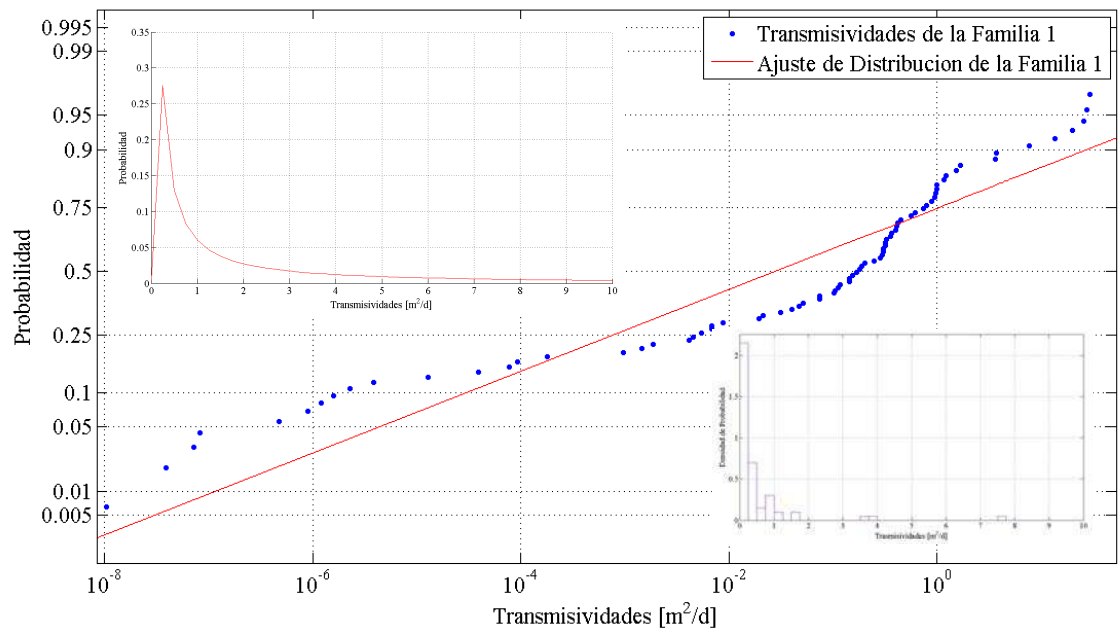


Figura N° 6-25 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 1 con el SCE-UA.

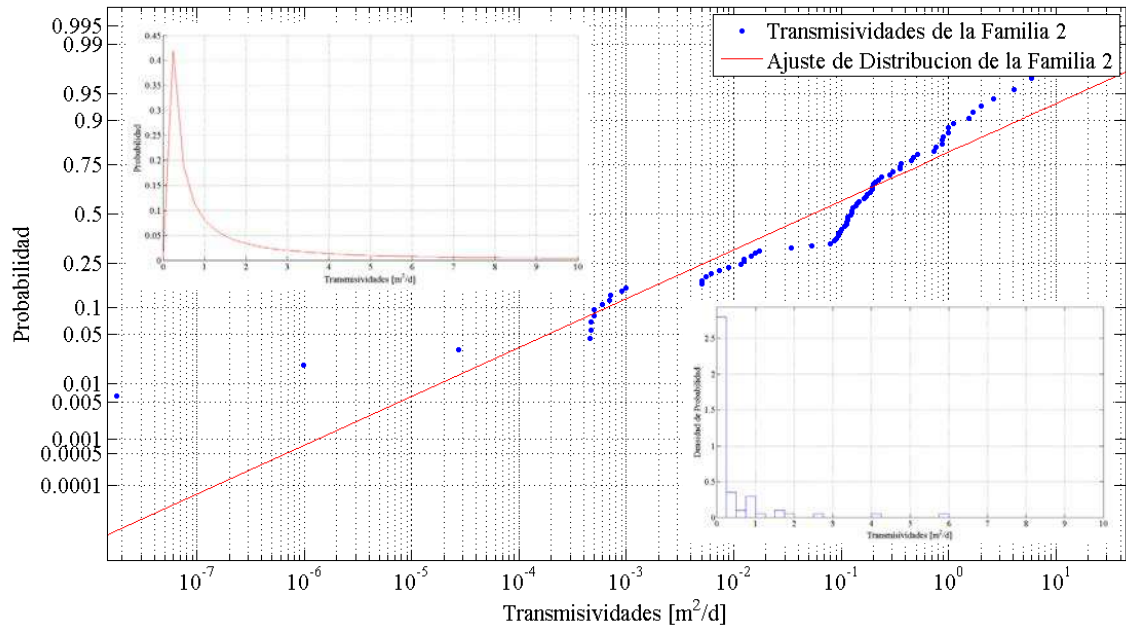


Figura N° 6-26 Ajuste de Probabilidad para la transmisividad de la familia 2 con el SCE-UA.

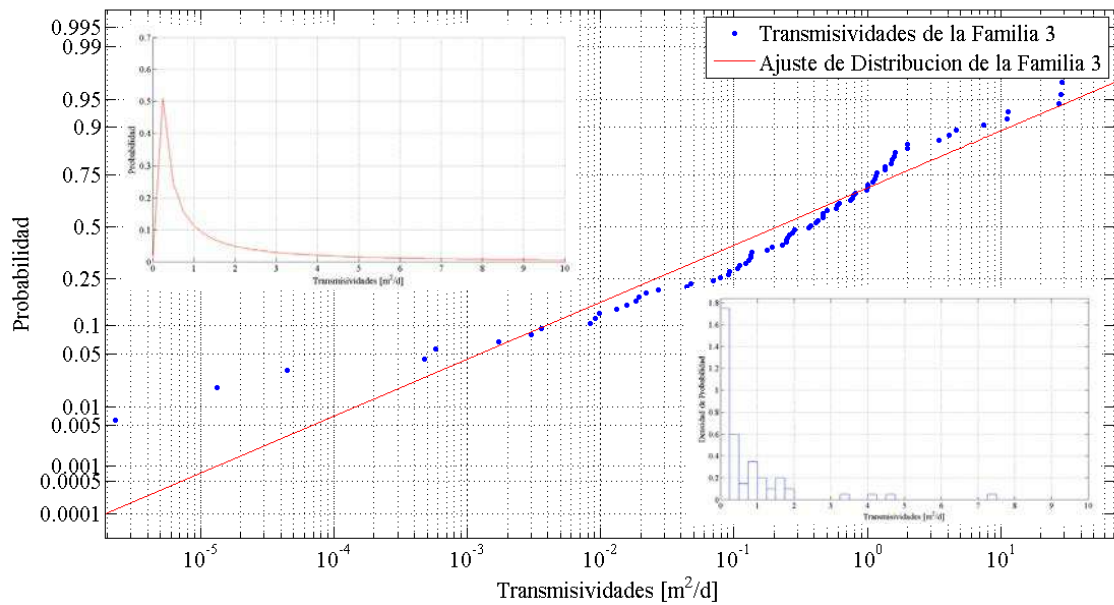


Figura N° 6-27 Ajuste de Probabilidad para la transmisividad de la familia 3 con el SCE-UA.

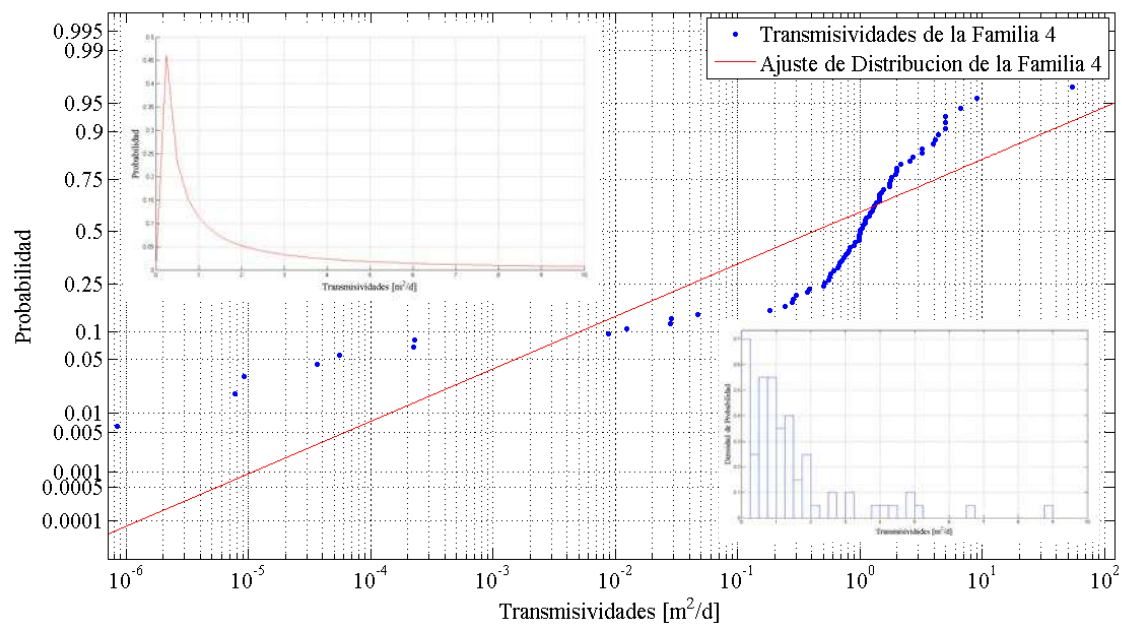


Figura N° 6-28 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 4 con el SCE-UA.

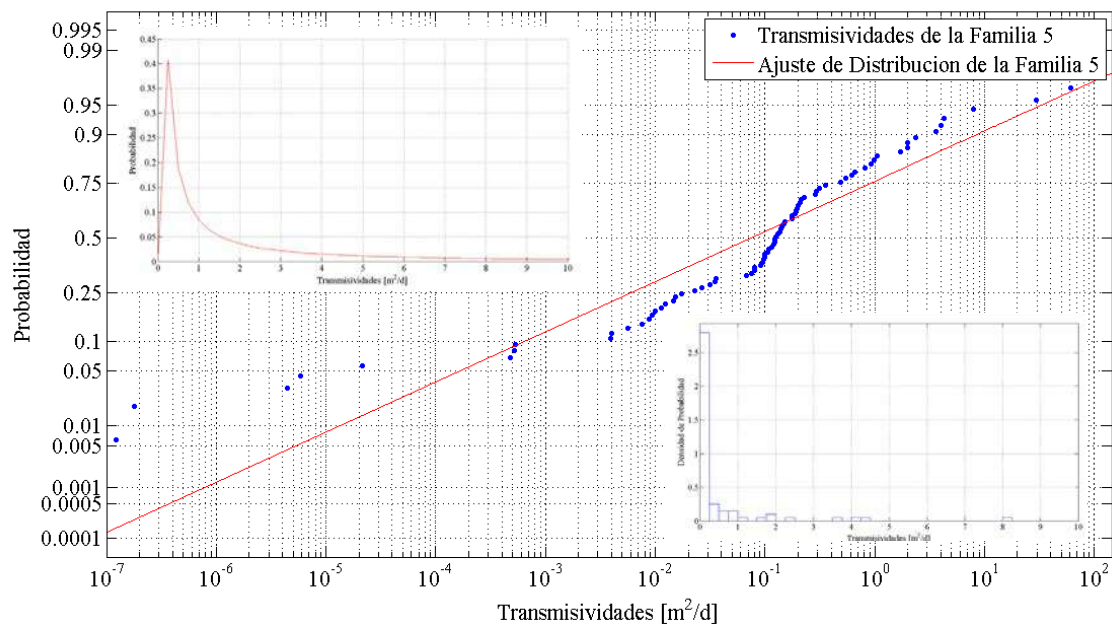


Figura N° 6-29 Ajuste de Probabilidad para la trasmisividad de la familia 5 con el SCE-UA.

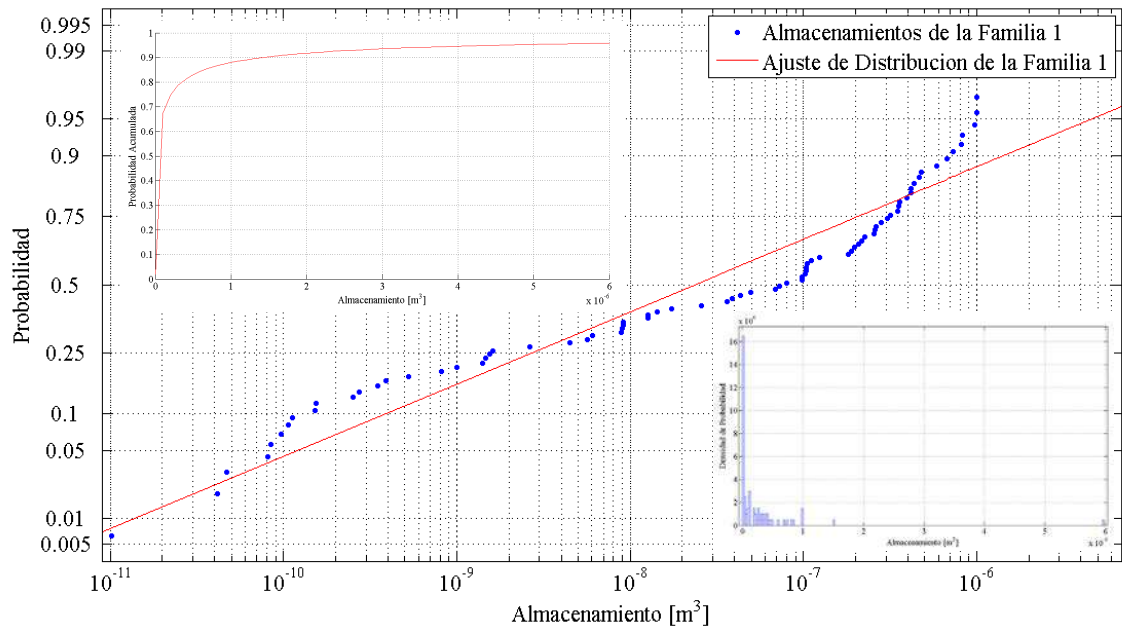


Figura N° 6-30 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 1 con el SCE-UA.

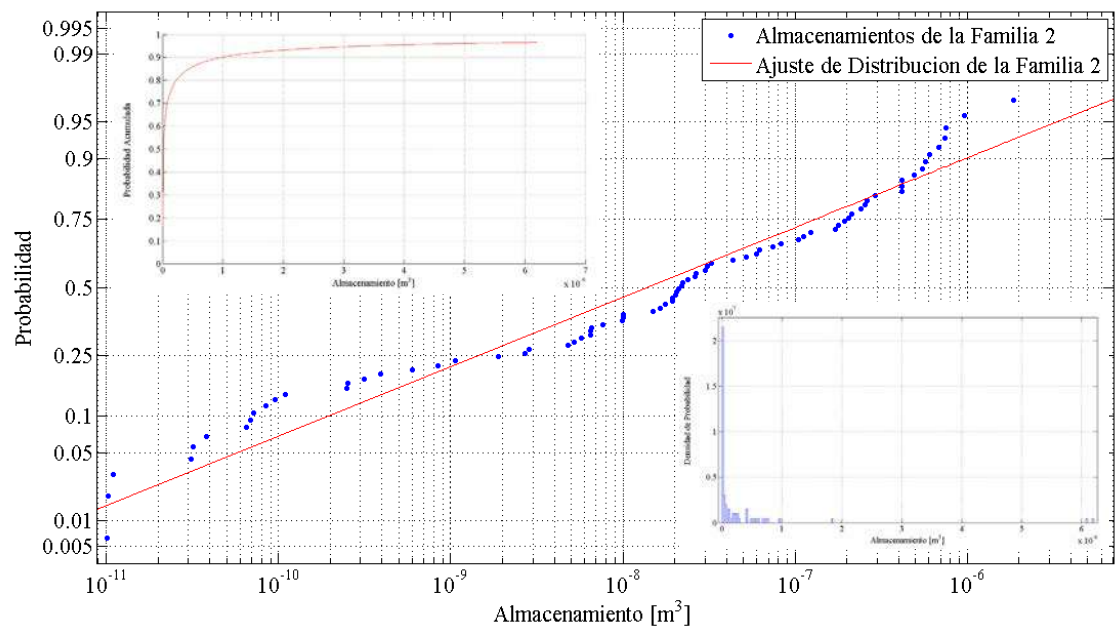


Figura N° 6-31 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 2 con el SCE-UA.

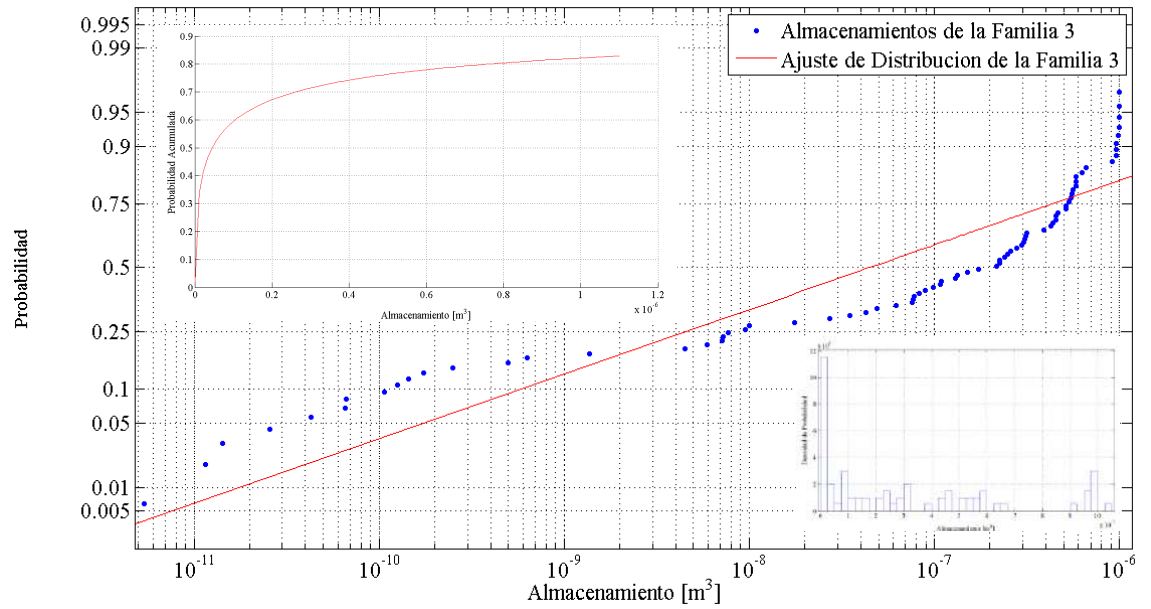


Figura N° 6-32 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 3 con el SCE-UA.

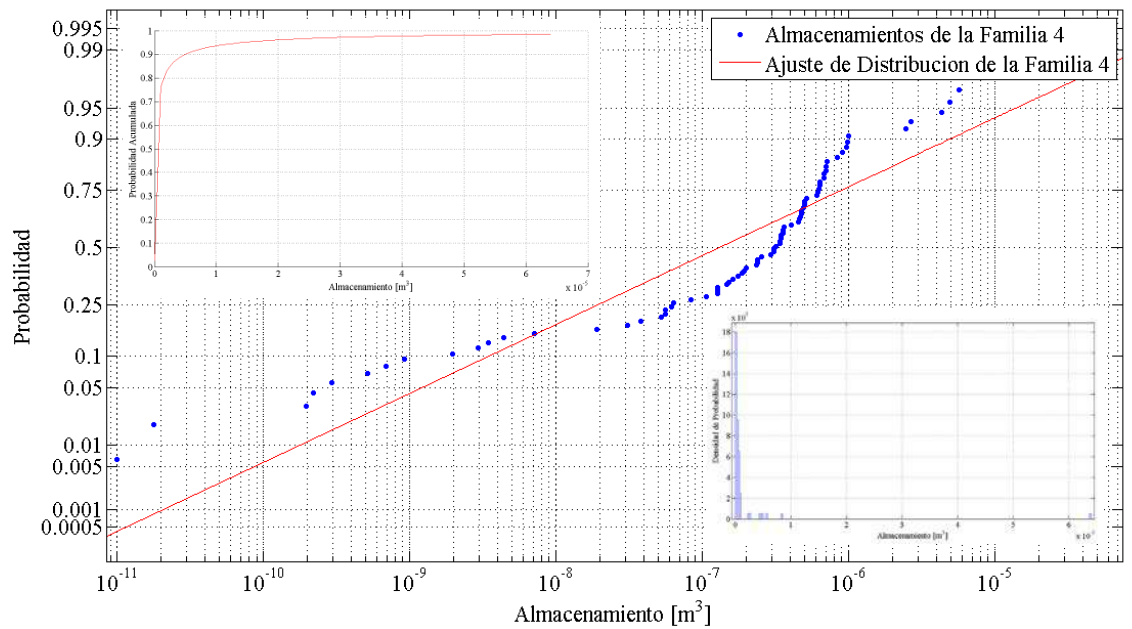


Figura N° 6-33 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 4 con el SCE-UA.

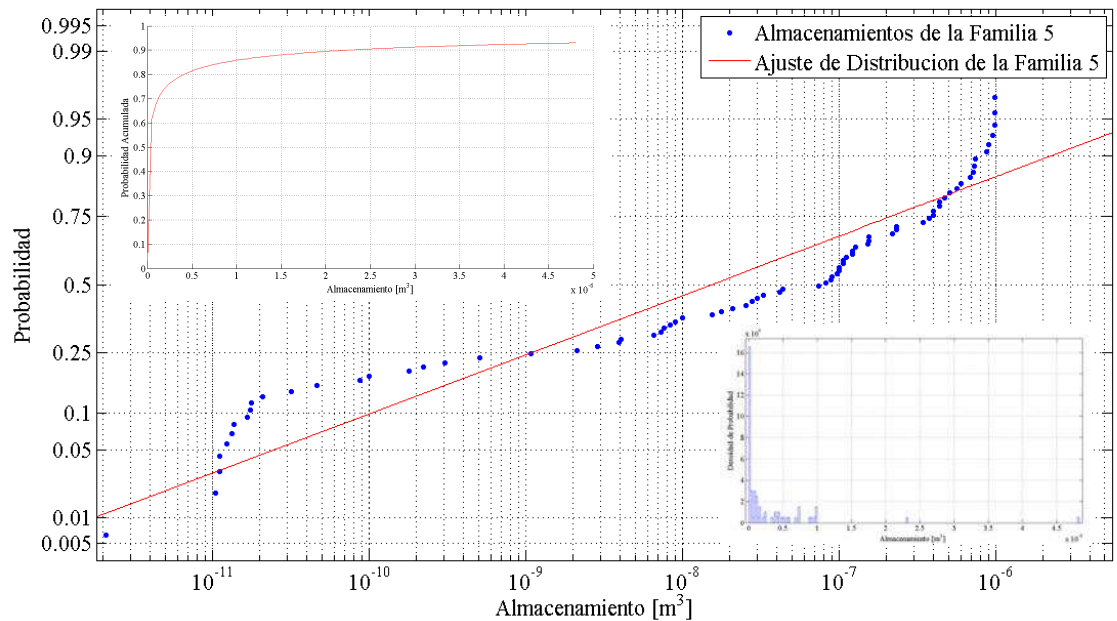


Figura N° 6-34 Ajuste de Probabilidad para el almacenamiento de la familia 5 con el SCE-UA.

De manera similar a los datos obtenidos con el TRANSIN los ajustes de distribución nuevamente tienen un arreglo de tipo Log-normal, sin embargo, a diferencia de los primeros estos resultan más identificables para todas las familias. Un ejemplo se presenta en el almacenamiento de la familia 4, que es un claro reflejo en las mejoras del ajuste.

Tabla N° 6-2 Estadísticos de los ajustes de probabilidad para los diferentes parámetros hidrodinámico de flujo (SCE-UA).

Media					
5 Familias de T y S	Parámetros				
	T1	T2	T3	T4	T5
	0.0289	0.0545	0.2101	0.4166	0.0740
5 Familias de T y S	Parámetros				
	S1	S2	S3	S4	S5
	0.0236*10(-6)	0.0138*10(-6)	0.0446*10(-6)	0.1317*10(-6)	0.0153*10(-6)
Desviación Estándar					
5 Familias de T y S	Parámetros				
	T1	T2	T3	T4	T5
	208.5970	31.1881	22.6641	30.6133	40.8110
5 Familias de T y S	Parámetros				
	S1	S2	S3	S4	S5
	24.4921	27.7864	29.0186	17.0664	49.2248

6.4.2.2 Variación a la metodología

Con el fin de definir una función de ajuste única para todo el medio, se plateó una modificación de la función objetivo, y se propuso una función multi-objetivo, en la cual se estimó además de un valor de transmisividad y almacenamiento para cada familia, un único valor regional para las cinco zonas geológicas claramente identificadas.

La función multi-objetivo se construyó con la siguiente condición: obtener el mejor ajuste en catorce (14) parámetros, diez (10) de los cuales son las transmisividades y almacenamientos respetivos para cada familia y los otros cuatro (4) son factores multiplicadores y de potencia que se aplican a la productoria de las respectivas transmisividades y almacenamientos que arrojaron el mejor ajuste, con el fin de obtener un único valor para toda la zona.

Se logra una función de la siguiente forma:

$$T^* = A * \left(\prod_{i=1}^5 T_i \right)^B \quad i = 1, \dots, 5$$

$$S^* = C * \left(\prod_{i=1}^5 S_i \right)^D \quad i = 1, \dots, 5$$

Donde T_i y S_i son las respectivas transmisividades y almacenamientos de las familias, y T^* y S^* son transmisividades y almacenamientos regionales para todo el medio. Estos resultan de la combinatoria de las familias, afectadas cada una por dos factores que son los que se denominan A, B, C, D , calibrados con el objetivo de obtener una serie de coeficientes que sean representativos del medio y permitan modelar la formación tan solo con dos parámetros que fueron denominados T^* y S^* .

La función resultante a optimizar es la que logre representar el medio tanto a nivel de familias como a nivel de parámetros regionales, es decir la que minimice ambas funciones al tiempo.

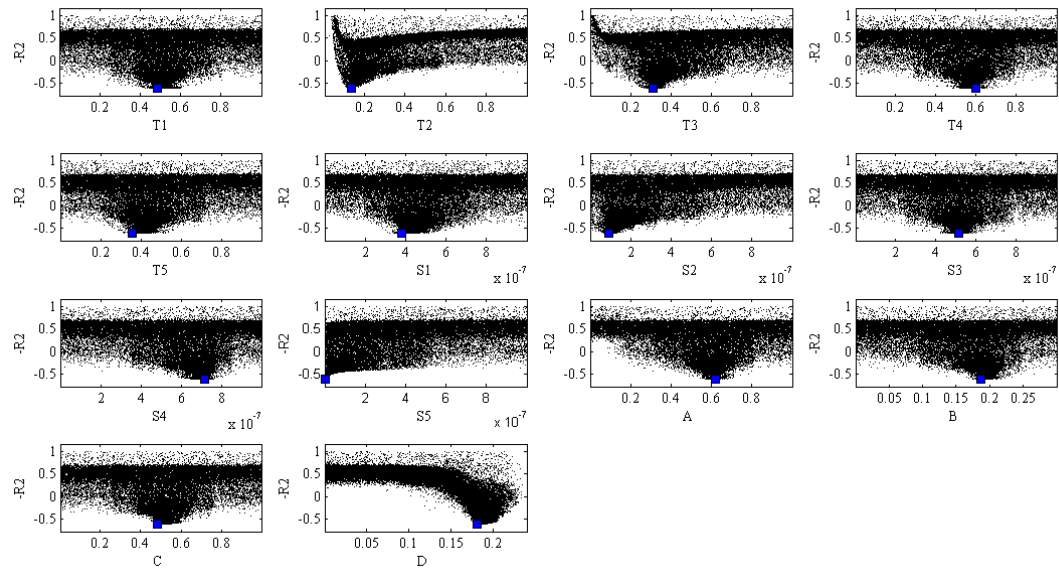


Figura N° 6-35 Tendencia evolutiva de parámetros de familia y coeficientes.

El algoritmo de búsqueda obtiene los diez parámetros óptimos y los coeficientes regionales (Ver Figura N° 6-35), los cuales dan la forma a la combinatoria con la que se estiman los parámetros regionales, es decir, tan solo con un par de valores (uno de transividad y uno de almacenamiento) se pueden representar las pruebas de abatimiento y recarga, efectuadas en la formación en estudio.

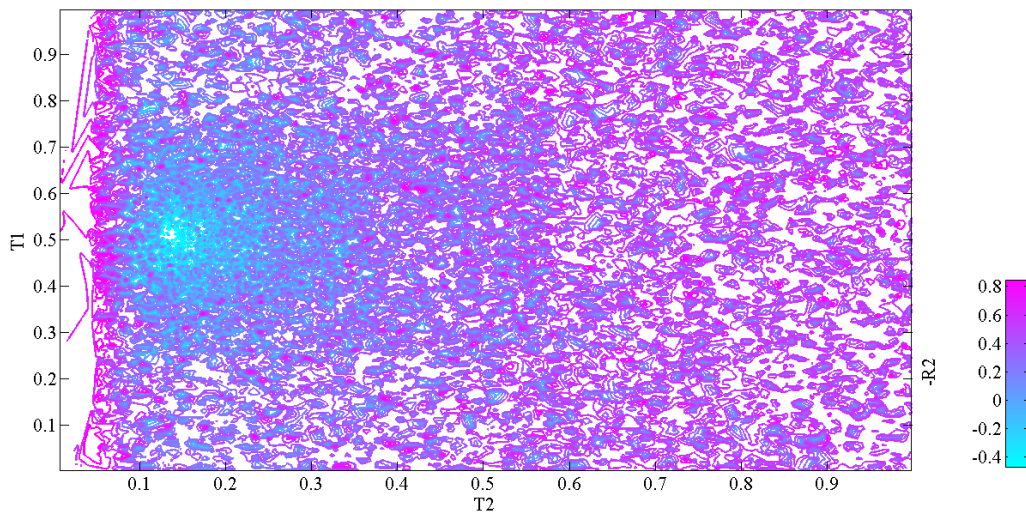


Figura N° 6-36 Contornos paramétricos de las transmisividades de la familia uno y dos.

Este par de valores no presentan ajustes tan buenos como parámetros de las familias, sin embargo se desea proponer una aproximación geométrica que permite caracterizar la formación.

Tabla N° 6-3 Resultados obtenidos mediante la aproximación por coeficientes de zonificación.

-R ²	T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5	A	B	C	D
-0.6160	0.4821	0.1330	0.3139	0.5951	0.3556	3.80E-07	9.35E-08	5.13E-07	7.17E-07	7.27E-11	0.6187	0.1867	0.4830	0.1810

Los resultados obtenidos varían de forma significativa con los obtenidos en la Tabla N° 7-1, donde se encuentran resumidos los ajustes logrados por las diferentes metodologías. Esta gran diferencia indica que resulta una aproximación pobre intentar representar el medio con un solo valor regional. Sin embargo, el ajuste logrado no es despreciable y podría ser un buen estimativo de un valor regional de la DFN21.

Los coeficientes de zonificación tienen una clara tendencia hacia un valor óptimo que se puede apreciar en las superficies y contornos paramétricos presentados en la Figura N° 6-37, así mismo se evidencia la densificación de mínimos (representadas por color azul) en ciertas regiones del espacio de búsqueda.

Al garantizar el doble ajuste de las funciones objetivos, se puede proponer un conjunto de valores que represente el medio de forma individual y grupal a la vez, es decir, se obtienen los diez coeficientes que modelan el medio como familias y una productoria de ellos afectados por dos coeficientes regionales que se calibrarán produciendo una pareja de parámetros que logran representar la formación. Los ajustes logrados se puede apreciar en las Figura N° 6-38 y Figura N° 6-39.

El ajuste logrado con los coeficientes regionales es poco satisfactorio si se compara con los parámetros de familias, siendo otra prueba de la gran heterogeneidad del medio, lo que implica que entre mayor sea el nivel de detalle, mejor será la representación del sistema físico.

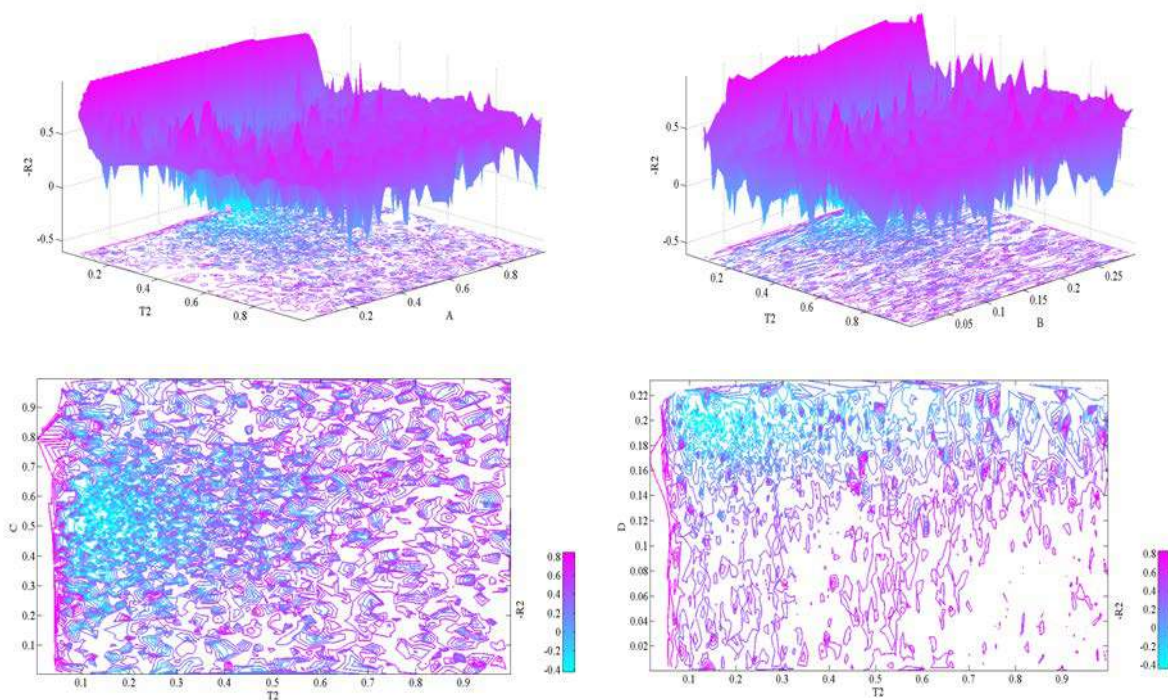


Figura N° 6-37 Superficies y contornos paramétricos de coeficientes representativos del medio

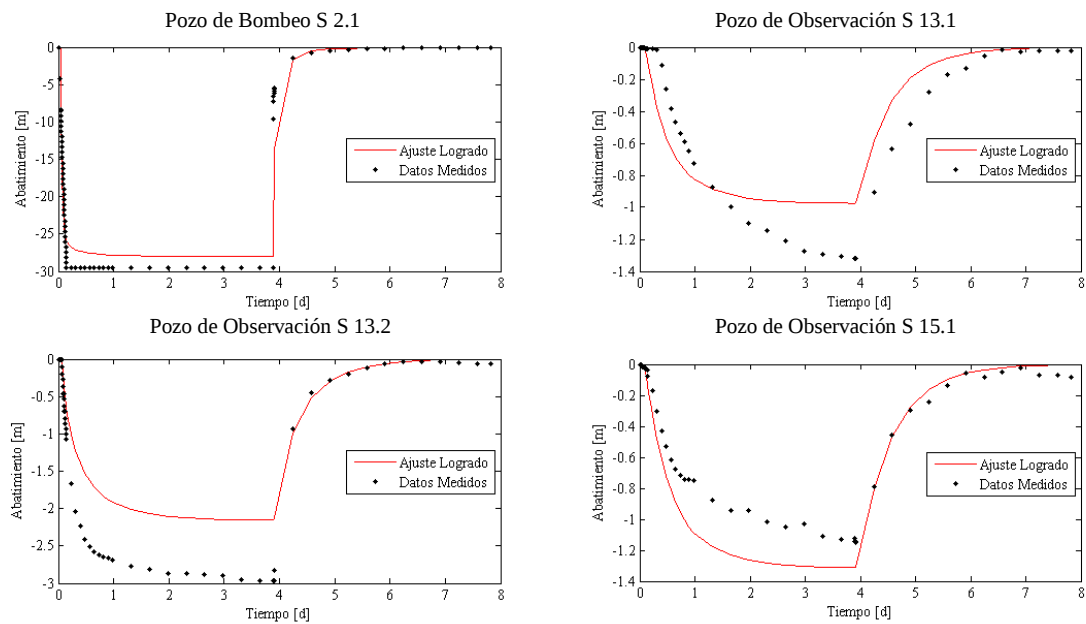


Figura N° 6-38 Ajuste logrado para con las transmisividades y almacenamientos de cada familia

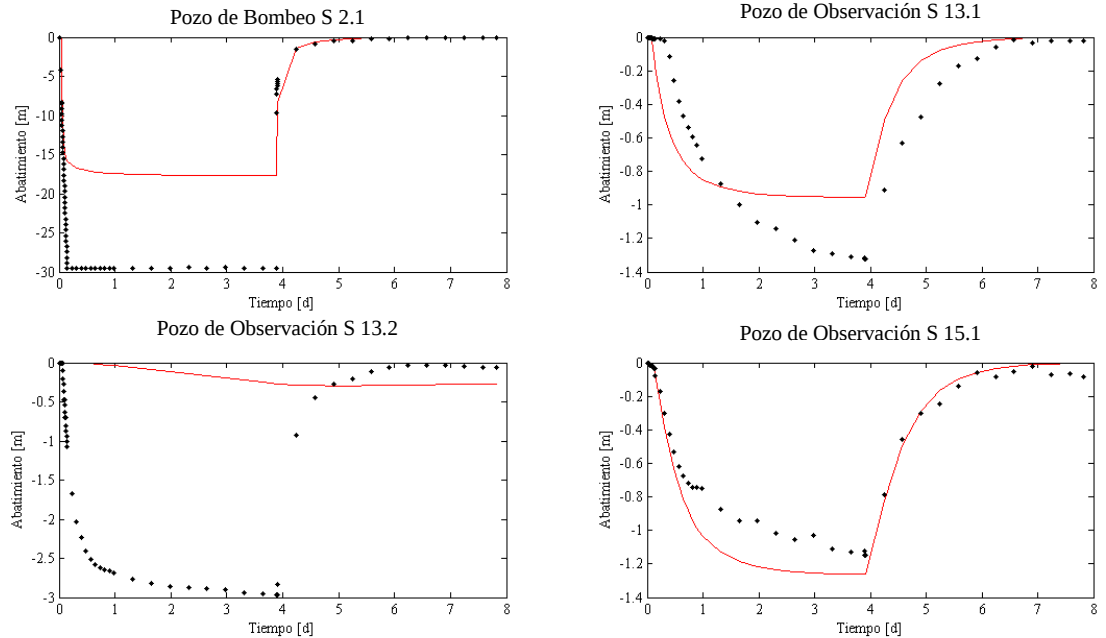


Figura N° 6-39 Ajuste logrado con la transmisividad y almacenamiento regionales.

6.4.3 PSO (particle swarm optimization)

En la sección 5.4.3 se hace una descripción detallada de este método, el acople de la metodología es similar a la citada anteriormente por lo que no se hará énfasis en ello. El PSO es un algoritmo de optimización en el que se ha venido incursionando en los últimos años, dadas las grandes capacidades que tiene en la solución de problemas de optimización y su gran versatilidad en múltiples campos de la investigación.

Esta técnica de optimización tiene excelentes bondades de ajuste, sin embargo, tiene la gran desventaja de un gasto computacional muy elevado, que en nuestro problema de optimización resulta inmanejable. Su implementación se hizo con el objetivo de proponer una alternativa en la utilización del SCE-UA y proponer un algoritmo que en los últimos años ha venido incursionando fuertemente en la solución del problema inverso en diversos campos de la investigación con excelentes resultados.

El PSO presenta ajustes similares a los del SCE sin embargo requiere un tiempo de computo alrededor de siete (7) veces mayor en pruebas de rendimiento que se efectuaron. Para la DFN21 fue de 28561 segundos con el PSO y 4916 segundos con el SCE-UA, para un ajuste de $R^2 = 0.9$ en ambos casos.

La gran cantidad de sobrecarga computacional no se ve reflejada en mejoras en el ajuste, por lo que ésta metodología sería viable en entornos donde se pudieran realizar cálculos apoyándose en programación multi-núcleo o procesamiento con GPU las cuales pueden manejar una gran cantidad cálculo numérico, pero esto no hace parte del alcance del actual trabajo.

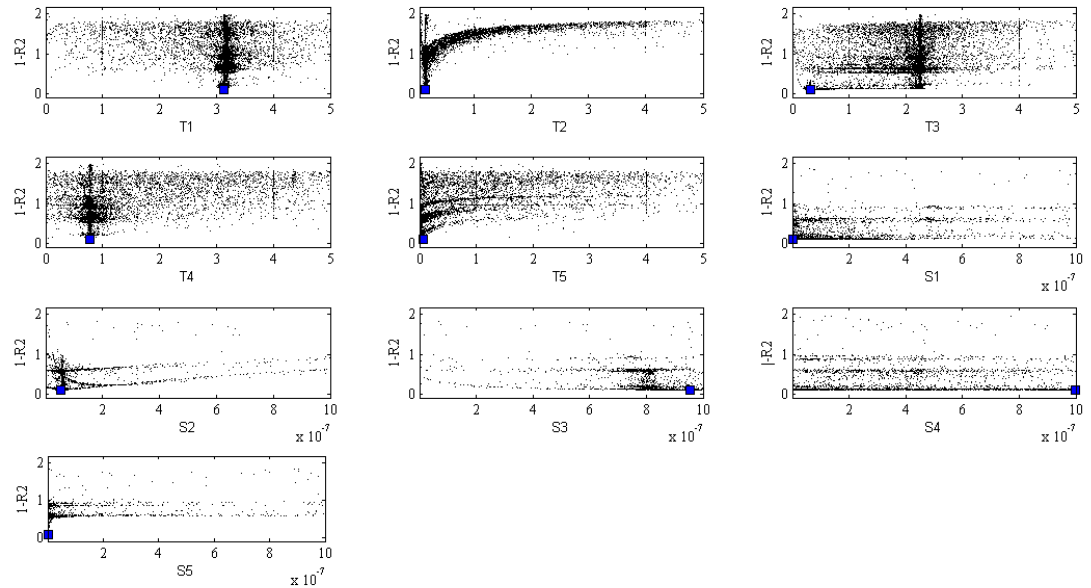


Figura N° 6-40 Tendencia evolutiva del PSO hacia el valor óptimo.

En las transmisividades se observa una clara tendencia hacia un mínimo con una densificación de la nube de puntos sobre el mismo, a medida que el enjambre de partículas se mueve en el espacio de búsqueda (Ver Figura N° 6-40), en el caso de los almacenamientos dicha tendencia no resulta tan evidente.

Nuevamente se observa una elevada correlación paramétrica, producto del alto nivel de complejidad de ese tipo de formaciones. Sin embargo se pueden ver claramente los sitios donde la función objetivo tiende al mínimo, presentando una coincidencia con los resultados del SCE-UA para los dos parámetros que se muestran en la Figura N° 6-41.

El intervalo del 90% permite identificar la gran variabilidad del sistema a los cambios en los datos de entrada. Se excluyeron de los datos el 5% inferior y superior de los mismos, con el objetivo de eliminar los resultados con demasiada dispersión y poder establecer una franja de confianza adecuada.

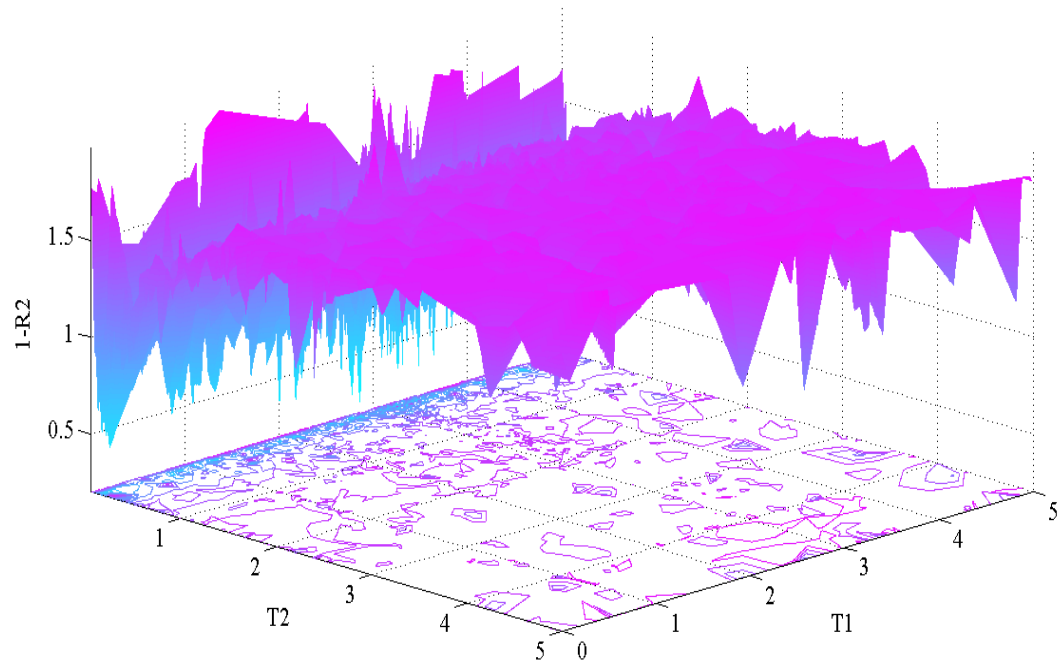


Figura N° 6-41 Superficie paramétrica en el espacio de búsqueda (PSO)

Las salidas del modelo asociadas a un límite de confianza, nuevamente reflejan la dificultad para lograr un ajuste satisfactorio en el pozo de observación (S 13.2), para el resto de los casos se logra una representación adecuada del sistema.

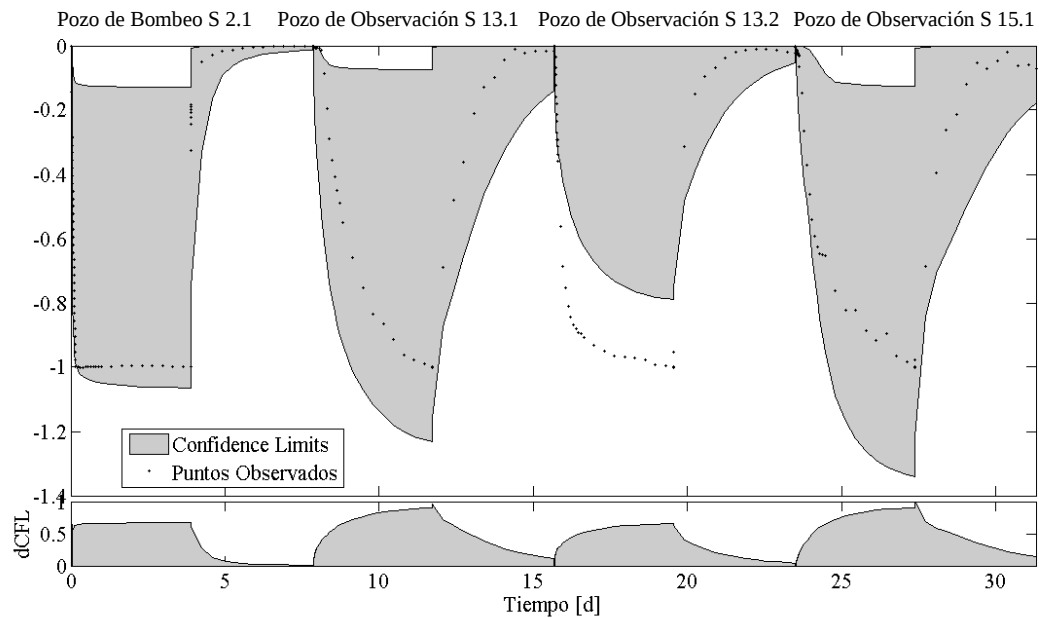


Figura N° 6-42 Salidas del modelo PSO asociadas a un límite de confianza

6.4.4 Análisis de sensibilidad

Uno de los principales productos es el análisis de sensibilidad paramétrica, el cual se efectuó con la ayuda del MCAT (Monte Carlo Analysis Tool) que es una metodología desarrollada en el Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental del Imperial College London [147].

El algoritmo fue acoplado dentro de las metodologías de calibración, por lo que al final del mismo, se puede hacer de manera automática el análisis de sensibilidad en incertidumbre paramétrica sin la necesidad de realizar algún tipo de manipulación adicional de los datos. Sin embargo, cabe resaltar que este tipo de muestreos deben hacerse con datos que se basan en distribuciones uniformes, por lo que es necesario definir un espacio de búsqueda una vez se hayan encontrado los óptimos, por algunas de las metodologías de calibración descritas anteriormente. Si el lector desea una descripción detallada de las metodologías implementadas en el MCAT debe remitirse en la sección 5.4.4.

Identificados los óptimos, se definen los espacios de búsqueda en cercanías al mismo con el propósito de identificar cuáles de los parámetros son los más sensibles y con ello establecer las familias geológicas que tienen mayor incidencia sobre la formación Batolítica objeto del presente estudio.

Este espacio de búsqueda se construye sobre una distribución uniforme que garantice que la densidad de probabilidad a lo largo del mismo solo depende del ajuste, y no, de la variación de la densidad de la información sobre el espacio muestral, es decir con una distribución uniforme se garantiza que las zonas con mayor probabilidad son aquellas donde se encuentran los óptimos.

El análisis de sensibilidad paramétrica permite establecer que parámetros son los que gobiernan el medio, es decir, cuáles de ellos son los que tienen mayor influencia en la conducción de flujo, que es el tema central de estudio. En la Figura N° 6-43 se puede apreciar como la transmisividad de la familia dos (T2) es la única que presenta una clara tendencia hacia el óptimo, se observa un claro abatimiento de la nube de puntos y por ello es el único parámetro que se considera identificable dentro de la DFN21.

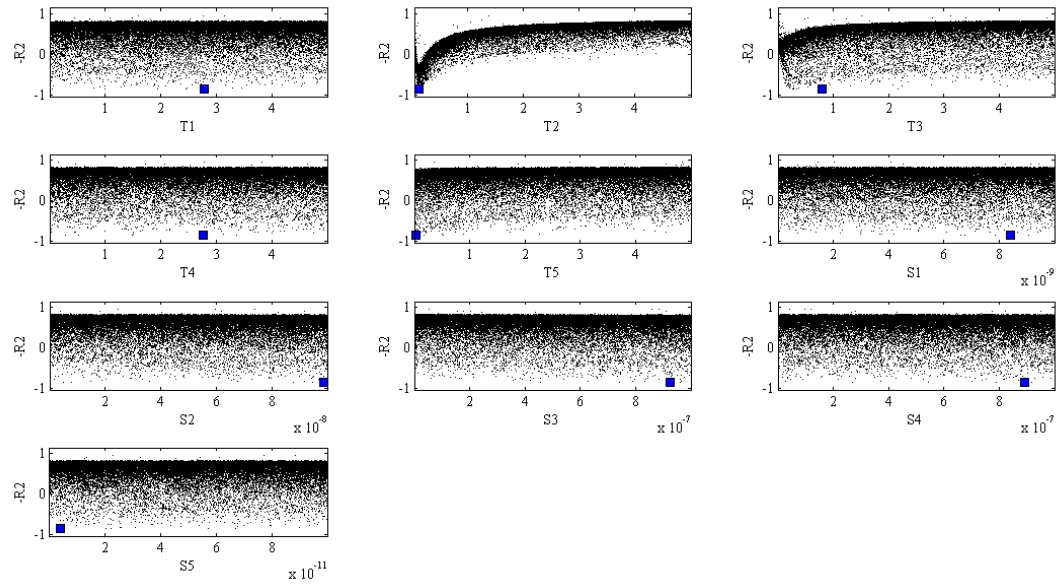


Figura N° 6-43 Sensibilidad de los parámetros hidrodinámicos de flujo

El análisis de la metodología GLUE (Ver Figura N° 6-44) permite establecer el límite de confianza asociada a una franja, que representa la incertidumbre en las salidas del modelo. En este caso la incertidumbre resulta bastante obvia a diferencia de las metodologías de calibración, donde, los datos de campo caen dentro de las franjas de confianza. Es claro que las metodologías de búsqueda a medida que convergen tienden a eliminar las zonas menos sensibles y por ello el límite de confianza es más definido y representa mejor el sistema. El hecho que una distribución uniforme no pueda evidenciar una franja de confianza adecuada se debe a la gran correlación paramétrica que no hace evidente la identificabilidad de óptimos para los diez parámetros. En conclusión, la metodología GLUE nuevamente sugiere que los métodos de búsqueda global son los que mejor representan el sistema.

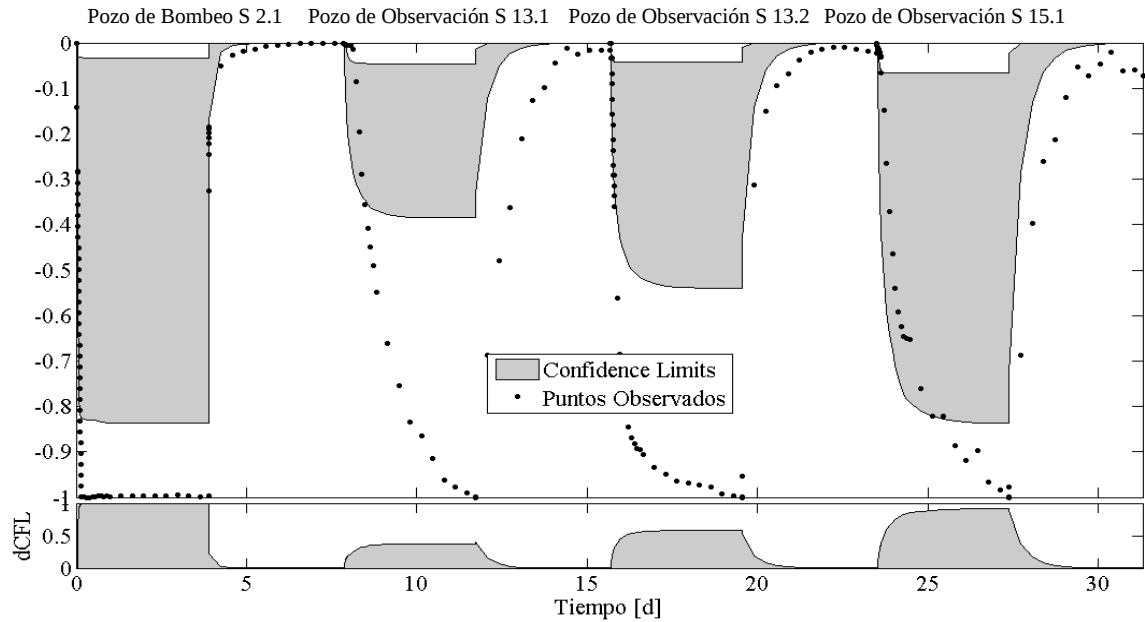


Figura N° 6-44 Salidas del modelo asociadas a un límite de confianza.

6.5 Escalado

El proceso de escalado es el último paso del presente trabajo y consistió en la obtención de parámetros efectivos o promedios, que representen de manera homogénea o heterogénea el medio. Este paso se hizo mediante el respectivo análisis estadístico de cada uno de los parámetros hidrodinámicos de cada fractura; en este caso, ya no se trabaja solamente con el parámetro de familia, el cual es utilizado para afectar todas las propiedades de cada fractura perteneciente a cada una de las familias y con ellos definir un valor único para toda la zona geológica.

Se proponen dos aproximaciones: (i) la primera es definir un valor de transmisividad y almacenamiento por familia, (ii) la segunda en definir un valor para todas las familias, es decir, modelar el medio con tan solo dos valores, producto de la suma de las funciones de densidad de probabilidad.

Aproximación por familia

Una vez se afectaron todas las fracturas de cada familia por su parámetro óptimo producto de la calibración, se procedió a evaluar los ajustes de distribución de cada una de

las familias para las cien generaciones. A manera de ejemplo se realizó el análisis de distribución de la transmisividad de la familia uno, teniendo en cuenta las cien generaciones, este valor se ajusta a una distribución de tipo Log normal y el valor medio del ajuste es considerado como efectivo para esa familia, este único valor es capaz de representar toda la familia geológica en cualquiera de las generaciones, sin embargo, no en todos los casos se espera un ajuste satisfactorio como en el proceso de calibración.

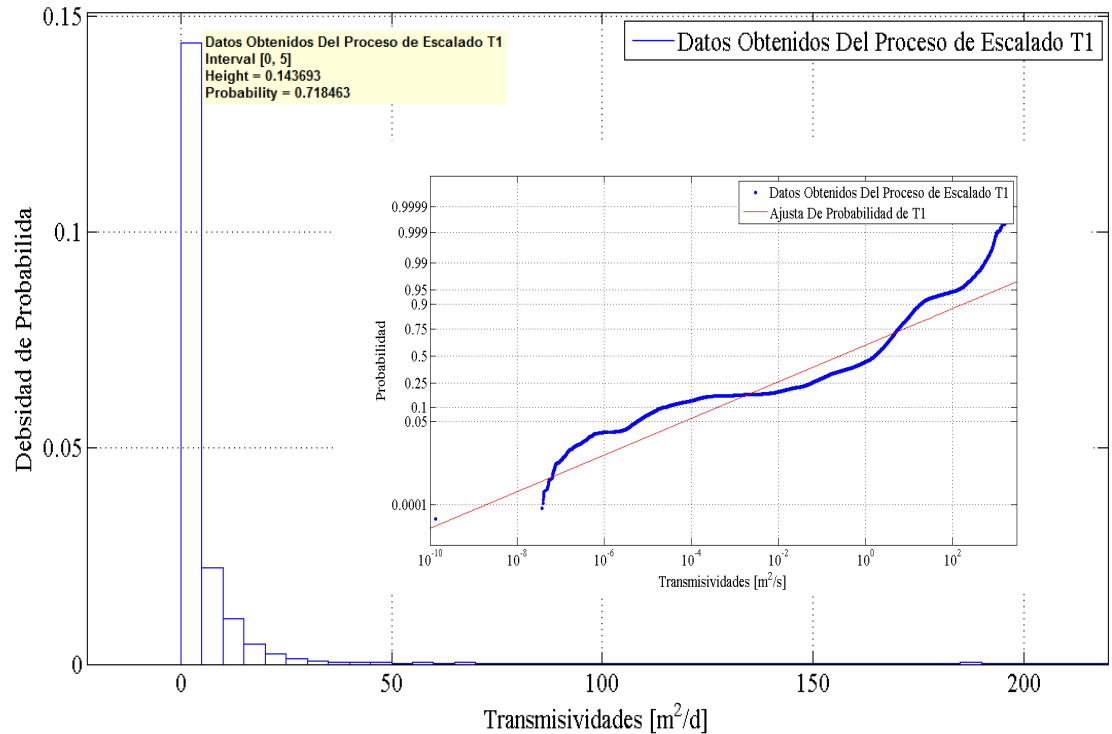


Figura N° 6-45 Densidad de Probabilidad de transmisividades de Familia 1.

De manera análoga se obtuvieron los otros nueve valores efectivos. En todos los casos los ajustes fueron satisfactorios, a continuación se presenta en forma resumida los ajustes de distribución (Ver Figura N° 6-46).

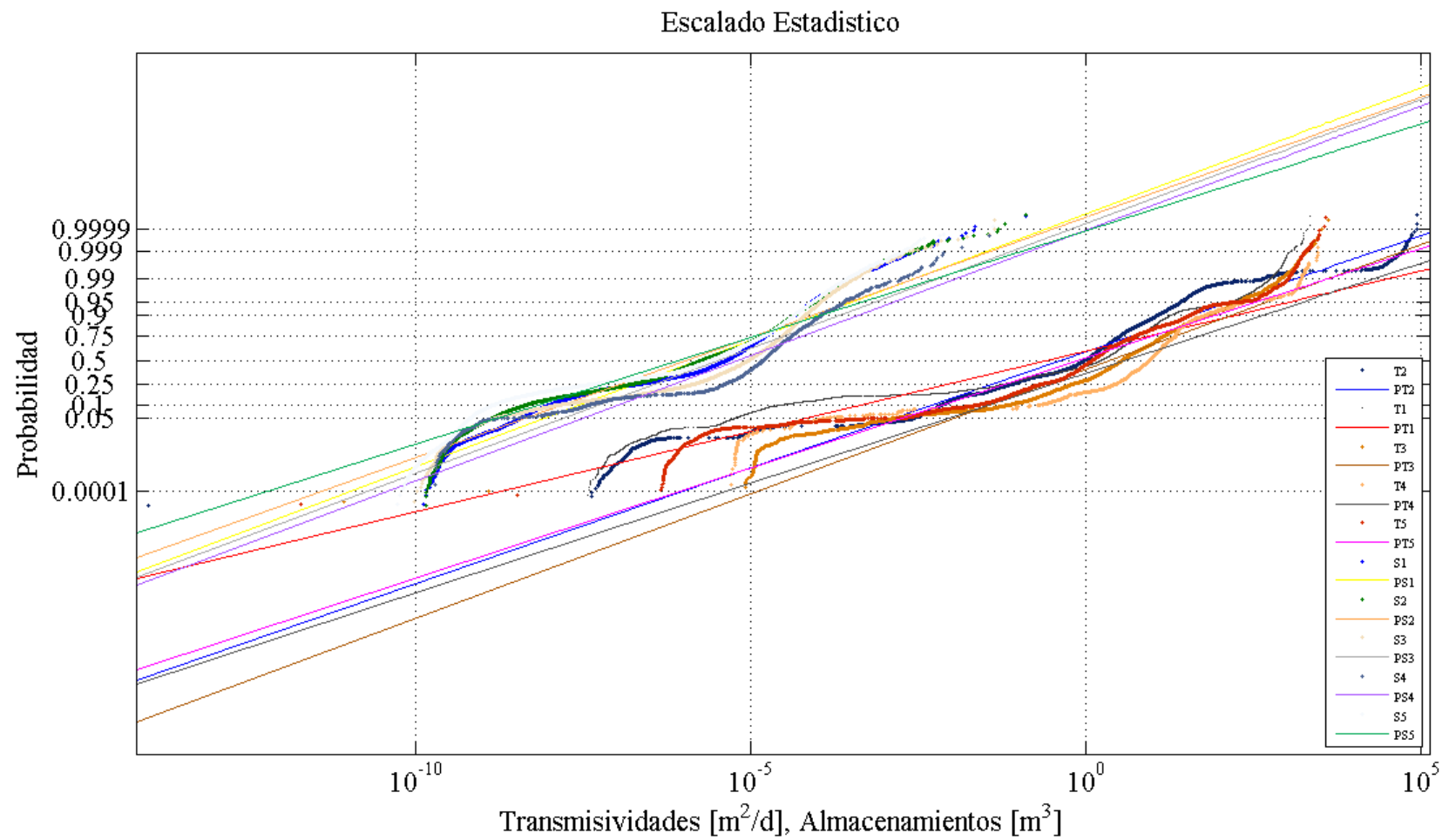


Figura N° 6-46 Densidad de Probabilidad de parámetros efectivos de familias.

El hecho de poder representar el medio con tan solo diez valores sin la necesidad de requerir parámetros de familias y parámetros de fracturas, permitirá estudiar procesos de transporte de contaminantes en el mismo.

Con el fin de validar los parámetros efectivos obtenidos durante el proceso de escalado, se utilizaron las redes que poseen un elevado número de fracturas y que durante el proceso de calibración el tiempo de cómputo no era viable y tuvieron que ser interrumpidas.

Tabla N° 6-4 Parámetros efectivos del sistema de manera heterogénea.

T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5
0.2650	0.4152	2.1784	3.6606	0.8053	$1.6418 \cdot 10^{-06}$	$1.0757 \cdot 10^{-06}$	$3.4664 \cdot 10^{-06}$	$6.5470 \cdot 10^{-006}$	$8.0309 \cdot 10^{-007}$

Aproximación global

Estos valores serán un estimativo regional de los parámetros hidrodinámicos, permitiendo realizar la modelación del mismo sin la necesidad de entrar a discretizar. La aproximación que se presenta tiene la ventaja que elimina la necesidad de saber en qué zona geológica nos encontramos y dada la extensión del macizo rocoso es bastante conveniente.

Las transmisividades y almacenamientos producto de las cinco familias geológicas permiten realizar un upscaling de los parámetros de flujo (Ver Figura N° 6-47 Figura N° 6-48), en donde todas la fracturas tienen las mismas características hidrodinámicas (Ver Tabla N° 6-5). Se suman las distribuciones de probabilidad y el valor medio es el parámetro efectivo global.

De forma similar que en la aproximación por familias se procede a evaluar como estos parámetros modelan el sistema y para ello se simuló el abatimiento para las redes que no participaron en el proceso de calibración.

Tabla N° 6-5 Parámetros efectivos del sistema de manera homogénea.

T	S
0.6176	$1.4355 \cdot 10^{-06}$

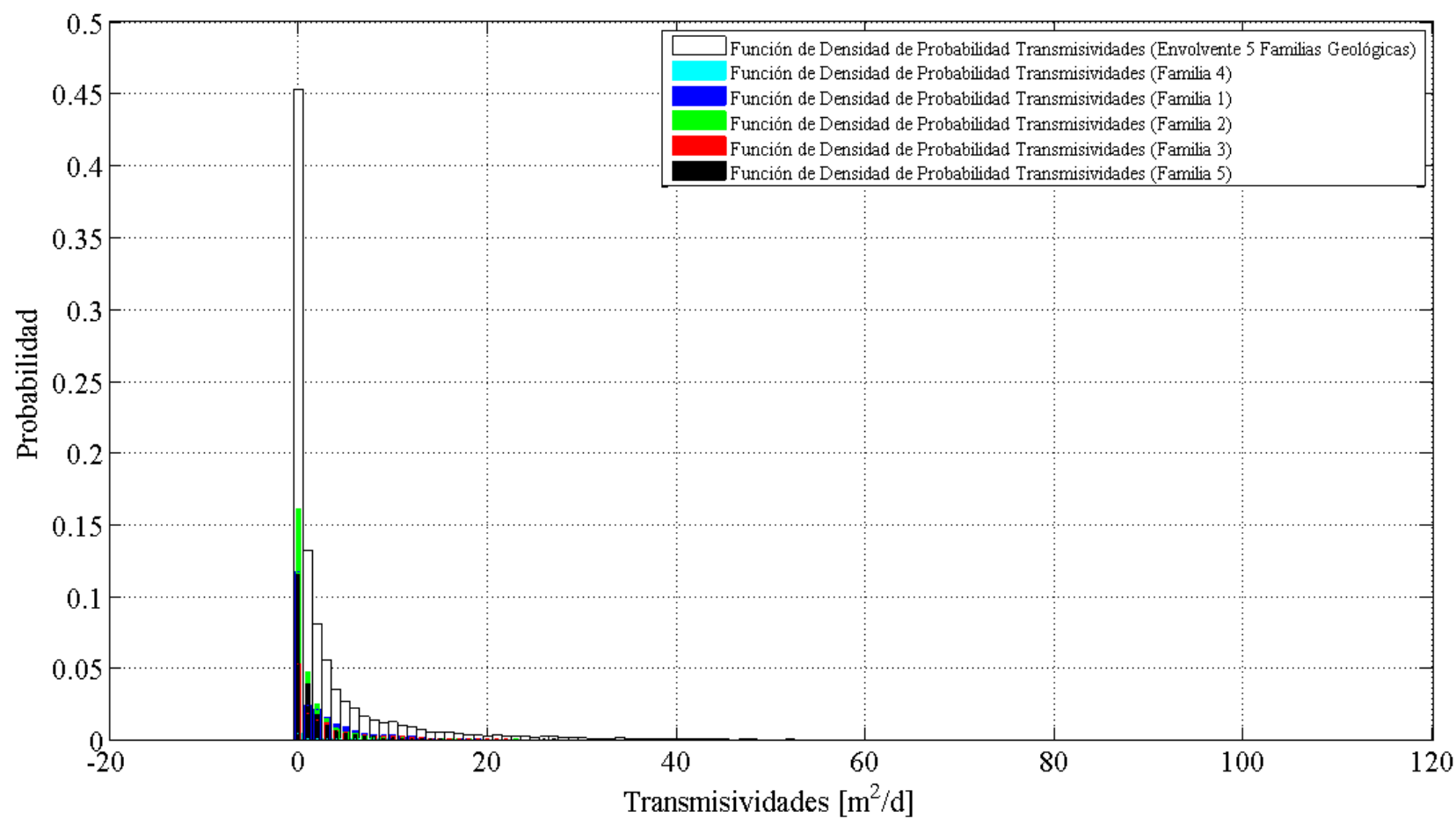


Figura N° 6-47 UpScaling de las Transmisividades (Parámetro Efectivo).

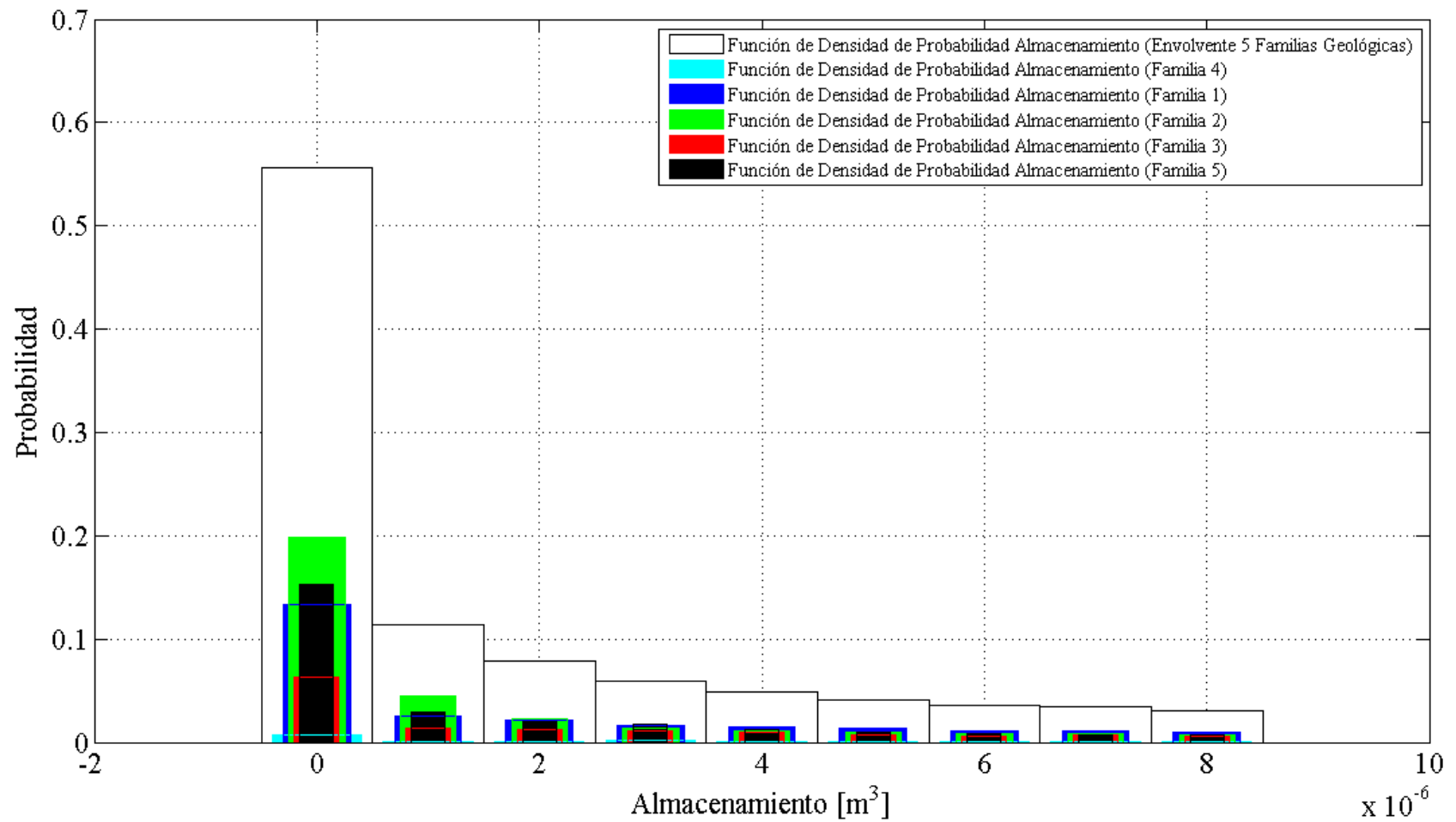


Figura N° 6-48 UpScaling de Almacenamientos (Parámetro Efectivo).

7 Análisis de resultados

A lo largo de la implementación de las diferentes técnicas de calibración se pudo observar las ventajas y desventajas de las mismas, la primera aproximación donde se utilizó el método de Marquardt es un buen estimativo, pero los ajustes de probabilidad para los diez parámetros hidrodinámicos de flujo obtenidos para las cien DFN no son claramente identificables en algunos casos. Esto fue corregido cuando se realizó la calibración con la ayuda del SCE-UA en donde tanto la transmisividades como los almacenamientos de las cinco familias geológicas se ajustan claramente a esta distribución, lo cual es un claro ejemplo de la capacidad del algoritmo para realizar este tipo de calibraciones en entornos tan complejos, donde la metodología de Marquart no tiene tan buenos resultados dado su fundamento teórico.

La utilización del PSO solo se aplicó a la DFN21 dado el tiempo de cómputo tan elevado, sin embargo, se obtuvo que no difiere de los resultados del SCE-UA, en ambos casos los parámetros de familia de la DFN 21 dieron similares y el ajuste de correlación NASH estuvo alrededor de 0.9 siendo 1 un ajuste perfecto. Este de alguna forma da un parte de tranquilidad en los valores que se obtuvieron. Desafortunadamente no se pudo realizar la calibración de las cien DFN por esta metodología y con ellos comparar los valores efectivos que se lograron por el SCE-UA.

El resultado de las metodologías de calibración resulta bastante prometedor, el PSO y el SCE-UA, son sin duda las mejores técnicas, las dos (2) presentan ajustes más que satisfactorios con coeficientes que superan $R^2 = 0.9$. Para el SCE-UA y el PSO se observa una tendencia a la unicidad en los puntos identificados como óptimos en el espacio maestro de búsqueda. Esto ofrece una gran certeza en los resultados obtenidos, donde ambos algoritmos convergen de forma similar, a pesar de las grandes diferencias en la metodología de búsqueda.

En la Tabla N° 7-1 se observan los resultados tras el proceso de calibración para la DFN 21 y el valor óptimo que se obtuvo por cada metodología de ajuste. El TRANSIN que utiliza el algoritmo de Marquardt, dista bastante tanto en el criterio de ajuste como de los valores de transmisividades y almacenamientos.

Tabla N° 7-1 Resultados obtenidos por las diferentes metodologías de calibración con sus bondades de ajuste

	TRANSIN									
-R ²	T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5
-0.6012	13.0085	0.0714	0.2425	7.9204	8.2237	0.4473*10 ⁻⁰⁸	0.7341*10 ⁻⁰⁸	0.7601*10 ⁻⁰⁶	0.4299*10 ⁻⁰⁸	0.5989*10 ⁻⁰⁸
	SCE-UA									
-R ²	T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5
-0.9030	0.9712	0.1465	0.3667	0.9979	0.0748	8.8916*10 ⁻⁰⁹	5.9435*10 ⁻⁰⁸	9.5781*10 ⁻⁰⁷	1.9889*10 ⁻⁰⁷	1.0471*10 ⁻¹¹
	PSO									
1-R ²	T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5
0.0986	3.1382	0.1569	0.3154	0.7840	0.0693	1.6453*10 ⁻¹³	5.4002*10 ⁻⁰⁸	9.5359*10 ⁻⁰⁷	9.9999*10 ⁻⁰⁷	1.4266*10 ⁻¹¹

De este cotejo de resultado se puede concluir que el SCE-UA es la metodología ideal a utilizar en este tipo de problemas, dados los ajustes obtenidos y tiempos de cómputo reportados tras la convergencia (Ver sección 6.4.3).

Los métodos de búsqueda global son capaces de representar de forma adecuada las pruebas de campo, se trae a colación la DFN 21 que es el caso de ejemplo, aquí se pueden comparar los ajustes por las diferentes metodologías en donde es claro las notables mejoras tras la implementación de los algoritmos de búsqueda global. Esto sin duda crea una nueva ventana a la hora de abordar este tipo de problemas, permitiendo modelar estos macizos con un elevado nivel de detalle.

Dentro de las 5 familias geológicas presentes en el sistema solo la transmisividad de la 2 resulta identificable, esto quiere decir que la mayoría de los procesos de flujo acurren al interior de esta. El análisis de sensibilidad paramétrica realizado con la ayuda de las simulaciones Monte Carlo permitió evidenciar la influencia de cada familia geológica. A excepción de la transmisividad de la familia 2 el resto de parámetros no tienen mayor influencia, esto se ve reflejado en la forma en que se comporta la nube de puntos, donde no

se observa un cono de identificabilidad y la probabilidad a lo largo del espacio de búsqueda permanece constante.

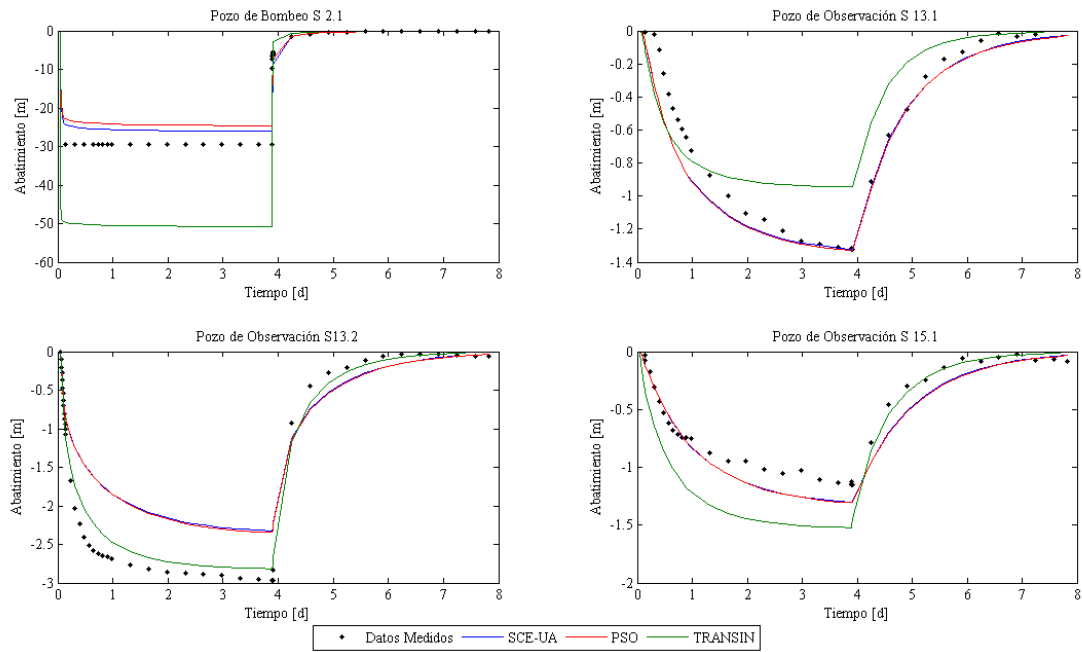


Figura N° 7-1 Ajuste de la DFN 21 por las distintas metodologías.

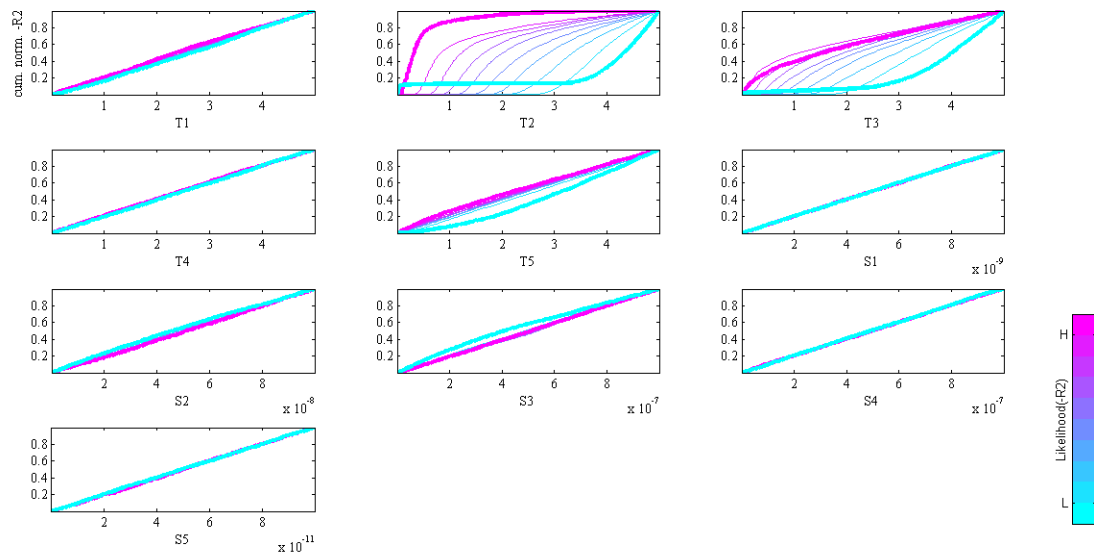


Figura N° 7-2 Análisis de sensibilidad regional de los parámetros hidrodinámicos

La variación de la sensibilidad a lo largo del proceso de búsqueda del óptimo, muestra que la transmisividad de la familia dos (T2) es el parámetro sensible. A medida que las

curvas pasan de color azulado a rojizo se alcanza la convergencia y se evidencia la sensibilidad de los parámetros a lo largo de este proceso (Ver Figura N° 7-2).

El proceso de escalado permitió obtener un conjunto de valores efectivos del sistema para dos aproximaciones propuesta, sin embargo, no se puede precisar con claridad cuál de la dos tiene un mejor ajuste, en algunos casos la discretización en familias parece funcionar mejor como es el caso de la DFN 6 (Ver Figura N° 7-3) pero en otros no resulta tan claro un ejemplo es la DFN 68 donde ambas metodologías representan el sistema de manera similar. Estos resultados son la evidencia de la gran complejidad geométrica de este tipo de formaciones, donde múltiples combinaciones de parámetros pueden dar un resultado similar, aquí se aprecia que el sistema puede responder de manera similar modelándolo en familias o asumiendo un grado de isotropía.

El resultado de este proceso de Upscaling fue satisfactorio, se muestra que es posible modelar el sistema partiendo de una discretización en fracturas, hasta obtener un parámetro representativo de todo el medio, capaz de compensar todo la anisotropía hidráulica del sistema.

Estos resultados sugieren que la representación por DFN es la mejor aproximación geométrica sobre este tipo de formaciones, y partiendo de allí es posible definir un grado de isotropía y con ello obtener parámetros del modelo efectivos para todo el medio, sin la necesidad de realizar discretizaciones hidráulicas o geológicas, volviendo el problema dependiente únicamente de la geométrica la cual es inferida de la prospecciones geológica.

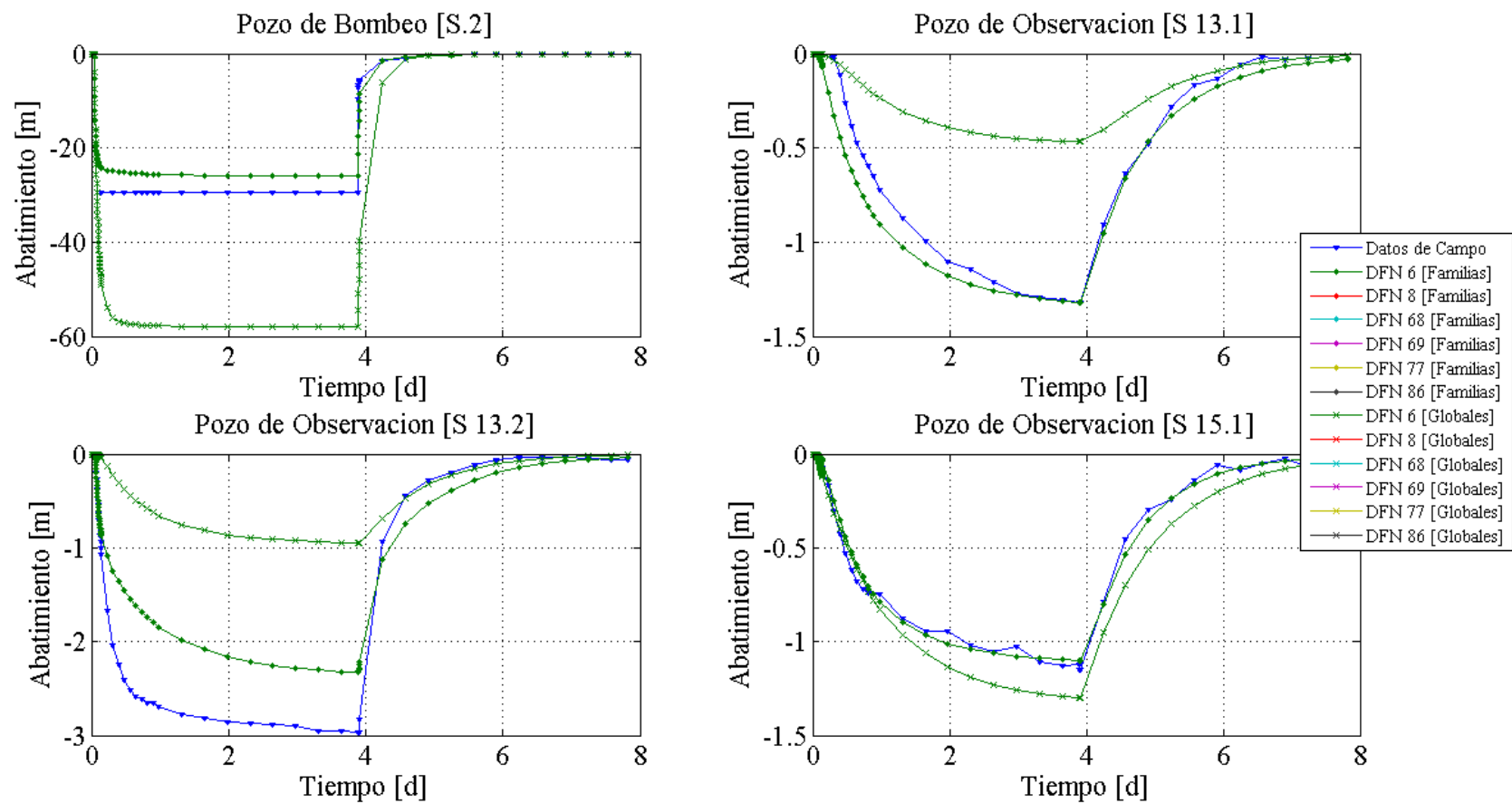


Figura N° 7-3 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 6].

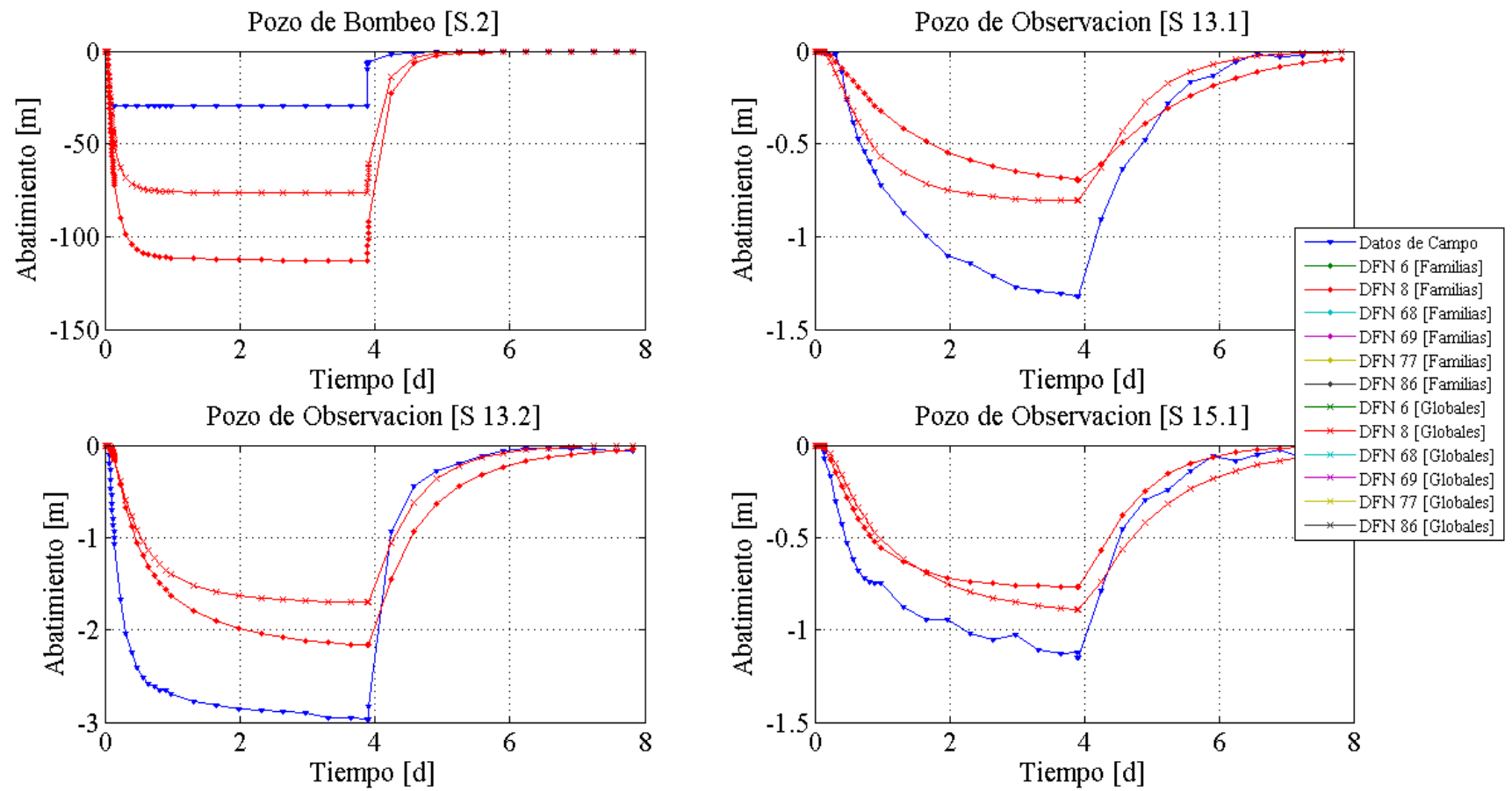


Figura N° 7-4 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 8].

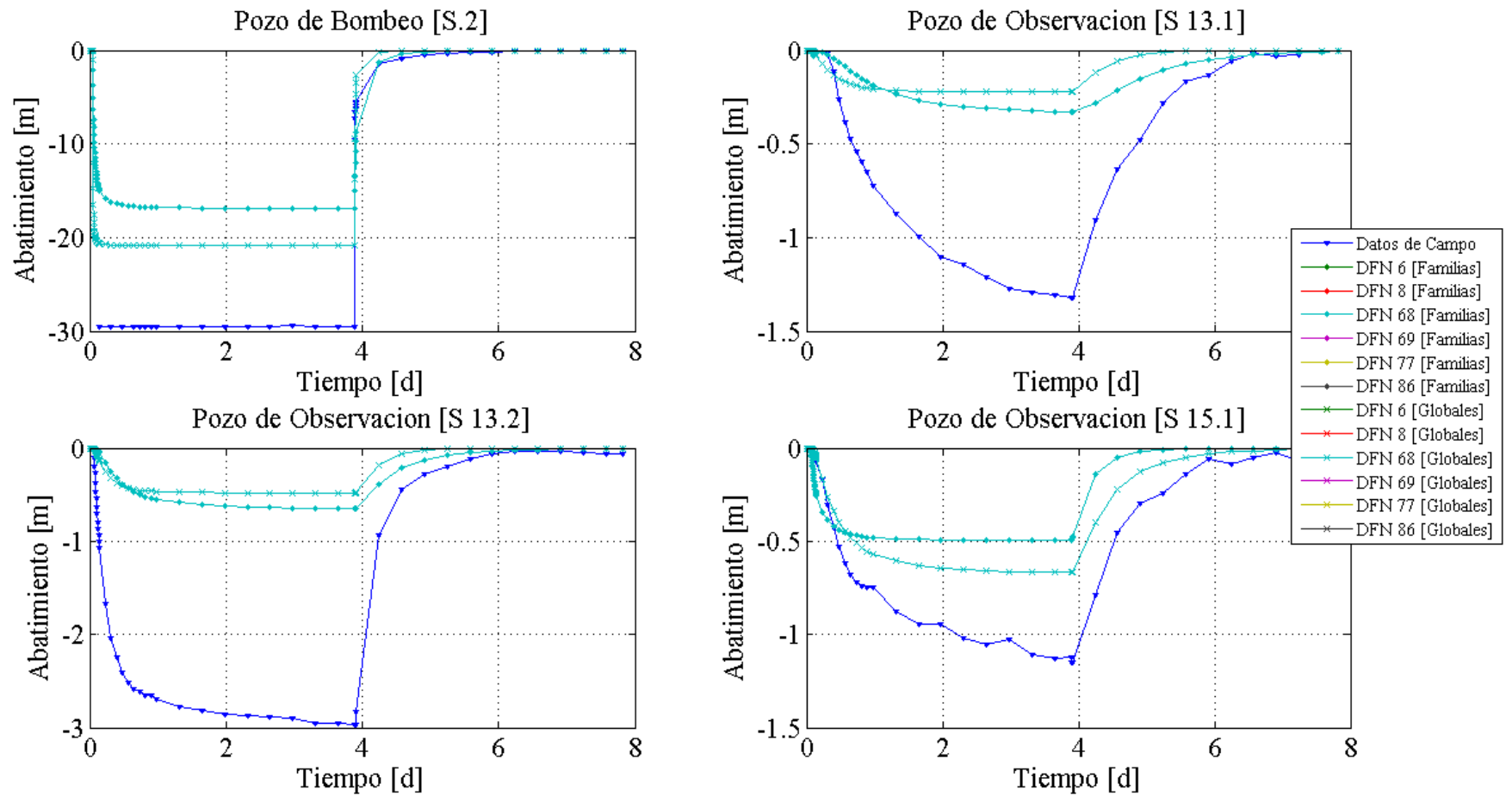


Figura N° 7-5 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 68].

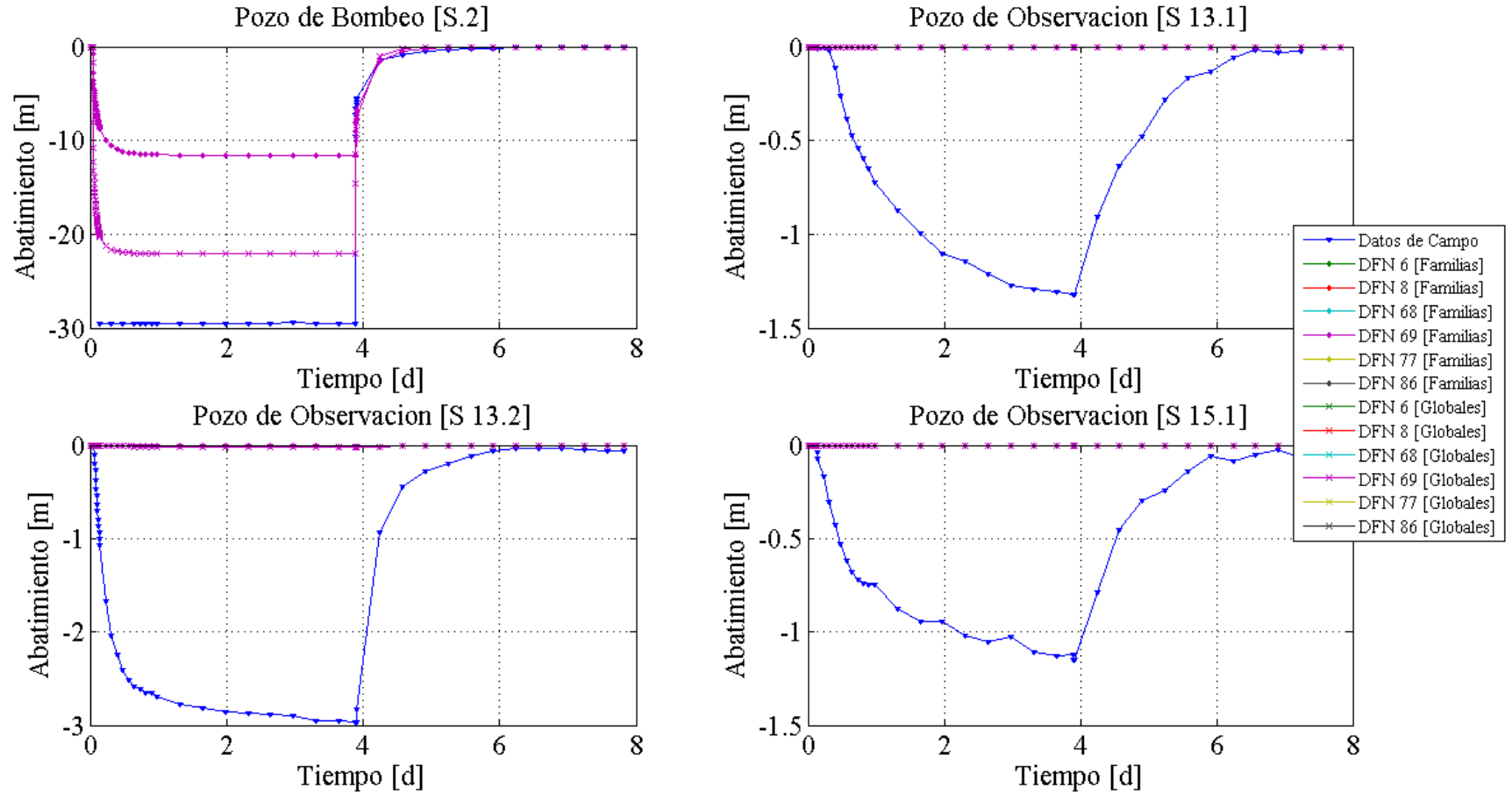


Figura N° 7-6 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 69].

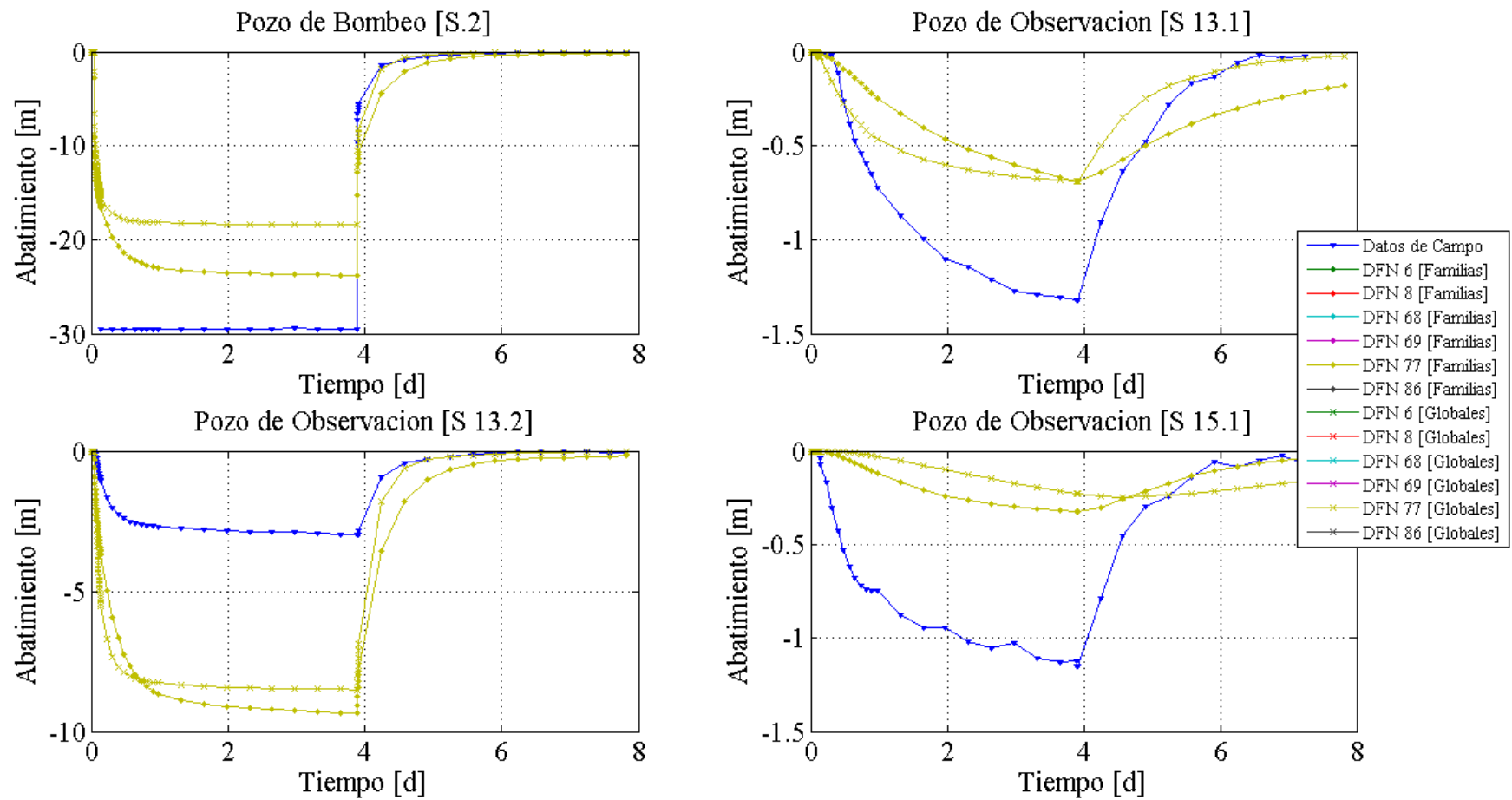


Figura N° 7-7 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 77].

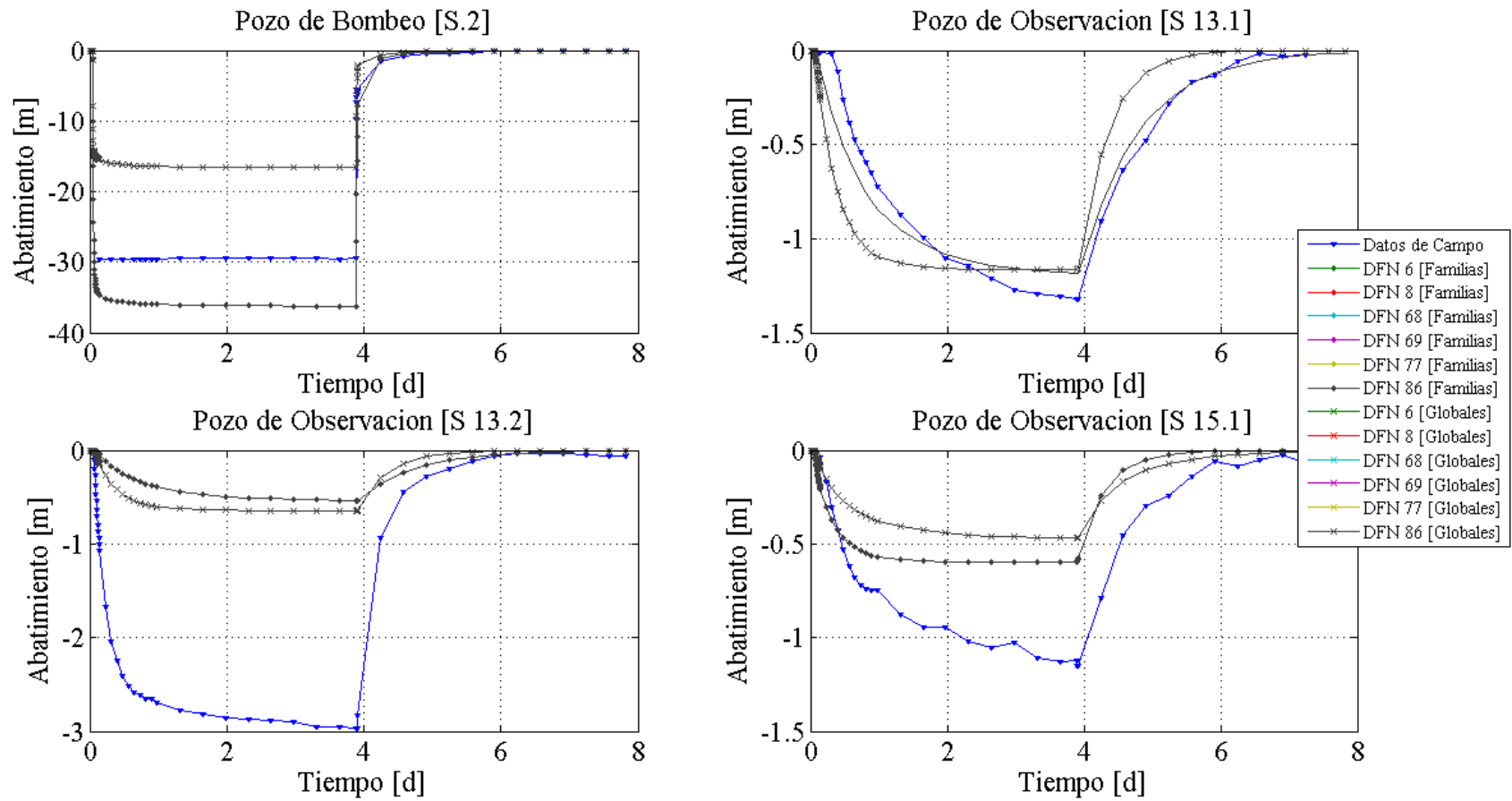


Figura N° 7-8 Validación del modelo utilizando parámetros efectivos de familias y globales [DFN 86].

8 Conclusiones

La complejidad geométrica de estos macizos, sumada a las múltiples simplificaciones del problema físico, hace imposible la caracterización de estos con tan solo un par de parámetros, es necesario mantener la discretización geología con el fin de poder representar el sistema de la forma más real posible. La aproximación por DFN, a diferencia de la aproximación clásica continua, en donde se asume un grado de isotropía, modela los procesos de flujo de forma individual en cada fractura, esto sin duda es un gran adelanto en la caracterización hidráulica de este tipo de formaciones.

La exploración geológica y caracterización geométrica en este tipo de formaciones es bastante dispendiosa y el muestreo solo puede hacerse en zonas limitadas, razón por la cual se tiene un elevado grado de incertidumbre y es necesario trabajar en un entorno estocástico, donde la generación de la geometría se basa en funciones de densidad de probabilidad producto de la exploración geológica.

El acople entre el TRANSIN programa que simula el flujo en redes de fracturas por diferencias finitas y los algoritmos de búsqueda global como el SCE-UA y el PSO permiten la calibración automática de este tipo de formaciones, logrando evadir los problemas de espacios paramétricos complejos en donde se presentan múltiples mínimos locales, zonas con baja sensibilidad y superficies paramétricas no convexas.

Se pudo identificar claramente que si se desea una adecuada representación de este sistema es necesario realizar la mayor discretización posible. Es decir, el trabajar con las cinco familias geológicas identificadas resultó fundamental en la obtención de resultados satisfactorios. Sin embargo, para fines prácticos se deseaba obtener diez parámetros efectivos de familias o dos globales que pudieran reproducir la formación en estudio de la mejor forma posible y esto se logró tras el proceso de escalado.

La optimización de parámetros del modelo resultó exitosa si se tiene en cuenta el elevado nivel de complejidad geométrico. Los parámetros considerados como efectivos permiten analizar los procesos de flujo en la formación Batolítica de manera sencilla, sin la necesidad de recurrir a un elevado nivel de discretización. Este aporte es de vital importancia si se desea realizar el estudio de migración de contaminantes, que claramente requiere del conocimiento de los patrones hidrodinámicos de flujo en esta formación.

Las técnicas de optimización global SCE-UA y PSO resultaron idóneas para este tipo de problemas, dada la gran versatilidad en entornos con multiplicidad de mínimos y superficies paramétricas complejas, que es nuestro tema particular. Como propuesta para la solución de este tipo de casos se sugiere el uso del SCE-UA, debido a sus bondades de ajustes, tiempo de cómputo manejable y excelentes resultados en la convergencia.

Los ajustes de distribución en todos los casos fueron de tipo Log normal, lo que resulta un buen indicador, debido a que las *pdf* utilizadas en la generación de las DFN tienen esta distribución, que es representativa del medio según todo el proceso de prospección geología que se realizó dentro del marco del proyecto HIDROBAP-II.

Con el análisis de sensibilidad paramétrica se pudo identificar claramente la influencia de las familias geológicas, y con ello evaluar cuáles de los parámetros son los que gobiernan la formación. En todos los casos la transmisividad de la familia II resultó el parámetro más identificable, esto quiere decir que la mayoría de los procesos de flujo se llevan a cabo a través de ella y por eso gobierna la mayor parte de los descensos en los niveles de los pozos.

El Upscaling permitió simplificar la complejidad hidrodinámica del medio, logrando pasar de caracterizar los parámetros de flujo en cada fractura, a tener un conjunto de diez valores efectivos en el caso de familias y un par de valores en el caso global. Estos conjuntos de parámetros pueden representar el sistema, sin embargo se sabe que las formas en que fueron generadas la *pdf* de las fracturas tiene un alto grado de incertidumbre dada la estocasticidad del medio y esto hace que al pasar de una DFN a otra la respuesta del sistema sea bastante variable, sin embargo estos valores resultan representativos dentro de las cien generaciones o DFN.

En general la modelación de procesos de flujo en este tipo de formaciones es muy compleja, se deben tener en cuenta demasiadas variables que resultan imposibles de representar dentro de un modelo matemático, todo esto sumado a la limitada información dada la dificultad del muestreo en campo, hace que la aplicabilidad del problema inverso sobre este tipo de formaciones sea muy dispendiosa y demandante en cálculo numérico. Esta metodología que se propuso en el presente trabajo es sin duda la mejor aproximación que puede tener en la caracterización hidráulica en este tipo de medios.

9 Bibliografía

- [1] Donado, J. D. (2009). On multicomponent reactive transport in porous media: From the natural complexity to analytical solutions. *Ph. D. Dissertation* , pp. 27-56.
- [2] Holland, J. H. (1975). *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press, Ann Arbor, Michigan.
- [3] Committee on Fracture Characterization and Fluid Flow, U. N. (1996). *Rock Fractures and Fluid Flow: Contemporary Understanding and Applications*. National Academy Press, Washington.
- [4] Molinero, J. (2001). Testing and validation of numerical models of groundwater flow, solute transport and chemical reactions in fractured granites: A quantitative study of the hydrogeological and hydrochemical impact produced 253 pp. *Enresa, Madrid*.
- [5] Wang, M. Y., & Kulatilake, P. (2008). Understanding of hydraulic properties from configurations of stochastically distributed fracture networks. *Hydrological Processes* , 22(8), 1125-1135.
- [6] Berkowitz, B., Bear, J., & Braester, C. (1988). Continuum Models for Contaminant Transport in Fractured Porous Formations. *Water Resour. Res* , 24(8), 1225-1236.
- [7] Durlafsky, L. J. (1991). Numerical Calculation of Equivalent Grid Block Permeability Tensors for Heterogeneous Porous Media. *Water Resour. Res* , 27(5), 699-708.
- [8] Bear, J. (1993). Modeling flow and contaminant transport in fractured rocks, in *Flow and contaminant transport in fractured media*, edited by J. Bear, C. F. Tsang and G. De Marsily, Academic Press, Inc, San Diego, California.
- [9] Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*, Dover Publications, Inc., New York.
- [10] Abelin, H., Birgersson, L., Gidlund, J., Moreno, L., Agren, T., Widen, H., et al. (1987). 3-D Migration Experiment In Sparsely Fractured Crystalline Rock, Scientific Basis for Nuclear Waste Management XI, Boston, MA, USA.
- [11] Neretnieks, I. (1987). Channeling Effects in Flow and Transport in Fractured Rocks – Some Recent Observations and Models, Geoval, Stockholm.

- [12] Tsang, C. F., & Neretnieks, I. (1998). Flow channeling in heterogeneous fractured rocks. *Rev. Geophys* , 36 (2) 275–298.
- [13] Bourke, P. (1987). Channeling of flow through fractures in rock, Geoval, Stockholm.
- [14] Martinez-Landa, L., & Carrera, J. (2006). A methodology to interpret cross-hole tests in a granite block. *J. Hydrol* , 325(1-4), 222-240.
- [15] Hudson, J. A., & Lapointe, P. R. (1980). Printed-Circuits for Studying Rock Mass Permeability, *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* , 17(5), 297-301.
- [16] Long, J., Remer, J. S., Wilson, C. R., & Witherspoon, P. A. (1982). Porous-Media Equivalents for Networks of Discontinuous Fractures. *Water Resour. Res* , 18(3), 645-658.
- [17] Long, J., & Billaux, D. M. (1987). From Field Data to Fracture Network Modeling: An Example Incorporating Spatial Structure. *Water Resour. Res.* , 23(7), 1201–1216.
- [18] Bodin, J., Delay, F., & de Marsily, G. (2003a). Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 1. fundamental mechanisms. *Hydrogeol. J.* , 11(4), 418-433.
- [19] Bodin, J., Delay, F., & de Marsily, G. (2003b). Solute transport in a single fracture with negligible matrix permeability: 2. mathematical formalism. *Hydrogeol. J.* , 11(4), 434-454.
- [20] Moreno, L., Crawford, J., & Neretnieks, I. (2006). Modelling radionuclide transport for time varying flow in a channel network. *J. Contam. Hydrol* , 86(3-4), 215-238.
- [21] Andersson, J. A. (1984). Stochastic model of a fractured rock conditioned by measured information. *Water Resources Research* , 20(1):79–88.
- [22] Endo, H. K. (1984). Mechanical transport in two-dimensional networks of fractures. Ph. D. Thesis, University of California, Berkeley.
- [23] Robinson, P. C. (1984). Connectivity, flow and transport in network models of fractured media. Ph.D. Thesis, St. Catherine's College, Oxford University.
- [24] Smith, L., & Schwartz, F. W. (1984). An analysis of the influence of fracture geometry on mass transport in fractured media. *Water Resources Research* , 20(9):1241–1252.
- [25] Endo, H. K., Long, J. C., Wilson, C. K., & Witherspoon, P. A. (1984). A model for investigating mechanical transport in fractured media. *Water Resources Research* , 20(10):1390–1400.
- [26] Elsworth, D. (1986a). A hybrid boundary-finite element analysis procedure for fluid flow simulation in fractured rock masses. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 10(6):569–584.
- [27] Jing, L., & Stephansson, O. (2007). Discrete Fracture Network (DFN) Method. *Developments in Geotechnical Engineering* , Volume 85, Pages 365-398.

- [28] Lanaro, F., Jing, L., & Stephansson, O. (1998). 3-D laser measurements and representation of roughness of rock fractures. In: Rossmanith, H.-P. (ed.), Proc. of the 3rd Int. Conf. on Mechanics of Jointed and Faulted Rock (MJFR-3), April 6–9, Vienna, Austria. *Balkema, Rotterdam*, pp. 185–189.
- [29] Lanaro, F., Jing, L., & Stephansson, O. (1999). Scale dependency of roughness and stationarity of rock joints. Proc. 9th Cong. of International Society for Rock Mechanics, Paris. Vol. 2, pp. 1291–1295.
- [30] Fardin, N., Jing, L., & Stephansson, O. (2001a). Heterogeneity and anisotropy of roughness of rock joints. Proc. of EUROCK 2001, Finland., June, 2001, *Balkema, Rotterdam*. pp. 223–227.
- [31] Fardin, N., Stephansson, O., & Jing, L. (2001b). The scale dependence of rock joint surface roughness. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 38(5):659–669.
- [32] Fardin, N., Stephansson, O., & Jing, L. (2003). Scale effect on the geometrical and mechanical properties of rock joints. International Society of Rock Mechanics, 10th Congress-Technology roadmap for rock mechanics. South African Institute of Mining and Metallurgy. 1:319–324.
- [33] Feng, Q., Fardin, N., Jing, L., & Stephansson, O. (2003). A new method for in-situ non-contact roughness measurement of large rock fracture surfaces. *Rock Mechanics and Rock Engineering*. 36(1): 3–25.
- [34] Brown, S. R., & Scholz, C. H. (1985). Broad bandwidth study of the topography of natural rock surfaces. *Journal of Geophysical Research*, 90(B14):12575–12582.
- [35] Keller, K., & Bonner, B. P. (1985). Automatic, digital system for profiling rough surfaces. *Review of Scientific Instruments*, 56:330–331.
- [36] Poon, C. Y., Sayles, R. S., & Jones, T. A. (1992). Surface measurement and fractal characterization of naturally fractured rocks. *Journal of Physics D*, 25(8):1269–75.
- [37] Johns, R. A., Steude, J. S., Castenier, L. M., & Roberts, P. V. (1993). Non-destructive measurements of fracture aperture in crystalline rock cores using X-ray computed tomography. *Journal of Geophysical*, 98(B2):1889–1990.
- [38] Brown, S. R. (1995). Simple mathematical model of a rough fracture. *Journal of Geophysical Research*, 100(B4):5941–5952.
- [39] Schmittbuhl, J., Schmitt, F., & Scholz, C. H. (1995). Scaling invariance of crack surfaces. *Journal of Geophysical Research*, 100(B4):5953–73.
- [40] Tsang, Y. W. (1992). Usage of equivalent apertures for rock fractures as derived from hydraulic and tracer tests. *Water Resources Research*, 28(5):1451–5.

- [41] Balzarini, M., Nicula, S., Mattiello, D., & Aliverti, E. (2001). Quantification and description of fracture network by MRI image analysis. *Magnetic Resonance Imaging*, 19(3–4):539–541.
- [42] Dershowitz, W. S. (1984). *Rock joint systems*, 764 pp, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge.
- [43] Dershowitz, W. S. (1993). Geometric conceptual models for fractured rock masses: Implications for groundwater flow and rock deformation. In: Sousa L. R. E., and Grossmann, N. E. (eds), *Eurock' 93*, Vol. 1, pp. 71–76. Balkema, Rotterdam.
- [44] Billaux, D., Chiles, J. P., Hestir, K., & Long, J. C. (1989). Three-dimensional statistical modeling of a fractured rock mass – an example from the Fanay-Auge's Mine. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science and Geomechanics Abstracts*, 26(3/4):281–299.
- [45] Mauldon, M. (1998). Estimating mean fracture trace length and density from observations in convex windows. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 31(4):201–216.
- [46] Mauldon, M., Dunne, W. M., & Rohrbaugh, M. B. (2001). Circular scanlines and circular windows: new tools for characterizing the geometry of fracture traces. *Journal of Structural Geology*, 23(2–3): 247–258.
- [47] Bodin, J., Porel, G., Delay, F., Ubertosi, F., Bernard, S., & de Dreuzy, J. R. (2007). Simulation and analysis of solute transport in 2D fracture/pipe networks: The SOLFRAC program. *J. Contam. Hydrol*, 89(1-2), 1-28.
- [48] Neuman, S. P. (2005). Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks. *Hydrogeol. J.*, 13(1), 124-147.
- [49] Amadei, B., & Illangasekare, T. (1994). A mathematical model for flow and transport in non-homogeneous rock fractures, *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. Geomech.* 31 719–731.
- [50] Moreno, L., Tsang, Y. W., Tsang, C. F., Hale, F. V., & Neretnieks, I. (1988). Flow and tracer transport in a single fracture: A stochastic model and its relation to some field observations. *Water Resour. Res.*, 24(12), 2003-2048.
- [51] Tsang, Y. W., & Tsang, C. F. (1989). Flow channeling in a single fracture as a two-dimensional strongly heterogeneous permeable medium. *Water Resour. Res.*, 25 (9) 076–2080.
- [52] Nordqvist, A. W., Tsang, Y. W., Dverstorp, J., & Andersson, J. (1992). A variable aperture fracture network model for flow and transport in fractured rocks. *Water Resour. Res.*, 28 1703–1713.
- [53] Alcolea, R. A. (1999). Metodo Hibrido entre Marquardt y Simulated Annealing para la resolucion del problema inverso. Aplicado a hidrogeologia Subterranea.

- [54] Carrera, J. M. (1993). Groundwater inverse problem. Discussion on geostatistical formulation and validation. *Hydrogeologie* , Vol 4, 313-324.
- [55] Medina, A. G. (1996). ``TRANSIN-II. Fortran code for solving the coupled flow and transport inverse problem in saturated condition''. *El Berrocal Project European Commision Contra n°F12W/CT91/0080* , Topical Report 16, volumen IV.
- [56] Rivas, P., Hernán, P., Bruno, J., Carrera, J., Gómez, P., Guimera, J., et al. (1997). El Berrocal Poject: Characterization and validation of natural radionuclide migartion processes under real conditions on the fissured granic environmet, 522 pp, Nuclear Science and Technology, EUR 17478, D.-G. S. R. a. *Development, European Commission, Luxembourg*.
- [57] Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. *Adv. Water Resour.* , 25(8-12), 861-884.
- [58] Witherspoon, P. A., Wong, J., Iwai, K., & Gale, J. (1980). Validity of cubic law for fluid in a deformable rock fracture. *Water Resour. Res* , 16(6), 1016-1024.
- [59] Bear, J., & Berkowitz, B. (1987). Groundwater flow and pollution in fractured rock aquifers, in *Developments of Hydraulic Engineering*, edited by I. P. Novak, Elsevier.
- [60] Tsang, Y. W., & Witherspoon, P. A. (1985). Effects of fracture roughness on fluid flow through a single deformable fracture, paper presented at 17th International Congress of IAH, IAH, Tucson.
- [61] Moreno, L., & Neretnieks, I. (1993). Fluid-Flow and Solute Transport in a Network of Channels. *J. Contam. Hydrol.* , 14(3-4), 163-192.
- [62] Tsang, Y. W., Tsang, C. F., Hale, F. V., & Dverstorp, B. (1996). Tracer transport in a stochastic continuum model of fractured media. *Water Resour. Res* , 32(10), 3077-3092.
- [63] Oda, M., & Hatsuyama, Y. (1985). Permeability Tensor forjointed rock masses, paper presented at Proc. Int. Symp. on Fund, of Rock Joints, 303-312, Bjorklinden.
- [64] Berkowitz, B., & Scher, H. (2001). The role of probabilistic approaches to transport theory in heterogeneous media. *Transport Porous Med* , 42(1-2), 241-263.
- [65] Herbert, A., Gale, J., Lanyon, G., & MacLeod, R. (1991). Modeling for the Stripa site characterization and validation drift inflow: prediction of flow through fractured rock., SKB Report 91-35, pp, Swedish Nuclear Power and Waste Management Co., Stockholm.
- [66] Sudicky, E. A., & McLaren, R. G. (1992). The Laplace Transform Galerkin Technique for Large-Scale Simulation of Mass-Transport in Discretely Fractured Porous Formations. *Water Resour. Res* , 28(2), 499-514.
- [67] Dershowitz, W. S., Wallmann, P., & Kindred, S. (1991). Discrete Fracture Network for the Stripa Site Characterization and Validation Drift Inflow Predictions, 140 pp, SKB Stripa

Technical Report, TR-91-16, SKB, Swedish Nuclear Power and Waste Management Co., Stockholm.

[68] Long, J. C., Mauldon, A., Nelson, K., Martel, S., Fuller, P., & Karasaki, K. (1992b). Prediction of flow and drawdown for the site characterization and validation site in the Stripa mine, SKB Report 92-05, Swedish Nuclear Power and Waste Management Co, Stockholm.

[69] Cacas, M. C., Ledoux, E., de Marsily, G., Tillie, B., Barbreau, A., Durand, E., et al. (1990). Modeling Fracture Flow With a Stochastic Discrete Fracture Network: Calibration and Validation 1. The Flow Model. *Water Resour. Res.* , 26(3), 479–489.

[70] Smith, L., Clemo, T., & Robertson, M. (1990). New approaches to the simulation of field scale solute transport in fractured rocks, paper presented at Proceedings of the 5th Canadian/American Conference on Hydrogeology, National Waterwell Association., Dublin, Oh.

[71] Long, J. C., Doughty, C., Hestir, K., & Martel, S. (1992a). Modelling heterogeneous and fractured reservoirs with inverse methods based on iterated function system, in Reservoir Characterization III, edited by B. Linville, Penwell Books, Tulsa, Oklahoma.

[72] Vives, L., Sánchez-Vila, X., Ruiz, E., Carrera, J., Javier Elorza, F., Bajos, C., et al. (2004). APLICACIÓN DEL PROBLEMA INVERSO EN LA SIMULACIÓN DEL FLUJO DE AGUA SUBTERRÁNEA Y EL TRANSPORTE DE SOLUTOS EN MODELOS DISCRETOS DE FRACTURAS. *Mecánica Computacional Vol. XXIII* .

[73] Cacas, M. C. (1989). Développement d'un modèle tridimensionnel stochastique discret pour la simulation de l'écoulement et des transports de masse et de chaleur en milieu fracturé Ph. D. Thesis, Ecole des Mines de Paris, Fointanebleau.

[74] Nita, R., Ruiz, E., Sanchez-Vila, X., Elorza, F. J., & Carrera, J. (2004). Calibration of a DFN model for the simulation of groundwater flow and solute transport in fractured geological media. *Geophys. Res. Abstr.* , 6, 07810, *SRef-ID: 1607-7962/gra/EGU04-A-07810*.

[75] Geman, S., & Geman, D. (1984). Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. *IEEE T. Pattern Anal.* , 6(6), 721-741.

[76] Ouenes, A. (2000). Practical application of fuzzy logic and neural networks to fractured reservoir characterization. *Comput. Geosci.* , 26(8), 953-962.

[77] Tran, N. H., & Tran, K. (2007). Combination of fuzzy ranking and simulated annealing to improve discrete fracture inversion. *math. Comput. Model.* , 45(7-8), 1010-1020, doi:10.1016/j.mcm.2006.08.013.

[78] Dershowitz, W. S., & Einstein, H. H. (1988). Characterizing rock joint geometry with joint system models,. *Roc Mech. Rock Eng.* , 21(1), 21-51.

- [79] Paredes, C., & Flórez, F. (2001). Evaluación Eficiente de la densidad de fracturación. *B. Geol. Minero* , 1(112), 51-64.
- [80] Bonnet, E., Bour, O., Odling, N. E., Davy, P., Main, I., Cowie, P., et al. (2001). Scaling of fracture systems in geological media. *Rev. Geophys.* , 39(3), 347-383.
- [81] Conrad, F., & Jacquin, C. (1973). Représentation d'un réseau bidimensionnel de - fractures par un modèle probabiliste: Application au calcul des grandeurs géométriques des blocs matriciels,. *Reveu de l'Institute Français du Pétrole* , 28(6), 843-890.
- [82] Baecher, G. B., & Lanney, N. A. (1978). Trace length biases in joint surveys, paper presented at 19th U.S. Symposium on Rock Mechanics, AIME. 56-65.
- [83] Veneziano, D. (1978). Probabilistic modelo of joints in rock, in MIT, edited, Cambridge.
- [84] La Pointe, P., & Hudson, J. A. (1985). Characterization and interpretation of rock mass joint patterns, Special Paper 199, B. Series, Geological Society of America, Boulder, CO.
- [85] Pincus, H. J. (1951). Statistical methods applied to the study of rock fractures. *Geol. Soc. Am. Bull.* , 6281-130.
- [86] Rodgers, J. (1952). Use of equal-area or other projections in the statistical treatment of joints. *Geol. Soc. Am. Bull.* , 63(4), 427-429.
- [87] Watson, G. S. (1966). The statistics of orientation data. *Geology* , 74(5), 786-797.
- [88] Jupp, P. E., & Mardia, K. V. (1989). A unified view of the theory of directional statistics, 1975-1988. *Int. Stat. Rev.* , 57(3), 261-294.
- [89] Solé-Sugrañes, L. (1977). Algunas consideraciones sobr el tratamiento estadístico de datos direccionales en geología. *Acta Geol. Hisp.* , 12(4-6), 69-77.
- [90] Fisher, N. I., Lewis, T., & Embleton, J. J. (1987). Statistical analysis of spherical data, Cambridge University Press.
- [91] Ubertosi, F., Delay, F., Bodin, J., & Porel. (2007). new method for generating a pipe network to handle channelled flow in fractured rocks. *UMR CNRS 6532 HydrASA, faculté des sciences, université de Poitiers, bâtiment des sciences naturelles, 40, avenue du Recteur-Pineau, 86022 Poitiers cedex, France* .
- [92] Miller, W. M., Rivas, P., Perez del Villar, L., Gomez, P., de la Cruz, B., Hernan, P., et al. (1994). The International El Berrocal Project. Fourth International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of ,\ctinides and Fission Products in the Geosphere, SC, USA, 12 17 December 1993. R. Ottenberg Verlag, Mtinchen. pp 805 812.
- [93] Dynamic Graphics. (1992). EarthVision 2.0 User's Guide. Dynamic Graphics. Alameda, CA.

- [94] White, M. J., & del Olmo, C. (1996). The Application of Geological Computer Modelling Systems to the Characterisation and Assessment of Radioactive Waste Repositories. Proceedings of the International Conference on Deep Geological Disposal of Radioactive Waste. *Canadian Nuclear Society, Winnepeg, Manitoba. Canada* , pp. 3-2235 3-244.
- [95] White , M. J., Murray, T., del Olmo, C., & Chapman, N. A. (1996). Modelling the Geological Environment of Radioactive Waste Repositories The Use of Computer Mapping, Modelling and Visualization Tools in Site Characterisation Proceedings of the European TopSca '96 Conference. *Stockholm, Sweden* , Volume 11, pp. 156 159.
- [96] Briggs, I. C. (1974). Machine contouring using minimum curvature Geophysics. 39 (1), 39 48.
- [97] ENRESA. (1996a). El Berrocal Project. Charactrization and validation of natural radionuclide migration processes under real conditions of the fissured granitic environment. European Commission Contract Number F12W/CT91/0080. *Topical Reports Volume I. Geological Studies. ENRESA. Madrid. Spain.*
- [98] White, M. J. (1998). Visualization of the El Berrocal granite: application to rock engineering. *Engineering Geology* 49 , 185 194.
- [99] ENRESA. (1996c). El Berrocal Project. Charactrization and validation of natural radionuclide migration processes under real conditions of the fissured granitic environment. European Commission Contract Number F12W/CT91/0080. *Topical Reports Volume IV. Hydrological Modelling and Code Development. ENRESA, Madrid, Spain.*
- [100] Deutsch, C. V., & Cockerham, P. W. (1994). Practical considerations in the application of simulated annealing to stochastic simulation. *Math. Geol.* , 26(1), 67-82.
- [101] Elorza, F. J., Nita, R., Flórez, F., Paredes, C., Vives, L., Ruiz, E., et al. (2003). Simulación hidrogeológica estocástica de medios geológicos fracturados in *Geoestadística y modelos matemáticos en hidrogeología*, edited by J. Mateu, M. Chica-Olmo and I. Morell., p. 312, Universitat Jaume I, Castellón.
- [102] ENRESA. (1996). *El Berrocal Project: characterization and validation of natural radionuclide migration processes under real conditions on the fissured granitic environment.* Empresa nacional de residuos radioactivos, s.a.
- [103] Huyakorn, P. S., & Thomas and B. M. Thompson, S. D. (1984). Techniques for making finifite elements competitive in modeling flow in variably saturated porous media. *Water Resour. Res.* , 20 (8), 1099-1115.
- [104] Dautray, R., & Lions, J. L. (1988). Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques. *Ed. Masson* .
- [105] Piner, G. F., & Gray, W. G. (1977). Finite element simulation in surface and subsurface hidrology. *Academic Press N. Y.* , 295 pp.

- [106] Yeh, W.-G. (1986). Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem. *Water Resour. Res.* , 22(2), 95-108.
- [107] Carrera, J. (1987). State of the Art of the inverse problem Applied to the flow and solute Transport Equations. *Groundwater Flow and Quality Modelling (Custodio et al. Eds.), reidel, Dordrecht* , 549-583.
- [108] Woodbury, A. D., & Smith, L. (1988). Simultaneous inversion of hydrogeology and thermal data, 2, incorporation of thermal data. *Water Resour. Res.* , 24 (3), 356-372.
- [109] Xiang, Y., Sykes, J. F., & Thompson, N. R. (1993). Parameter estimator for model fitting in groundwater flow and solute transport simulation. *Water Resour. Res.* , 29(6), 1661-1673.
- [110] Edwards, A. (1972). Likelihood. *University Press, Cambridge* .
- [111] Carrera, J. (1984). Estimation of aquifer parameter under transient and steady state conditions. Ph. D. dissertation, Dep. of Hydro. and. *Water resour. Univ. of Arizona, Tucson* .
- [112] Medina, A., Galarza, G., & Carrera, J. (1996). TRANSIN-II. Fortran code for solving the coupled flow and transport inverse problem in saturated conditions”, taken from the topical report hydrogeological modelling and code development. *El Berrocal Project* , Volume IV, edited by ENRESA.
- [113] Carrera, J., & Neuman, S. P. (1986). Estimation of aquifer parameters under transient and steady-state conditions, 1. Maximum likelihood method incorporating prior information. *Water Resour. Res.* , 22(2) ,199-210.
- [114] Marquardt, D. W. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *J. Soc. Indust. Appl. Math* , Vol. 11. n.2.
- [115] Cooley, R. L. (1985). Regression modelling of Groundwater flow. *U.S.G.S.- Open-File Report* , 85-180, 450 pp.
- [116] Dixon, L. C., & Szego, G. P. (1978). Editors, Toward Global Optimization 2, North-Holland, Amsterdam, Holland.
- [117] Dixon, L. C., & Szego, G. P. (1978). The Global Optimization Problem: An Introduction, Toward Global Optimization 2, Edited by L. C. W. Dixon and G. P. Szeg6, North-Holland, Amsterdam, Holland. 1-15.
- [118] Torn, A., & Zilinskas, A. (1989). Global Optimization, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- [119] Sorooshian, S., Gupta, V. K., & Fulton, J. L. (1983). Evaluation of Maximum Likelihood Parameter Estimation Techniques .for Conceptual Rainfall-Runoff Models: Influence of Calibration Data Variability and Length on Model Credibility. *Water Resources Research* , Vol. 19, pp. 251-259.

- [120] Gupta, V. K., & Sorooshian, S. (1983). Uniqueness and Observability of Conceptual Rainfall-Runoff Model Parameters: The Percolation Process Examined. *Water Resources Research* , Vol. 19, pp. 269-276.
- [121] Gupta, V. K., & Sorooshian, S. (1985). The Automatic Calibration of Conceptual Catchment Models Using Derivative-Based Optimization Algorithms. *Water Resources Research* , Vol. 21, pp. 473-486.
- [122] Gomulka, J. (1992). Deterministic Versus Probabilistic Approaches to Global Optimization, jbr Conceptual Rainfall-Runoff Models. *Water Resources Research* , Vol. 28, pp. 1015-1031.
- [123] Becker, R. W., & Lago, G. V. (1970). A Global Optimization Algorithm, Proceedings of the 8th Allerton Conference on Circuits and Systems Theory, Monticello Illinois. pp. 3-12.
- [124] Torn, A. (1978). A Search Clustering Approach to Global Optimization, Toward Global Optimization 2, Edited by L. C. W. Dixon and G. P. Szegö, North-Holland, Amsterdam, Holland. pp. 49-62.
- [125] Rinnooy-Kan, A. H., & Tummer, G. T. (1987). Stochastic Global Optimization Methods, Part I: Clustering Methods, Mathematical Programming. 1987 , Vol. 39, pp. 27-56.
- [126] Price, W. L. (1978). A Controlled Random Search Procedure for Global Optimization Toward Global Optimization 2, Edited by L. C. W. Dixon and G. P. Szegö North-Holland, Amsterdam, Holland. pp. 71-84.
- [127] Price, W. L. (1983). Global Optimization by Controlled Random Search, Journal of Optimization Theory and Applications. Vol. 40, pp. 333-348.
- [128] Price, W. L. (1987). Global Optimization Algorithms for a CAD Workstation, Journal of Optimization Theory and Applications. Vol. 55, pp. 133-146.
- [129] Holland, J. H. (1975). Adaptation in Natural and Artificial Systems, University of Michigan Press, Ann Arbor, Michigan.
- [130] Duan, Q. Y., Gupta, V. K., & SOROOSHIAN, S. (1993). Shuffled Complex Evolution Approach for Effective and Efficient Global Minimization. *JOURNAL OF OPTIMIZATION THEORY AND APPLICATIONS* , Vol. 76, No. 3.
- [131] Nelder, J. A., & Mead, R. (1965). Simplex Method for Function Minimization. *Computer Journal* , Vol. 7, pp. 308-313.
- [132] Kennedy, J., & Eberhart, R. C. (1995). Particle swarm optimization. In *Proceedings of the IEEE international conference on neural networks IV* , (pp. 1942-1948). Piscataway: IEEE.

- [133] Heppner, H., & Grenander, U. (1990). A stochastic non-linear model for coordinated bird flocks. In S. Krasner (Ed.). *The ubiquity of chaos* , pp. 233–238. Washington: AAAS.
- [134] Eberhart, R. C., & Kennedy, J. (1995). A new optimizer using particle swarm theory. In *Proceedings of the sixth international symposium on micro machine and human science* , pp. 39–43, Nagoya, Japan. Piscataway: IEEE.
- [135] Eberhart, R. C., Simpson, p. K., & Dobbins, R. W. (1996). Computational intelligence PC tools. *Boston: Academic Press*.
- [136] Shi, Y., & Eberhart, R. C. (1998b). A modified particle swarm optimizer. In *Proceedings of the IEEE international conference on evolutionary computation* , pp. 69–73. Piscataway: IEEE.
- [137] Reynolds, C. W. (1987). Flocks, herds, and schools: a distributed behavioral model. *Computer Graphics* , 21(4), 25–34.
- [138] Suganthan, P. N. (1999). Particle swarm optimiser with neighbourhood operator. In *Proceedings of the IEEE congress on evolutionary computation (CEC)* , pp. 1958–1962. Piscataway: IEEE.
- [139] Peram, T., Veeramachaneni, K., & Mohan, C. (2003). Fitness-distance ratio based particle swarm optimization. In *Proceedings of the IEEE swarm intelligence symposium (SIS)* , pp. 174–181, Indianapolis, IN. Piscataway: IEEE.
- [140] Janson, S., & Middendorf, M. (2005). A hierarchical particle swarm optimizer and its adaptive variant. *IEEE Transactions on System Man and Cybernetics B* , 35(6), 1272–1282.
- [141] Goldberg, D. E. (1989). Genetic algorithms in search optimization and machine learning. *Addison-Wesley Publishing Company, Inc., USA* .
- [142] Franks, S., Gineste, P., Beven, K. J., & Merot, P. (1998). On constraining the predictions of a distributed model: the incorporation of fuzzy estimates of saturated areas into the calibration process. *Water Resources Research* , 34, 787-797.
- [143] Spear, R. C., & Homberger, G. M. (1980). Eutrophication in Peel Inlet, II, Identification of critical uncertainties via generalized sensitivity analysis. *Water Resources Research* , 14, 43-49.
- [144] Homberger, G. M., & Spear, R. C. (1981). An approach to the preliminary analysis of environmental systems. *Journal of Enviromental Management* , 12, 7-18.
- [145] Beven, K. J., & Binley, A. M. (1992). The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction. *hydrological Processes* , 6, 279-298.
- [146] Free, J., Beven, K. J., & Ambroise, B. (1996). Bayesian estimation of uncertainty in runoff prediction and the value of data: An application of the GLUE approach. *Water Resources Research* , 32(7), 2161-2173.

- [147] Howard, S., & Wheeler, H. (2004). Monte Carlo Analysis Toolbox User Manual, Version 5. *Department of Civil and Environmental Engineering Imperial College London London, SW7 2BU, UK*.
- [148] Andersson, J., & Dverstorp, B. (1987). Conditional simulations of fluid flow in three-dimensional networks of discrete fractures. *Water Resources Research*, 23(10):1876–1886.
- [149] Dershowitz, W. S., & Einstein, H. H. (1987). Three-dimensional flow modelling in jointed rock masses. In: Montreal, Canada. Herget, G. and Vongpaisal, S. (eds) Proc. of 6th Cong. ISRM, Vol. 1., pp. 87–92.
- [150] Elsworth, D. (1986b). A model to evaluate the transient hydraulic response of three-dimensional sparsely fractured rock masses. *Water Resources Research*, 22(13), 1809–1819.
- [151] Herbert, A. W. (1996). Modelling approaches for discrete fracture network flow analysis. In: Stephansson, O., Jing, L. and Tsang, C.-F. (eds), Coupled thermo-hydro-mechanical processes of fractured media mathematical. *Elsevier, Amsterdam*, pp. 213–229,.
- [152] Herbert, A. W. (1994). NAPSAC (Release 3.0) summary document. AEA D&R 0271 Release 3.0, AEA Technology, Harwell, UK.
- [153] Kennedy, J. (1998). The behavior of particles. In V.W. Porto, N. Saravanan, D.Waagen & A. E. Eiben (Eds.). *Lecture notes in computer science. Evolutionary programming VII: proceedings of the 7-th annual conference on evolutionary programming*, pp. 581–589. San Diego, CA. Berlin: Springer.
- [154] Koyama, T., Fardin, N., Jing, L., & Stephansson, O. (2006). Numerical simulation of shear-induced flow anisotropy and scale-dependent aperture and transmissivity evolution of rock fracture replicas. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 43(1), 89–106.
- [155] Koyama, T., Fardin, N., & Jing, L. (2004). Shear-induced anisotropy and heterogeneity of fluid flow in a single rock fracture with translational and rotary shear displacements – a numerical study. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(Suppl.). Paper 2A 08.
- [156] Stratford, R. G., Herbert, A. W., & Jackson, C. P. (1990). A parameter study of the influence of aperture variation on fracture flow and the consequences in a fracture network. In: Barton, N. and Stephansson, O. (eds), Rock Joints. *Balkema, Rotterdam*, pp. 413–422.
- [157] Tsang, Y. W., & Tsang, C. F. (1987). Channel model of flow through fractured media. *Water Resources Research*, 22(3):467–479.
- [158] Tsang, Y. W., & Tsang, C. F. (1988). Neretnieks, I. and Moreno, L., Flow and tracer transport in fractured media: A variable aperture channel model and its properties. *Water Resources Research*, 24(12):2049–2060.

- [159] Wilcock, P. (1996). The NAPSAC fracture network code. In: Stephansson, O., Jing, L. and Tsang, C.-F. (eds), *Coupled thermo-hydro-mechanical processes of fractured media*. Elsevier, Rotterdam , pp. 529–538.
- [160] Yeo, I. W., De Freitas, M. H., & Zimmerman, R. W. (1998). Effect of shear displacement on the aperture and permeability of a rock fracture. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*. 35(8):1051–1070.
- [161] Liang, J. J., & Suganthan, P. N. (2005). Dynamic multiswarm particle swarm optimizer (DMS-PSO). In *Proceedings of the IEEE swarm intelligence symposium (SIS)* , pp. 124–129. Piscataway: IEEE.