

Trabajo Fin de Máster

INFLUENCIA DE LA HETEROGENEIDAD ESPACIAL DE LA CONDUCTIVIDAD HIDRÁULICA EN MODELOS DE AGUA SUBTERRÁNEA



**Intensificación:
ANÁLISIS DE SISTEMAS DE RECURSOS HÍDRICOS**

Autor:
ARNOLD JERSON CARRASCO JOCOPE

Tutor:
J. JAIME GÓMEZ HERNÁNDEZ

MAYO, 2021



**UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA**

máster en ingeniería
hidráulica y medio ambiente
mihma

Resumen del Trabajo de Fin de Máster

Datos del proyecto
Título del TFM en español: Influencia de la heterogeneidad espacial de la conductividad hidráulica en modelos de agua subterránea
Título del TFM en inglés: Influence of spatial heterogeneity of hydraulic conductivity in groundwater models
Título del TFM en Valenciano: Influència de l'heterogeneïtat espacial de la conductivitat hidràulica en models d'aigua subterrània
Alumno: Arnold Jerson Carrasco Jocope.
Tutor: J. Jaime Gómez Hernández
Cotutor/es:
Director experimental:
Fecha de Lectura: Mayo, 2021

Resumen

En español (máximo 5000 caracteres)

La gestión de los recursos hídricos ha tomado gran importancia desde hace varios años, de entre ellos se está poniendo especial atención al agua subterránea, debido a la cantidad de recurso disponible y a la sensibilidad de esta a procesos naturales y/o antropogénicos. Una práctica que se ha vuelto común entre los profesionales durante la evaluación de recursos hidrogeológicos es la asunción de modelos determinísticos únicos, para la caracterización de la heterogeneidad de los parámetros que influyen directa e indirectamente en la modelación de formaciones hidrogeológicas, dejando en aplicaciones teóricas el uso de modelos estocásticos.

El objetivo del presente trabajo es demostrar la diferencia al aplicar enfoques determinísticos y estocásticos al modelar el flujo y/o transporte. Para tal cometido se utiliza una sección bidimensional en el plano xz, de un acuífero sintético con una extensión de 1000 metros de longitud y 30 metros de altura, así como 14 datos duros de conductividad hidráulica.

Para modelar la heterogeneidad de la conductividad hidráulica se aplican técnicas geoestadísticas como estimación (krigeado ordinario) y simulación (simulación gaussiana secuencial), en el segundo caso se generan 100 simulaciones equiprobables condicionadas a los datos proporcionados.

La construcción del modelo numérico de flujo se realiza con el código MODFLOW, con una discretización de 30 capas, 1 fila y 100 columnas con celdas de tamaño ($\Delta x = 10$, $\Delta y = 1$, $\Delta z = 10$), simulándose 3 períodos cuyas duraciones corresponden a 1 segundo, 10 días y 80 años. Para la solución del transporte se emplea el código MT3D, considerándose predominante el movimiento advectivo, se toma la condición de frontera de primer tipo o Dirichlet (en el borde izquierdo) estipulada para la solución del flujo como fuente disponible de contaminante, dado que no se está inyectando contaminante directamente al sistema la masa presente en el acuífero está condicionada a la capacidad de arrastre de la velocidad de flujo. Debido al gran número de realizaciones requeridas en la simulación estocástica, se utiliza lenguajes de programación como Python (Flopy) por su facilidad para modelar y posprocesar gran cantidad de realizaciones, frente a las interfaces gráficas de usuarios (GUI) utilizadas comúnmente como ModelMuse, PMWIN, etc.

Los resultados obtenidos muestran que, la simulación estocástica brinda un abanico de posibles soluciones con cierto grado de incertidumbre, cuya media difiere respecto al modelo determinista único (campo estimado mediante la técnica de krigeado). La masa que ingresa al sistema se cuantificó en 1734.68 gramos para el modelo de campo suave y una masa que podría variar en el modelo estocástico entre 168.64 a 6481.62 gramos, con una media de 1147.54 gramos asociada a una probabilidad acumulada de 61 por ciento. A pesar de que el krigeado se encuentra dentro del intervalo de confianza determinado entre los percentiles 5 y 95, este sobreestima la masa total que ingresa al sistema.

Así mismo, la evaluación de los tiempos de llegada a los planos de control en los modelos determinista y estocástico indican que el 90% de la masa del contaminante necesitan solamente 6.5 años para llegar al plano de control a $x = 900$ metros, mientras que, la simulación estocástica pronostica un tiempo medio de 20 años con una probabilidad acumulada del 61 por ciento.

Finalmente, se concluye que, el empleo de simulación estocástica proporciona a la predicción realizada un grado de incertidumbre asociada a cualquier parámetro que se desea evaluar (conductividad hidráulica para el presente caso), hecho que no se puede lograr con los

modelos deterministas de campo suave, el análisis indicó que los tiempos de salida del 90 por ciento de la masa en el modelo estocástico representado por la media, es una decena de años mayor que los predichos por krigado, subestimando este último la respuesta real del sistema estudiado.

En valenciano (máximo 5000 caracteres)

La gestió dels recursos hídrics ha pres gran importància des de fa diversos anys, de ells s'està posant especial atenció a l'aigua subterrània, a causa de la quantitat de recurs disponible i a la sensibilitat d'aquesta a processos naturals i/o antropogènics. Una pràctica que s'ha tornat comuna entre els professionals, durant l'avaluació de recursos hidrogeològics és l'assumpció de models determinístics únics per a la caracterització de l'heterogeneïtat dels paràmetres que influeixen directa i indirectament en el modelament de formacions hidrogeològiques, deixant en aplicacions teòriques l'ús de models estocàstics.

L'objectiu del present treball és demostrar la diferència en aplicar enfocaments determinístics i estocàstics en modelar el flux i/o transport. Per a tal comesa s'utilitza una secció bidimensional en el pla xz, d'un aqüífer sintètic amb una extensió de 1000 metres de longitud i 30 metres d'altura, així com 14 dades dures de conductivitat hidràulica. Per a modelar l'heterogeneïtat de la conductivitat hidràulica s'apliquen tècniques geoestatístiques com a estimació (krigado ordinari) i simulació (simulació gaussiana seqüencial), en el segon cas es generen 100 simulacions equiprobables condicionades a les dades proporcionades.

La construcció del model numèric de flux es realitza amb el codi MODFLOW, amb una discretització de 30 capes, 1 fila i 100 columnes, amb cel·les de grandària ($\Delta x = 10$, $\Delta i = 1$, $\Delta z = 10$), simulant-se 3 períodes les duracions dels quals corresponen a 1 segon, 10 dies, i 80 anys. Per a la solució del transport s'empra el codi MT3D, considerant-se predominant el moviment advectiu, es pren la condició de frontera de primer tipus o Dirichlet (en la vora esquerra) estipulada per a la solució del flux com a font disponible de contaminant, atès que no s'està injectant contaminant directament al sistema, la massa present en l'aqüífer està condicionada a la capacitat d'arrossegament de la velocitat de flux.

A causa del gran nombre de realitzacions requerides en la simulació estocàstica, s'utilitza llenguatges de programació com Python (Flopy) per la seu facilitat per a modelar i post-

processar gran quantitat de realitzacions, enfront dels models amb interfícies gràfiques d'usuari (GUI) utilitzades comunament com ModelMuse, PMWIN, etc.

Els resultats obtinguts mostren que la simulació estocàstica brinda un ventall de possibles solucions amb cert grau d'incertesa la mitjana de la qual difereix respecte al model determinista únic (camp estimat mitjançant la tècnica de krigado). La massa que ingressa al sistema es va quantificar en 1734.68 grams per al model de camp suau i una massa que podria variar en el model estocàstic entre 168.64 a 6481.62 grams, amb una mitjana de 1147.54 grams associada a una probabilitat acumulada de 61 per cent. A pesar que krigado es troba dins de l'interval de confiança determinat entre els percentils 5 i 95, aquest sobreestima la massa total que ingressa al sistema.

Així mateix l'avaluació dels temps d'arribada als plans de control en els models determinista i estocàstic, aquests indiquen que el 90% de la massa del contaminant, necessiten solament 6.5 anys per a arribar al pla de control a $x = 900$ metres, mentre que en la simulació estocàstica, pronostica un temps mitjà de 20 anys amb una probabilitat acumulada del 61 per cent.

Finalment, es conclou que, l'ús de simulació estocàstica proporciona a la prediccio realizada un grau d'incertesa associada a qualsevol paràmetre que es desitja avaluar (conductivitat hidràulica per al present cas), fet que no es pot aconseguir amb els models deterministes de camp suau, l'anàlisi va indicar els temps d'eixida del 90 per cent de la massa en el model estocàstics representats per la mitjana, és una desena d'anys major que els predicts per krigado, subestimant est ultime la resposta real del sistema estudiat.

En anglés (máximo 5000 caracteres)

The management of water resources has been of great importance for several years, among which, special attention is being paid to groundwater, due to the amount of available resource and its sensitivity to natural and/or anthropogenic processes. A practice that has become common among professionals during the evaluation of hydrogeological resources is the assumption of single deterministic models, for the characterization of the heterogeneity of the parameters that directly and indirectly influence the modeling of hydrogeological formations, leaving in theoretical applications the use of stochastic models.

The objective of the present work is to demonstrate the difference between applying deterministic and stochastic approaches when modeling flow and/or transport. For this purpose, a two-dimensional section in the xz plane of a synthetic aquifer with an extension of 1000 meters in length and 30 meters in height, as well as 14 hard data of hydraulic conductivity, are used.

In order to model the heterogeneity of the hydraulic conductivity, geostatistical techniques such as estimation (ordinary kriging) and simulation (sequential gaussian simulation) are applied, in the second case 100 equiprobable simulations are generated conditioned to the provided data.

The construction of the numerical flow model is performed with the MODFLOW code, with a discretization of 30 layers, 1 row and 100 columns, with cells of size ($\Delta x = 10$, $\Delta y = 1$, $\Delta z = 10$), simulating 3 periods whose durations correspond to 1 second, 10 days, and 80 years.

For the transport solution, the MT3D code is used, considering the advective movement as predominant, the first type boundary condition or Dirichlet (on the left edge) stipulated for the flow solution is taken as the available source of pollutant, given that pollutant is not being injected directly into the system, the mass present in the aquifer is conditioned to the dragging capacity of the flow velocity.

Due to the large number of realizations required in stochastic simulation, programming languages such as Python (Flopy) are used because of their ease of modeling and post-processing a large number of realizations, as opposed to commonly used graphical user interface (GUI) models such as ModelMuse, PMWIN, etc.

The results obtained show that stochastic simulation provides a range of possible solutions with a certain degree of uncertainty, whose mean differs with respect to the single deterministic model (field estimated by the kriging technique). The mass entering the system was quantified as 1734.68 grams for the smooth field model and a mass that could vary in the stochastic model from 168.64 to 6481.62 grams, with a mean of 1147.54 grams associated with a cumulative probability of 61 percent. Although krigeado is within the confidence interval determined between the 5th and 95th percentiles, it overestimates the total mass entering the system.

Likewise, the evaluation of the arrival times to the control planes in the deterministic and stochastic models indicate that 90% of the contaminant mass needs only 6.5 years to reach the control plane at $x = 900$ meters, while the stochastic simulation predicts an average time of 20 years with a cumulative probability of 61 percent.

Finally, it is concluded that the use of stochastic simulation provides a degree of uncertainty associated with any parameter to be evaluated (hydraulic conductivity in this case), which cannot be achieved with deterministic soft-field models, the analysis indicated that the output times of 90 percent of the mass in the stochastic model represented by the mean, is a dozen years longer than those predicted by krigado, the latter underestimating the actual response of the system studied.

Palabras clave español (máximo 5): simulación estocástica, modelo determinista, heterogeneidad, conductividad hidráulica

Palabras clave valenciano (máximo 5): simulació estocàstica, model determinista, heterogeneitat, conductivitat hidràulica.

Palabras clave inglés (máximo 5): stochastic simulation, deterministic model, heterogeneity, hydraulic conductivity

Agradecimientos

A través de estas líneas quiero expresar mi profundo agradecimiento a todas las personas que de manera directa e indirecta han contribuido para la realización de este trabajo, de forma especial al Dr. J. Jaime Gómez Hernández, por su tiempo, paciencia y continua guía durante estos meses de trabajo. También agradecer al profesor Eduardo F. Cassiraga quien brindó su apoyo para resolver algunas de las dudas surgidas.

A mi familia, por su apoyo, preocupación y sus constantes palabras de aliento a la distancia, que hoy más que nunca han sido un soporte durante esta difícil situación.

A mi ahora no tan pequeña Sophie, quien fue el motivo de dar este paso y apoyó la decisión de dejar casa para crecer académicamente.

Índice General

Resumen	II
Agradecimientos.....	VII
1. Introducción	13
1.1. Motivación y objetivos	14
1.2. Organización del documento	15
2. Estado del arte.....	17
2.1. Enfoques determinísticos.....	17
2.2. Enfoque estocástico	17
2.3. Empleo de técnicas geoestadísticas	19
2.4. Algoritmos de interpolación o estimación	21
2.4.1. Regresión tradicional	21
2.4.2. Krigeado simple (KS)	21
2.4.3. Krigeado ordinario (KO)	22
2.4.4. Krigeado universal (KU)	22
2.5. Algoritmos de representación estocástica o simulación	23
2.5.1. Simulación secuencial.....	23
2.5.2. Simulación por recocido simulado (“simulated annealing”)	24
2.5.3. Simulación por campo de probabilidades	25
2.6. Modelamiento numérico del flujo y transporte en aguas subterráneas.....	25
2.7. Ecuaciones que gobiernan el flujo y transporte	26
2.7.1. Solución de la ecuación de flujo	26
2.7.2. Solución de la ecuación de transporte.....	27
3. Material de partida.....	29
3.1. Hipótesis de trabajo	29

3.2. Descripción del acuífero sintético.....	29
3.3. Estadísticas de la conductividad hidráulica	30
3.4. Selección del modelo matemático.	31
4. Metodología	33
4.1. Estimación	33
4.2. Simulación	35
4.3. Estructura del medio, condiciones de contorno, parámetros	39
5. Resultados y discusiones.....	41
5.1. Modelo de flujo.....	41
5.2. Modelo de transporte	45
6. Síntesis: conclusiones y recomendaciones.....	62
6.1. Conclusiones.....	62
6.2. Recomendaciones	64
7. Referencias	65
Anejos	70
Anejo 1: Script de modelo de flujo - estocástico	70
Anejo 2: Script de modelo de transporte – estocástico	71
Anejo 3: Script posprocesamiento de resultados: generación de gráficos	72
Anejo 4: Script posprocesamiento de resultados: generación de estadísticos.....	76
Anejo 5: Resultados de simulación de flujo con inyección forzada de contaminante	85

Índice de tablas

Tabla 1: Conductividades hidráulicas (k) conocidas / datos duros	30
Tabla 2: Resumen de parámetros del modelo anisotrópico.....	33
Tabla 3: Tiempos (t) de observación del transporte del contaminante en el modelo de transporte	46

Índice de figuras

Figura 1: Clasificación de métodos para la solución de la ecuación advección-dispersión.	
Fuente: (Sánchez Barrero, 2009).....	28
Figura 2: Distribución de conductividad hidráulica conocida en la sección vertical del acuífero sintético	31
Figura 3: Histograma, gráfico de probabilidad y principales estadísticas de la muestra de conductividad hidráulica del acuífero sintético.....	31
Figura 4: Interpolación de la muestra, arriba campo estimado de conductividad hidráulica con krigado ordinario (KO), abajo mapa de varianzas del campo de conductividad estimado	34
Figura 5: Histograma y principales estadísticas del campo estimado.....	35
Figura 6: Campos generados con el algoritmo SGSim. se presentan algunos de los 100 campos resultantes tras la aplicación del algoritmo de simulación, generados con los valores del variograma utilizado en la estimación.....	36
Figura 7: Mapa de varianzas condicionales de la simulación estocástica.....	37
Figura 8: Histogramas de simulación y principales estadísticos: se presentan histogramas de algunos de los campos generados en la simulación estocástica de conductividad hidráulica junto a las principales estadísticas de la muestra.	38
Figura 9: Discretización espacial del modelo, plano xz (100 columnas, 1 fila y 30 capas)....	40
Figura 10: Modelo de flujo simulado a partir de k estimada mediante krigado - celdas activas y no activas.....	41
Figura 11: Alturas piezométricas del modelo de flujo simulado a partir de K estimada mediante krigado	42
Figura 12: Campos de simulación estocástica de flujo: se presentan algunos de los campos simulados obtenidos	43
Figura 13: Mapa de probabilidad de modelos de flujo de la simulación estocástica	44
Figura 14: Celdas que permanecen saturadas durante las 100 simulaciones	45
Figura 15: Mapa de conductividad hidráulica, alturas piezométricas y concentraciones en el modelo interpolado (krigado)	47
Figura 16: Algunos mapas de conductividad hidráulica, alturas piezométricas y concentraciones del modelo estocástico - modelo de flujo y transporte	49

Figura 17: Trayectoria de partículas, a la izquierda sobre el mapa de conductividad hidráulica, a la derecha sobre el mapa de flujo.....	50
Figura 18: Evolución de masa total de cadmio (gramos) que ingresó al sistema	52
Figura 19: Histograma (izquierda) y curva distribución acumulada (derecha) de la masa total suministrada al sistema en la simulación estocástica	52
Figura 20: Modelo de flujo y transporte de masa correspondiente a la simulación 94 - mínimo ingreso de masa de Cd.....	53
Figura 21: Modelo de flujo y transporte de masa correspondiente a la simulación 89 - máximo ingreso de masa de Cd.....	53
Figura 22: Curvas de avance de cadmio del modelo interpolado	54
Figura 23: Curvas de avance en los planos de control ubicados cada 100 metros.....	55
Figura 24: Histograma de tiempos de llegada del 90% de la masa de cadmio y curva de distribución acumulada para algunos planos de control.....	56
Figura 25: Histograma de tiempos de salida del 90% (arriba), función de distribución acumulada (CDF) de los tiempos de salida (abajo).....	57
Figura 26: Histograma de tiempos de salida del 75% (arriba), función de distribución acumulada (CDF) de los tiempos de salida (abajo).....	58
Figura 27: Histograma de tiempos de salida del 50% (arriba), función de distribución acumulada (CDF) de los tiempos de salida (abajo).....	58
Figura 28:Simulación 38, modelo que requiere el máximo tiempo para salir del sistema	60
Figura 29: Histograma de tiempos de salida del 90% de masa para modelo con inyección forzada de contaminante.....	85
Figura 30: Mapa de inyección forzada del contaminante en el campo estimado.....	85
Figura 31: Simulación de transporte se presentan algunos de los campos simulados.	86

1. Introducción

Desde hace ya varias décadas la gestión de los recursos hídricos ha tomado gran importancia dado que el agua es el eje fundamental para el desarrollo de la mayor parte de las actividades productivas. Es aquí donde las aguas subterráneas cobran relevancia puesto que representan la mayor parte de estos recursos, permitiendo a través de sus afloramientos en lagos, ríos, humedales, el desarrollo de diversas actividades (Custodio, 2000; Sahuquillo et al., 2008). Así mismo, las masas de agua subterránea son altamente sensibles a procesos naturales y antrópicos, generando reacciones como sobre explotación, contaminación, etc.

Aún es un reto para los investigadores en diversas ramas de la ciencia como: hidrogeología, ambiental, de la tierra, petróleo, geofísica, la correcta caracterización de los parámetros hidráulicos del suelo, por complejos procesos que suceden en él (Monachesi, 2013), esto debido a la reducida información disponible y al alto costo que demanda un muestreo exhaustivo. La caracterización de variables como la conductividad hidráulica y porosidad, mejoran significativamente a medida que se incorpora mayor información (ya sea dura o blanda) (Li et al., 2012), entonces la correcta descripción cuantitativa y cualitativamente del entorno geológico permite implementar modelos numéricos, y dada la incertidumbre asociada a dichos parámetros, esta se traslada a los modelos de predicción del flujo y transporte (Cotyp & Findikakis, 2000; Sreekanth et al., 2016).

La heterogeneidad del medio hidrogeológico juega un rol importante en la simulación del transporte de solutos (Konikow, 2003), evaluándose por medio de técnicas geoestadísticas (Sánchez-Vila & Carrera, 2003), el tratamiento de tal heterogeneidad se reduce a dos enfoques: deterministas y estocásticos (Carrera, 1993), los primeros se utilizan comúnmente y con bastante éxito al reproducir problemas reales, así como experimentos a escala intermedia, pero presentan problemas al determinar los cambios en las concentraciones a pequeñas escalas, en tanto, el enfoque estocástico tiene una mejor aproximación a la formación porosa natural, dado que se representa mediante una distribución de frecuencia (Freeze, 1975), siendo utilizados en mayor medida para la evaluación de escalamientos, evaluación de emplazamientos de desechos nucleares y con menor frecuencia para la reproducción de problemas reales, debido a los altos costes computacionales que estos demandan (Gómez-Hernández & Cassiraga, 2004).

Cassiraga (1999) en su trabajo de tesis toma como referencia a Eisenberg et al (1987) quienes identificaron 5 tipos de incertidumbre, que deben ser considerados en la evaluación de futuros

emplazamientos de residuos peligrosos, las cuales son las incertidumbres debidas: a) mediciones tomadas en campo, b) heterogeneidad espacial de los parámetros del suelo, c) establecimiento del modelo conceptual, d) modelamiento de los procesos físicos-químicos y finamente, e) variación de la naturaleza. En el presente trabajo se evalúa la incertidumbre debida a la heterogeneidad de los parámetros del suelo, en concreto, se aborda la variación espacial de la conductividad hidráulica sobre el área de estudio.

1.1. Motivación y objetivos

El conocimiento detallado de la arquitectura del suelo es prácticamente imposible, además de lo costoso que resultaría intentar tomar grandes cantidades de muestras e incurriríamos en la destrucción de la estructura del suelo, entonces al modelar una formación hidrogeológica se busca generalmente simplificar los parámetros que actúan sobre la misma, de tal forma que, es una práctica muy aplicada en hidrogeología el empleo de técnicas de interpolación, con la finalidad de estimar la distribución espacial promedio de la transmisividad (Gómez-Hernández & Wen, 1994). Esto conduce al uso de un modelo determinístico único para la predicción de flujo y transporte en modelos de agua subterránea, ocasionando en muchas situaciones una sub o sobreestimación del real desplazamiento del agua y solutos en el subsuelo, pues es inherente la incertidumbre ligada a diversos parámetros, de entre ellos la porosidad, conductividad hidráulica, coeficiente de almacenamiento, etc. Para el presente trabajo solo tomaremos en cuenta la influencia que presenta sobre el área de estudio la heterogeneidad espacial de la conductividad hidráulica, considerando para tal fin como predominante el movimiento advectivo del agua subterránea. Dado que en la realidad no es posible obtener un conocimiento total de la distribución de la conductividad, se opta por trabajar con un enfoque estocástico (Gómez-Hernández & Cassiraga, 2004), en el cual se simula el flujo y transporte para 100 posibles representaciones de la realidad, condicionados a los datos de la muestra y usando un variograma que caracteriza la variabilidad espacial producto de un juicio de experto, debido al reducido conocimiento que se tiene de la formación hidrogeológica a estudiar.

El objetivo de este trabajo consiste en demostrar que:

- El flujo y transporte en un campo promedio correspondiente a un modelo determinístico único de la conductividad hidráulica difiere en gran medida de la media obtenida de la simulación estocástica, de realizaciones que reproducen patrones de variabilidad espacial más próximos a la realidad.

Para el cumplimiento de dicho objetivo se trazan objetivos secundarios como:

- Aplicar técnicas geoestadísticas (estimación y simulación) para determinar la heterogeneidad del medio.
- Modelar el flujo y transporte del campo estimado y de la simulación estocástica.
- Realizar un análisis comparativo de los resultados obtenidos con cada una de las metodologías.

1.2. Organización del documento

Como se indicó anteriormente, el objetivo del presente trabajo es demostrar que el uso de técnicas deterministas únicas en la simulación de flujo y transporte, están alejadas de la media del método de Monte Carlo y no se representa la gran incertidumbre asociada a la variabilidad espacial de la conductividad hidráulica, a la hora de reproducir el comportamiento del transporte en un medio heterogéneo, en la sección 1 se presenta la justificación y objetivos a alcanzar tras la ejecución del trabajo de fin de máster.

La sección 2 muestra, una breve revisión del estado del arte en cuanto al uso de modelos determinísticos y estocásticos que abordan el problema de flujo y transporte de solutos, así como, una descripción de las técnicas geoestadísticas comúnmente utilizadas para representar la variabilidad espacial de los parámetros de interés.

En la sección 3, se describe el acuífero sintético a trabajar, su geometría, discretización y la distribución espacial de los parámetros del modelo en puntos conocidos. En este capítulo se describe también las principales estadísticas de la conductividad hidráulica. Se presentan las consideraciones para la selección del modelo matemático para la solución de flujo y transporte a través de MODFLOW y MT3D respectivamente. Finalmente, se realiza una descripción de la hipótesis de trabajo.

La metodología utilizada para el empleo de técnicas determinísticas (como krigado) y de simulación (simulación gaussiana secuencial) son mostradas en la sección 4 junto a los resultados correspondientes. En esta sección se describe los criterios tomados en consideración para la implementación del modelo matemático como estructura del medio (discretización temporal), condiciones de contorno (alturas prescritas), parámetros (conductividad hidráulica, porosidad, dispersión longitudinal, etc.), luego de la obtención de los valores de conductividad para ambos casos y se ofrece una vista del modelo a emplear en la interfaz de ModelMuse.

La sección 5, contiene el análisis comparativo de los resultados obtenidos tras el empleo de técnicas de estimación y de simulación tanto para el flujo como transporte, se evalúa cualitativamente el modelo de flujo estimado versus el mapa promedio del modelo de flujo de simulación estocástica, del mismo modo, se realiza la evaluación cuantitativa de los tiempos de llegada de diversas fracciones del contaminante (considerado como conservativo) al final de la sección del modelo.

La sección 6, presenta las conclusiones obtenidas durante el desarrollo del presente trabajo, respecto a los objetivos planteados, recomendándose algunas consideraciones para realizar un análisis más profundo y semejante a la realidad.

En la sección 7, se lista las referencias bibliográficas consultadas para la elaboración del presente trabajo, por último, la sección 8 corresponde a los anejos donde se presentan los scripts utilizados para la simulación estocástica (modelos de flujo y transporte) y los resultados obtenidos al aplicar el mismo modelo, pero esta vez cambiando el modo de suministro del contaminante.

2. Estado del arte

En esta sección se presenta una revisión de las investigaciones realizadas que involucran la variabilidad espacial de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica en la simulación de flujo y transporte de solutos en modelos de agua subterránea. También se describen algunas técnicas geoestadísticas empleadas para representar la heterogeneidad de dicho parámetro, en la última sección se describen las bases de las ecuaciones de flujo y transporte.

2.1. Enfoques determinísticos

En esta primera parte se presenta una revisión general de la empleabilidad de modelos deterministas para la solución de flujo y transporte, ya que hoy son los mayormente utilizados. Están basados en la ley de conservación de masa o principio de continuidad y la ley de Darcy, suponiéndose que se conoce de manera exhaustiva los procesos a los que está sometido el sistema en estudio (Fernández Martínez, 2005), se pueden realizar predicciones del estado futuro del sistema ante cualquier esfuerzo que esté sometido (Muñoz Núñez, 2001).

IHOBE (2006) define al enfoque determinístico como aquel en que ningún parámetro se encuentra condicionado a variaciones aleatorias, describiendo con bastante precisión el estado actual del sistema, así como las interacciones de todos los procesos que influyen en él. Conocer perfectamente el entorno geológico es una tarea prácticamente imposible, por ello se asume que los modelos deterministas proporcionan el comportamiento medio de las variables del medio natural.

Zhou et al. (2010) indican que, al trabajar con escalas relativamente grandes como la escala regional, se asume que los valores de los parámetros hidráulicos principalmente la conductividad en cada capa es homogénea, esto debido a la extensión del modelo y la reducida información disponible. Esta asunción deja de ser válida cuando se trabaja localmente puesto que no representa las condiciones reales del sistema.

2.2. Enfoque estocástico

Considerando que es imposible conocer a detalle la distribución espacial de los parámetros en el entorno geológico se acude a enfoques estocásticos (Gómez-Hernández & Cassiraga, 2004) o también llamados modelos probabilísticos con los cuales se ha tenido éxito al representar la heterogeneidad del entorno geológico, estas representaciones tienen asociados problemas de escala. La heterogeneidad puede cambiar de manera radical de una posición a otra en el

subsuelo, dando como resultado que varíen las propiedades hidráulicas dependiendo de la escala de observación (Golfier et al., 2011).

Varios investigadores han puesto especial atención a la variación de la conductividad hidráulica según la escala, debido a la gran diferencia entre las escalas de toma de datos y la discretización del modelo. Se pueden emplear diversas técnicas que permiten incrementar la escala, Wen & Gómez-Hernández (1996) describen algunas de estas técnicas desde el promedio geométrico (Gómez-Hernández & Journel, 1994) de los valores heterogéneos dentro del bloque hasta inversiones sofisticadas una vez resuelto el modelo de flujo. Li et al. (2011) indicaron que, en medios donde las conductividades varían en varios órdenes de magnitud se debe poner especial atención a la técnica de escalado escogida, así mismo mostraron que el empleo del modelo advección – dispersión, puede explicar el desplazamiento del penacho en un sitio con gran heterogeneidad como MADE, siempre y cuando el incremento de escala del modelo de flujo sea cuidadoso y las dimensiones de las celdas sean inferiores que los intervalos de correlación de las conductividades de escala fina.

Para representar la heterogeneidad de la conductividad hidráulica en una formación hidrogeológica, Lu et al. (2015) calcularon la conductividad hidráulica efectiva (K_e), el efecto de la conductividad hidráulica promedio (EK) en un acuífero heterogéneo respecto a la conductividad estimada fue evaluada mediante pruebas de bombeo observadas, determinando que K_e se incrementa con la EK y sucede lo contrario con el coeficiente de variación de la conductividad hidráulica.

Se han desarrollado diversos códigos de programación computacional, para abordar problemas de la variabilidad espacial de los parámetros hidráulicos, de entre ellos tenemos: ANISOFLOW (Álvarez-Villa et al., 2017), que permite considerar la heterogeneidad de la conductividad hidráulica y coeficiente de almacenamiento, así como la variabilidad espacio temporal de las condiciones de contorno, Gómez Giraldo et al. (2017) implementan un código que permite un mallado más pequeño y favorece una escala de modelo pequeña, dando un mayor acercamiento a la orientación preferencial del soluto en la formación hidrogeológica, por otro lado Zhou et al., (2010) proponen un código de aumento de escala, transformando modelos finamente refinados a modelos de bloque grueso, calculando de forma directa la conductividad entre bloques para evitar promediar valores ya escalados. Una comparación entre filtro de ensamble de Kalman (EnKF) y el emparejamiento de patrones de conjunto (EnPAT) para el modelado inverso de la permeabilidad en estructura de canales curvilíneos es mostrada por Li et al. (2015),

demonstrando para un acuífero sintético que este último brinda una mejor predicción del transporte, debido a que, describe con mayor detalle la variación espacial de la conductividad hidráulica.

Otra de las formas de abordar la incertidumbre de la permeabilidad es a través del uso de técnicas geoestadísticas, para generar múltiples mapas bi o tridimensionales igualmente probables de los parámetros hidráulicos condicionada a la información disponible (Gómez-Hernández & Journel, 1994; Kupfersberger & Deutsch, 1999; X. H. Wen et al., 1999; Carty & Findikakis, 2000), que en la mayoría de casos es limitada, bajo estas condiciones la mejor forma de caracterizar el sistema es incorporar información imprecisa provenientes de mediciones indirectas y/o juicios de expertos (Dou et al., 1997). Se ha demostrado que la mejora en la caracterización de la conductividad hidráulica y porosidad está condicionada a la incorporación de diversos tipos de datos (Cassiraga, 1999; Li et al., 2012).

Las simulaciones de Monte Carlo es el tratamiento más usado para cuantificar la incertidumbre en la predicción de los modelos de agua subterránea, generando varios mapas igualmente plausibles de la distribución de la conductividad hidráulica, a partir de los mapas generados se resuelve para cada uno la ecuación del flujo y transporte de solutos en el entorno hidrogeológico. La cuantificación de la incertidumbre corresponde al análisis estadístico de las predicciones obtenidas (Carty & Findikakis, 2000).

2.3. Empleo de técnicas geoestadísticas

Como se indicó anteriormente el conocimiento detallado de la arquitectura del medio geológico es prácticamente imposible además de lo costoso que resultaría obtener información tomada *in situ*, el intentar obtener un muestreo exhaustivo generaría una alteración de la estructura del medio, una solución para paliar estos inconvenientes es el uso de técnicas geoestadísticas, que permiten la predicción de parámetros hidráulicos en ubicaciones donde no han sido muestreados a partir de información precisa (datos obtenidos de mediciones directas *in situ* o sobre testigos) o, datos indirectos (resultados de mediciones de otros parámetros que están relacionados con algún atributo del parámetro estudiado) los cuales generalmente están disponibles en mayor cantidad respecto a la información precisa (Cassiraga & Gómez-Hernández, 1996).

Los algoritmos en geoestadística tienen como fundamento un modelo de función aleatoria donde los valores de la variable aleatoria son generados al “azar” por medio de un mecanismo

probabilístico. Al representar como modelo de variable aleatoria un atributo que varía de forma continua en el espacio delimitado en un intervalo de posibles valores, la función de probabilidad acumulada se expresa como:

$$F(u, z) = \text{Prob}\{Z(u) \leq z\} \forall z \quad (1)$$

Donde Z es la variable aleatoria, u es la posición de Z y z es el umbral.

La ecuación (1) indica la probabilidad que Z en u sea menor o igual a un determinado valor de z , entonces la función aleatoria corresponde a un grupo de variables aleatoria $Z(u)$ que se encuentran correlacionadas entre sí y definidas para cada ubicación u , dentro de un dominio A de forma que $\{Z(u), \forall u \in A\}$. En varios trabajos se plantea el problema de la muy reducida información dura disponible para la caracterización del medio hidrogeológico (ver Cassiraga & Gómez-Hernández, 1996; Cassiraga, 1999; Méndez-Venegas et al., 2013) y como mejorar la caracterización de locaciones donde no se cuenta con información mediante la incorporación de información blanda. La representación de la total distribución de la variable estimar dependiente de una variable secundaria se expresa:

$$\text{Prob}\{Z \leq z_k | V \in (v_1; v_2)\} \quad (2)$$

Donde Z es la variable de interés, z_k un valor de la misma, V es la variable secundaria y por último $(v_1; v_2)$ son los límites del intervalo de variación de V .

Dado que el fin de la interpolación en el espacio es mejorar el conocimiento de la variable de interés por medio del conocimiento de medidas disponibles (información dura y blanda) para cada ubicación en el dominio de trabajo, entonces la ecuación anterior queda expresada de la forma siguiente:

$$\text{Prob}\{Z \leq z_k | \text{toda la informacion disponible}\} \quad (3)$$

Los algoritmos que permiten ampliar el conocimiento de una variable hacia ubicaciones no muestreadas, a partir de diferentes tipos de información se clasifican en algoritmos de interpolación o estimación y algoritmos de representación estocástica o simulación. Los primeros generan una única imagen de la variable de interés producto de una interpolación en el área de estudio, mientras que el segundo tipo de algoritmos proporcionan gran cantidad de campos de la variable de interés con la característica que todos son equiprobables, debido a que los datos y patrones de correlación espacial conocidos son reproducidos (la información dura se replica igual, en cambio la información blanda, con algún grado de relajación).

Las imágenes obtenidas con los algoritmos de estimación son consideradas como campos suaves y no reflejan la heterogeneidad real en el campo de la variable estimada. Se considera que cada respuesta de los algoritmos de representación estocásticas puede representar la realidad, por tal las variaciones entre cada simulación proporcionan visual y cuantitativamente la incertidumbre de la variable modelizada (Cassiraga & Gómez-Hernández, 1996)

2.4. Algoritmos de interpolación o estimación

Dan como resultado una representación de la variable de interés dentro de un campo interpolado, buscando para cada localización el mejor estimador. Cassiraga (1999) sostiene que la aplicación de cualquier algoritmo de interpolación tiende a generar campos suaves y no reflejan la heterogeneidad que posee dicha variable en la realidad. Así mismo cada estimación realizada guarda relación con los datos de la muestra, pero no entre sí mismos.

2.4.1. Regresión tradicional

Es una de las técnicas más simples para la predicción de una variable respecto a otra, asumiendo que dicha relación responde a una recta entre las ubicaciones de ambas variables, se expresa como:

$$z_1 = a \cdot z_2 + b \quad (4)$$

Los valores de las variables son z_1 y z_2 , mientras que a y b son los coeficientes para determinar, usualmente se utiliza el método de los mínimos cuadrados quedando los coeficientes expresados como sigue:

$$a = \rho \frac{\sigma_{z_1}}{\sigma_{z_2}}; \quad b = m_{z_2} - am_{z_1} \quad (5)$$

Donde ρ es el coeficiente de correlación lineal de z_1 y z_2 , σ_{z_1} y σ_{z_2} la desviación estándar de las variables z_1 y z_2 correspondientemente y m_{z_1} y m_{z_2} son los valores medios. Una de las desventajas de este método es que no permite cuantificar la incertidumbre de los resultados estimados.

2.4.2. Krigado simple (KS)

Considera que la variable regionalizada z corresponde a una ejecución de la función aleatoria Z , con media conocida, siendo contemplado como el promedio ponderado de la muestra, cuyo estimador se representa por (Riquelme Sandoval, 2016):

$$z_{KS}^*(u_0) - m = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha [z(u_\alpha) - m] \quad (6)$$

Donde m es el valor esperado de Z , constante durante todo el dominio de la estimación, λ_α es el coeficiente de ponderación. La ecuación anterior se ve modificada a un sistema lineal debido a que λ_α condiciona que el estimador sea insesgado, así como que la varianza del error sea mínima.

$$\sum_{\beta=1}^n \lambda_\beta C(u_\alpha - u_\beta) = C(u_\alpha - u_0), \alpha = 1, \dots, n \quad (7)$$

Y $C(h)$ es la covarianza del vector separación h . La varianza de los errores del KS es:

$$\sigma_{KS}^2(u_0) = \sigma^2 - \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha C(u_\alpha - u_0) \quad (8)$$

2.4.3. Krigeado ordinario (KO)

Es utilizada la muestra conocida (conjunto de datos) y el variograma que describe la variabilidad espacial, suponiendo que $Z(u)$ es función aleatoria estacionaria de segundo orden (Chica-Olmo, 2005). En el caso de este estimador se asume que la media es desconocida y a partir de los datos involucrados en cada estimación se calcula dicho valor, se representa con la siguiente ecuación:

$$z_{KO}^*(u_0) = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha z(u_\alpha) \quad (9)$$

Para que el estimador sea insesgado debe cumplirse que la suma de los pesos λ_α en cada una de sus localizaciones sea 1.

$$\begin{cases} \sum_{\beta=1}^n \lambda_\beta C(u_\alpha - u_0) + \mu = C(u_\alpha - u_0), \alpha = 1, \dots, n \\ \sum_{\beta=1}^n \lambda_\beta = 1 \end{cases} \quad (10)$$

Donde μ es el parámetro de Lagrange sujeto a la suma de los pesos y el mínimo de los errores. La varianza de los errores del KO se expresa como:

$$\sigma_{KO}^2(u_0) = \sigma^2 - \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha C(u_\alpha - u_0) - \mu \quad (11)$$

2.4.4. Krigeado universal (KU)

Este tipo de krigeado considera como polinómica la variación espacial que existe en la media local, la cual es desconocida cuya representación matemática es como sigue:

$$m(u) = \sum_{l=0}^L a_l f_l(u) \quad (12)$$

Donde $m(u)$ corresponde a la media en la localización u ; a_l son coeficientes no conocidos y $f_l(u)$ son monomios debajo orden en funciones de las posiciones de u . Las expresiones reducidas para un modelo lineal y cuadrático bidimensional queda:

$$m(u) = a_0 + a_1 x + a_2 y \quad m(u) = a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 x^2 + a_4 y^2 + a_5 xy \quad (13)$$

Y el estimador de KU es de la forma:

$$z_{KU}^*(u_0) = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha z(u_\alpha) \quad (14)$$

La condición de no sesgo está condicionada a L las expresiones:

$$\begin{cases} \sum_{\beta=1}^n \lambda_\beta C(u_\alpha - u_0) + \sum_{l=0}^L \mu_l f_l(u_\alpha) = C(u_\alpha - u_0), \alpha = 1, \dots, n \\ \sum_{\beta=1}^n \lambda_\beta f_l(u_\beta) = f_l(u_0), l = 0, \dots, L \end{cases} \quad (15)$$

La varianza de los errores del KU tienen la siguiente ecuación:

$$\sigma_{KU}^2(u_0) = \sigma^2 - \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha C(u_\alpha - u_0) - \sum_{l=0}^L \mu_l f_l(u_\alpha), \alpha = 1, \dots, n \quad (16)$$

Existen muchas más técnicas de interpolación de las mencionadas en esta revisión como por ejemplo krigado con deriva externa, así como un conjunto de técnicas de interpolación que permiten adicionar variables secundarias en la estimación del parámetro requerido, como por ejemplo: el cokrigado simple, cokrigado ordinario, krigado indicador, cokrigado indicador, cokrigado colocalizado dentro de este podemos destacar al cokrigado bajo un modelo de Markov, etc., para mayor información sobre las técnicas aquí mencionadas el lector puede revisar Cassiraga & Gómez-Hernández 1996; Cassiraga 1999.

2.5. Algoritmos de representación estocástica o simulación

Reciben este nombre las técnicas que permiten realizar múltiples imágenes de una variable z , que se modela como función aleatoria $Z(u)$, a partir de la información disponible y los patrones de continuidad utilizados en la modelización de $Z(u)$. Esta sección ofrece una revisión superficial de algunos de los métodos más utilizados. Una revisión detallada de estos métodos se pueden consultar en Cassiraga & Gómez-Hernández 1996; Cassiraga 1999.

2.5.1. Simulación secuencial

Considerada una técnica muy robusta, Cassiraga & Gómez-Hernández (1996) resumen su esquema como sigue:

1. Se traza una ruta aleatoria inspeccionando los nodos a ser visitados.
2. Toma toda la información disponible, así como la calculada previamente en otras ubicaciones para determinar en el nodo la función de distribución acumulada. A medida que se ejecuta la simulación surge la necesidad de condicionar la función de distribución a los datos adyacentes, esto a razón que el incremento de los datos pre-simulados aumenta en tiempo de simulación.
3. Se elige aleatoriamente un valor de la función aleatoria resultante del paso 2 y es incorporado como datos condicionantes en la simulación del siguiente nodo.
4. Se repite el paso 2 hasta culminar todos los nodos, presentes en el dominio.
5. Finalmente, el proceso se repite esta vez iniciando con un camino distinto (aleatorio) para generar otra representación.

El algoritmo de simulación secuencial considera varias técnicas como: simulación gaussiana secuencial, simulación gaussiana por cokrigado, simulación conjunta de variables, simulación gaussiana secuencial por cokrigado colocalizado bajo un modelo markoviano, etc.

La técnica de simulación gaussiana secuencial de un solo atributo supone considerar a $\{Z(u_j), j = 1, \dots, N\}$ como un grupo de variables aleatorias conocidas en N ubicaciones u_j dentro del dominio A . Con el objetivo de realizar L representaciones de las N variables condicionadas al grupo de datos, es decir: $\{z^l(u_j), j = 1, \dots, N; l = 1, \dots, L\}$, esta generación es equivalente al muestreo de la función de distribución acumulada representada como sigue:

$$F(u_1, \dots, u_n; z_1, \dots, z_n | (n)) \quad (17)$$

2.5.2. Simulación por recocido simulado (“simulated annealing”)

Es capaz de complementar las técnicas tradicionales de simulación estocástica con la ventaja de incorporar patrones de variabilidad complicados de representar mediante funciones de covarianza. Al considerar el parámetro $Z(u)$ en el rango de k , donde $k = 1, \dots, K$, la dificultad de obtener una distribución espacial del parámetro en las N locaciones de una malla se representa por el histograma siguiente:

$$\begin{aligned} f(h; k_1; k_2) = \text{Prob}\{Z(u) \in \text{a la categoria } k_1, Z(u + h) \in \text{a la categoria } k_2\}, \\ k_1, k_2 = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (18)$$

Donde $h_l = h_1, \dots, h_L$, corresponde a los vectores separación. La función objetivo puede expresarse posiblemente como:

$$O = \sum_{l=1}^L \sum_{k_1}^K \sum_{k_2}^K [f(h_l; k_1; k_2)_{referencia} - f(h_l; k_1; k_2)_{realización}]^2 \quad (19)$$

Este algoritmo contempla la siguiente rutina:

1. Delimitar los parámetros de la función objetivo (valores del histograma bivariado).
2. Generar primera realización que represente las frecuencias.
3. Calcular los parámetros de la ejecución en la función objetivo (F.O).
4. Valorar la F.O
5. Elegir nodos aleatoriamente e intercambiar sus valores.
6. Actualizar la F.O
7. Se acepta el intercambio de valores.
8. Culmina cuando la F.O se encuentra cercana a 0, de no ser así se continúa en el paso 5

2.5.3. Simulación por campo de probabilidades

Se destacan dos características importantes de este algoritmo, la primera es la capacidad de distinguir entre el cálculo de la función de destrucción acumulada en cada locación y la reproducción de representaciones plausibles del parámetro. El esquema de ejecución del algoritmo se detalla a continuación:

1. Se discretiza el área de estudio
2. Se obtiene la función de distribución acumulada para cada nodo de la discretización.
3. Determinar la función de covarianza de la transformada uniforme de $Z(u)$ asumiendo $C_p(h) = C_u(h)$
4. Generar sobre la discretización una simulación no condicionada $P(u)$ distribuida uniformemente y con covarianza $C_p(h)$
5. En cada nodo se determina $zs(u)$ en base de la función de distribución $F(u,z)$ empleando $ps(u)$.
6. Por último, se repiten los pasos 4 y 5 para tener una nueva realización plausible del atributo.

2.6. Modelamiento numérico del flujo y transporte en aguas subterráneas

La implementación de modelos numéricos en una formación hidrogeológica proporciona una fotografía del presente (situación actual), describiendo el flujo y transporte de solutos en el

acuífero a fin de dotar de predicciones que permitan una gestión eficiente de los recursos hídricos (en el caso de explotación, actividades de remediación, etc) y/o evaluar futuros emplazamiento de residuos radioactivos.

El avance tecnológico y el abaratamiento de los equipos informáticos con gran capacidad ha permitido el uso extensivo de los modelos numéricos para resolver ecuaciones sin solución analítica, sin embargo, no se debe hacer un uso indiscriminado de los mismos dado que cada uno de ellos tiene limitaciones de convergencia y estabilidad (Cruces de Abia, 2006).

2.7. Ecuaciones que gobiernan el flujo y transporte

La solución de las expresiones matemáticas que rigen el flujo y transporte en acuíferos son generalmente determinadas por el principio de conservación de la masa (caudal o soluto), tomando como referencia un volumen de control, a partir del cual se realiza un balance (Konikow, 2003).

2.7.1. Solución de la ecuación de flujo

El proceso para determinar el flujo (caudal) a través de un medio poroso fue estudiado por Henrry Darcy, quien propuso la Ley de Darcy, que relaciona las propiedades del agua, del medio poroso y el gradiente. Utilizando tensores la ecuación se expresa tal como sigue:

$$q_i = -K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (20)$$

Donde $q_i [LT^{-1}]$ corresponde al flujo; $K_{ij} [LT^{-1}]$ es la conductividad hidráulica del medio poroso y finalmente $h [L]$ es el nivel piezométrico.

Freeze & Cherry (1979) describen las ecuaciones de flujo y transporte como producto de la combinación de las ecuaciones de conservación de la masa y la ley de Darcy, obteniéndose diferentes ecuaciones en función del medio al considerar constante la densidad del fluido (Fernández Torroba, 2004), la ecuación diferencial parcial de flujo en estado estacionario en un medio poroso saturado anisotrópico queda:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0 \quad (21)$$

Para el caso de estado transitorio la ecuación (21) sufre cambios, esto debido a que el ingreso de flujo másico para cualquier volumen de control debe corresponder a la variación en el

almacenamiento a través del tiempo para la masa del fluido, para una formación heterogénea y anisotrópica, la ecuación resultante se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + W^* \quad (22)$$

Donde K_x , K_y , K_z son las conductividades hidráulicas en las tres direcciones en $[LT^{-1}]$, h corresponde a la altura piezométrica en $[L]$, S_s es el almacenamiento específico en $[L^{-1}]$, t es el tiempo en $[T]$ y W^* corresponde al flujo volumétrico por unidad de volumen (el signo dependerá si sale o entra flujo al sistema)

2.7.2. Solución de la ecuación de transporte

Desde antes de la década de 1980, el conocimiento de los acuíferos tenía un enfoque cuantitativo, pues se buscaba determinar el potencial de estos para satisfacer diversos usos a través del empleo de modelos hidrogeológicos, este enfoque ha variado desde final del siglo anterior poniendo mayor atención a los problemas de la calidad del agua (IHOBE, 2006).

Sánchez Barrero (2009) en su trabajo de tesis realiza una descripción de los métodos numéricos que resuelven el movimiento de un soluto en el acuífero, tomando como punto inicial la ecuación advección-dispersión, se consideran tres procesos en el transporte de masa como la difusión, advección y dispersión, de entre los cuales el movimiento advectivo es predominante indicando que el transporte de masa se debe a la velocidad media del flujo. La ecuación se representa como:

$$\frac{\partial(\varphi C)}{\partial t} = -\bar{V}(j) + q_s \quad (23)$$

Donde j es el vector de flujo másico, C es la concentración y q_s son las fuentes y/o sumideros.

La ecuación tradicional de la advección-dispersión resulta luego de realizar varias asunciones sobre la ecuación anterior, quedando de la forma:

$$\left[D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \left[D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \left[D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] \pm \frac{q_s}{\varphi} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (24)$$

Donde D_x , D_y , D_z corresponde a los coeficientes de dispersión hidrodinámica $[L^2 T^{-1}]$, C es la concentración del soluto en el medio, q_s son los términos fuente y/o sumidero.

Se hace estrictamente necesario definir las condiciones iniciales y de contorno para obtener una solución única de la ecuación diferencial parcial de segundo orden. Denominamos condiciones

iniciales a los valores que se proporcionan como solución al inicio de la simulación, evidentemente estas cambiarán al simular el estado transitorio. En el caso de modelos en estado estacionario solo es necesario las condiciones de contorno, estas pueden ser de tres tipos: a) condición de Dirichlet en el que se especifica el valor (nivel o concentración), b) condición de Neumann que corresponde a un gradiente del nivel o concentración, generalmente es utilizada al modelar el flujo dispersivo constante y c) condición de Cauchy es una condición mixta que combina las condiciones a y b.

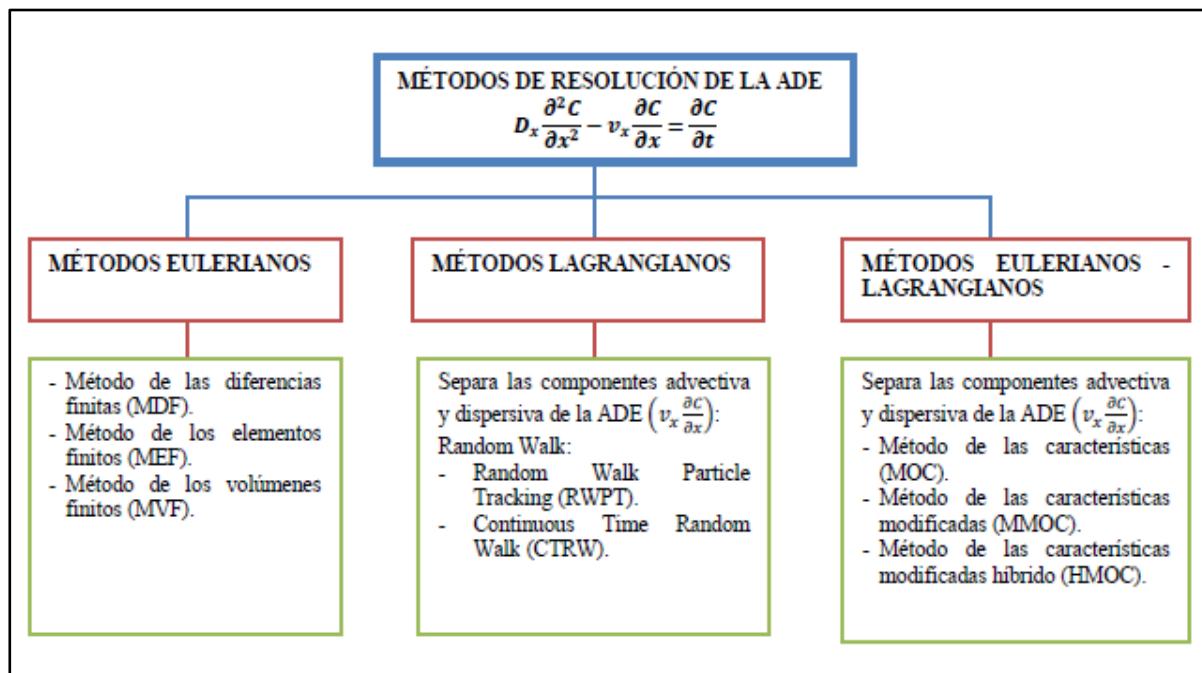


Figura 1: Clasificación de métodos para la solución de la ecuación advección-dispersión.
Fuente: (Sánchez Barrero, 2009)

A continuación, se ofrece una clasificación y breve descripción de los métodos que permiten resolver la ecuación de transporte de solutos en el medio hidrogeológico. Se agrupan en 3 métodos: eulerianos, lagrangianos y mixtos (Neuman, 1984; Fernández Torroba, 2004; Sánchez Barrero, 2009; Gómez Giraldo et al., 2017). El método de Euler resuelve la ecuación del transporte utilizando técnicas como diferencias o elementos finitos, cuyo uso demanda el empleo de una malla fija, son empleadas con mayor frecuencia en problemas donde sea dominante el transporte dispersivo, presentando problemas de estabilidad numérica cuando el transporte advectivo es el dominante que sucede en la mayoría de los casos.

Los métodos lagrangianos son altamente eficientes para problemas donde predomina el movimiento advectivo, para la solución de la ecuación de transporte utilizan técnicas de rastreo

de partículas, estos métodos usan una malla deformante o bien una malla fija en coordenadas deformables a diferencia del método de Euler estos no necesitan una malla fija.

Los métodos mixtos o eulerianos-lagrangianos utiliza las bondades de ambos métodos separando el término advectivo y dispersivo, para la solución del primer término utiliza el método de Lagrange y para el segundo el método de Euler. Estos métodos también pueden tener inestabilidad numérica de la solución debido al uso de técnicas de rastreo de partículas. Algunas de las técnicas que emplea este método son por ejemplo el método de las características (MOC) que presenta el inconveniente que la conservación de la masa no está garantizada (Zheng, 1992)

3. Material de partida

En esta sección se describe la información inicial del área de estudio, al mismo tiempo se realiza un análisis estadístico de la muestra para posteriormente emplear los algoritmos geoestadísticos, concluyendo con la elección del método numérico a utilizar para resolver el problema de flujo y transporte de solutos en el acuífero sintético descrito.

3.1. Hipótesis de trabajo

Los resultados que nos proporciona el krigado (aplicado a los datos de conductividad), sobre el comportamiento del flujo y transporte de solutos en acuíferos donde no disponemos de información para calibrar y validar el modelo, no corresponde a la realidad y dista en gran medida del promedio del comportamiento de flujo y transporte en las realizaciones de una simulación estocástica; prediciendo en muchos casos una subestimación de los tiempos de viaje del soluto en relación con la media del método de Monte Carlo, debido a que determina un campo de conductividades bastante suavizado.

3.2. Descripción del acuífero sintético.

Se trabaja con un área de sección vertical de un acuífero libre heterogéneo rectangular con 1 km de anchura y 300 m de espesor, discretizado en celdas cuadradas de 10 m por 10 m. Las condiciones de contorno son impermeables en el fondo, superficie freática en la parte superior, altura piezométrica constante en el borde izquierdo igual a 500 m (aquí el espesor saturado del acuífero es de 290 m) y una altura piezométrica constante en el borde derecho igual a 300 m (espesor saturado, por tanto, de 90 m).

El acuífero es heterogéneo con conductividades hidráulicas cuya variabilidad espacial puede caracterizarse por una función aleatoria logmultigaussiana con media $-5 \log_{10}(\text{m/s})$ y varianza $1.0 (\log_{10}(\text{m/s}))^2$, y variograma esférico anisótropo con alcance de 200 m en la dirección horizontal y de 50 m en la vertical. Se dispone de 14 datos de conductividad mostrados en la tabla 1 (tomando como origen de las X el borde izquierdo del acuífero y el origen de las Z viene dado por la condición de contorno).

Tabla 1: Conductividades hidráulicas (k) conocidas / datos duros

X (m)	Z (m)	$\log_{10}K$ (\log_{10} m/s)
100	280	-4.0
300	290	-4.3
500	270	-4.1
700	250	-4.0
900	260	-3.8
100	460	-6.0
300	450	-6.3
500	450	-5.0
700	460	-5.5
900	470	-5.8
200	330	-4.5
400	340	-5.5
600	320	-6.5
800	360	-6.0

3.3. Estadísticas de la conductividad hidráulica

Se tiene valores de conductividad hidráulica definidas en 14 ubicaciones a diferentes profundidades que, van desde 250 m a 470 m, tal como se muestra en la figura 2, los estadísticos de los datos son calculados por el software SGeMS (Remy, 2004), la muestra tiene una media de $-5.1 \log_{10}(\text{m/s})$, mediana de $-5.5 \log(\text{m/s})$ y una varianza de 0.92, indicando una distribución más o menos simétrica de la muestra en el dominio, tal como se aprecia en el histograma de la figura 3.

La muestra se encuentra espacialmente distribuida en el dominio de estudio, los valores con menor permeabilidad se encuentran ubicados en la parte superior, en contraste, los valores de conductividad más alta se encuentran en la parte inferior del acuífero sintético. Con una zona de transición en la parte central del acuífero.

Influencia de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica

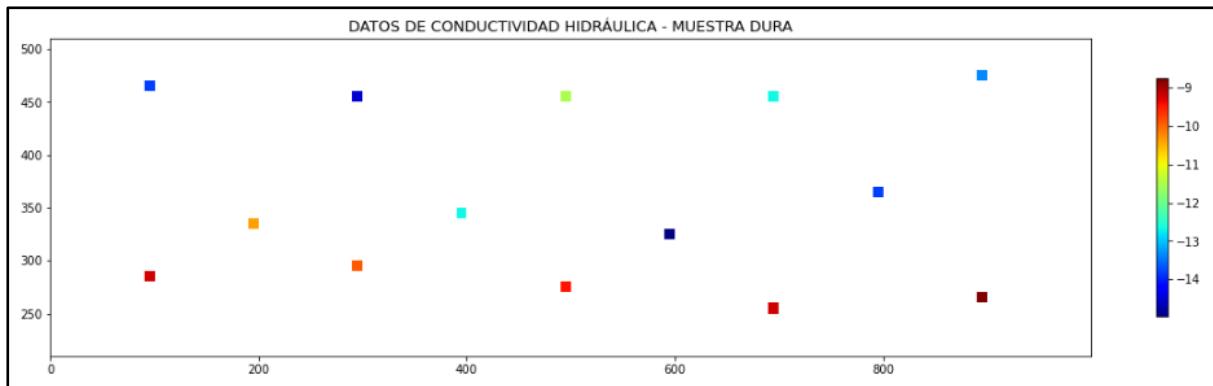


Figura 2: Distribución de conductividad hidráulica conocida en la sección vertical del acuífero sintético

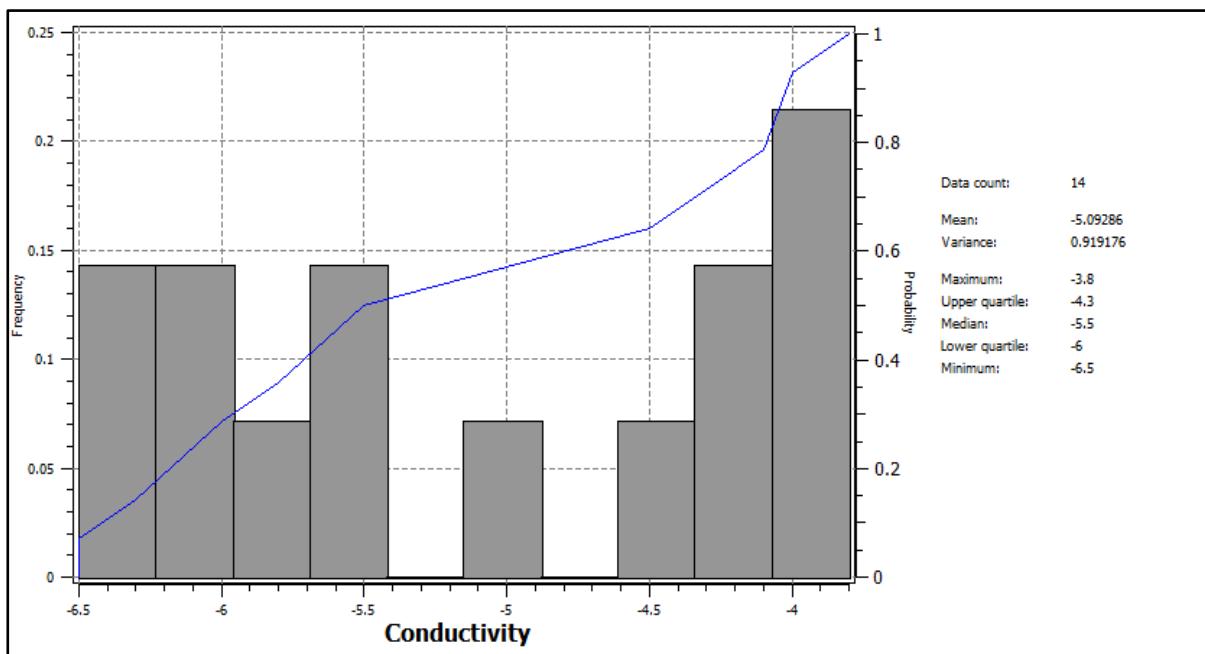


Figura 3: Histograma, gráfico de probabilidad y principales estadísticas de la muestra de conductividad hidráulica del acuífero sintético

3.4. Selección del modelo matemático.

Para la construcción del modelo se selecciona un código libre, desarrollado por el Servicio Geológico de los Estados Unidos (USGS) como MODFLOW (McDonald & Harbaugh, 1984), en su versión 2005.

Esta versión realiza el modelamiento de flujo empleando el método de diferencias finitas centradas en bloque, además de incorporar flujos externos como recarga, drenaje, bombeos, ríos, etc., organizándolos en paquetes individuales o módulos (para el caso de este trabajo no son considerados los módulos de recarga, drenaje, ríos). Para resolver sistemas complejos las

soluciones analíticas no existen, por lo cual es necesario su resolución mediante métodos numéricos, en MODFLOW la ecuación que describe el flujo de agua subterránea está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right] - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (25)$$

Donde, K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} son las componentes de la conductividad hidráulica en los ejes x , y y z , h es la altura piezométrica [L], S_s es el almacenamiento específico del material poroso [L^{-1}], t es el tiempo [T] y W el flujo volumétrico por unidad de volumen, que representa fuente/sumidero de agua [T^{-1}].

En tanto para la simulación del transporte se optó por trabajar con MT3D-USGS que es el simulador de transporte de solutos en agua subterránea para MODFLOW, versión actualizada del USGS del código de transporte de solutos de agua subterránea MT3D desarrollado por Zheng (1990). En el desarrollo del presente trabajo se contempla el movimiento advectivo como predominante. La ecuación que gobierna el transporte es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial x} [v_x C] - \frac{\partial}{\partial y} [v_y C] - \frac{\partial}{\partial z} [v_z C] + W \frac{C'}{\theta} = \frac{\partial C}{\partial t} \end{aligned} \quad (26)$$

Donde, D corresponde a los coeficientes de la dispersión hidrodinámica longitudinal en las direcciones x , y y z en [L/T], v es la velocidad intergranular en [L/T], θ es la porosidad, W representa las fuentes/sumideros, C es la concentración en [M/L^3] y t es el tiempo [T].

Finalmente, la correcta aplicación de las ecuaciones anteriormente descritas permite obtener las alturas piezométricas y las concentraciones en función del espacio y tiempo a través de los balances realizados en cada celda.

4. Metodología

Dado que el presente trabajo busca demostrar la diferencia que existe al considerar técnicas de estimación versus simulación, hacemos uso de técnicas geoestadísticas para determinar la distribución espacial de la transmisividad con ayuda de SGeMS, posteriormente se trabaja con el modelo matemático seleccionado para la solución de la ecuación del flujo y transporte. En esta sección se realiza una breve descripción de los resultados tras aplicar técnicas geoestadísticas y de los softwares utilizados para modelar el flujo y transporte.

Para el caso de la estimación de la conductividad hidráulica determinada mediante la técnica de krigado ordinario (KO), se utiliza el software MODFLOW-2005 y MT3D, para la solución de la ecuación de flujo y transporte respectivamente, apoyado del interface grafica de ModelMuse (Winston, 2009).

Mientras que para el caso de las 100 simulaciones equiprobables de campos de conductividad hidráulica (K), utilizaremos los ejecutables de MODFLOW-2005 y MT3D, a través de códigos de programación como FLOPY de PYTHON mediante la plataforma de Jupyter Lab, para optimizar recursos computacionales.

4.1. Estimación

Estas técnicas permiten a partir de los datos conocidos de la variable de interés, la estimación de los valores donde no han sido muestreados, en el presente trabajo se emplea la técnica de krigado ordinario (KO). Cuyo resultado se traduce en un único campo interpolado condicionado a las mediciones proporcionadas.

Los datos del variograma han sido proporcionados en la sección 3.1, cuyo resumen se presentan en la tabla 2 y la expresión del modelo anisotrópico está definida en la ecuación (27). Luego de construido el modelo de continuidad y aplicado KO se obtiene el mapa de conductividad espacial que responde o está condicionado a los datos proporcionados.

Tabla 2: Resumen de parámetros del modelo anisotrópico

Parámetro	valor
Efecto pepita	0
Contribución	1
Rango máximo	200

Rango mínimo	50
Ángulo	90

Ecuación del modelo ajustado

$$\gamma_k(h) = Sph_{ax=200, \ az=50, \ \alpha=90}(h) \quad (27)$$

En la figura 4, se muestran los resultados de la aplicación de KO a la muestra original observándose una franja de conductividad media-alta de izquierda a derecha en la parte inferior del área de estudio, con un rango de valores que oscila entre -3.8 a -4.7 (log10m/s), como se intuyó en la sección de estadísticas de la muestra la continuidad se observa en el campo horizontal, siendo la zona de mayor transmisividad dicha franja, en tanto, los extremos tienen menor transmisividad quedando un campo vertical estratificado.

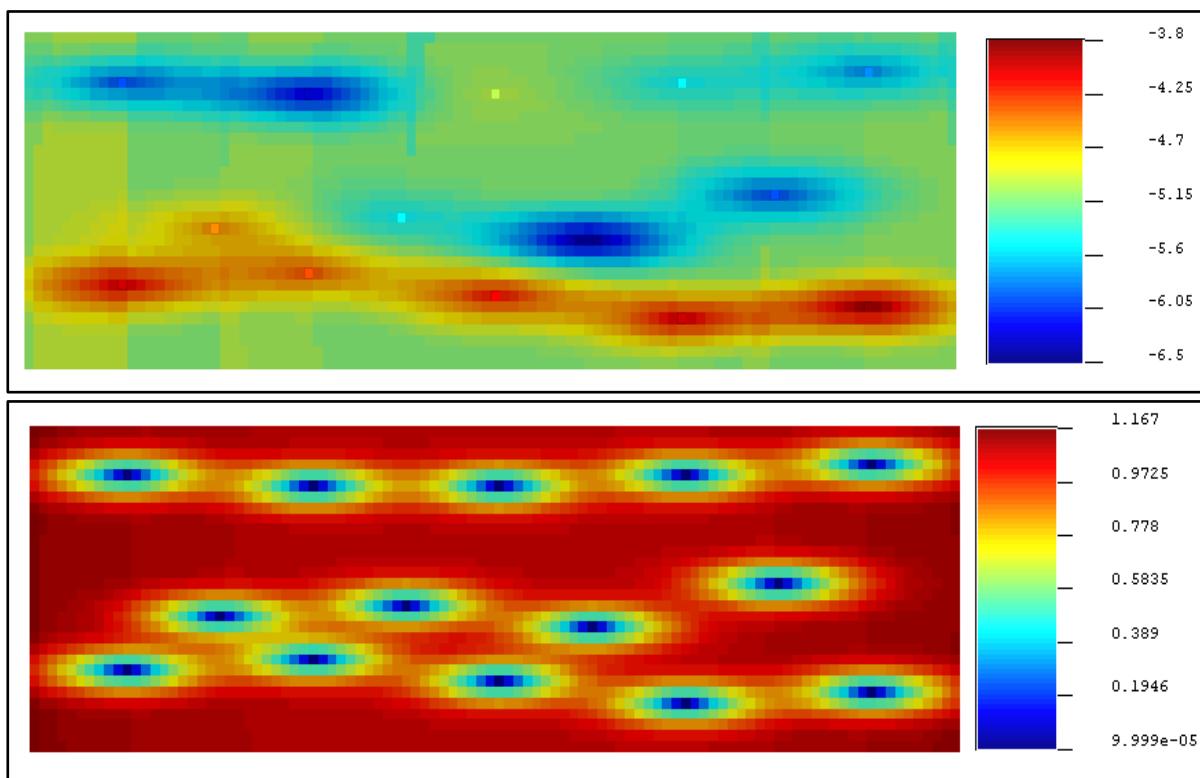


Figura 4: Interpolación de la muestra, arriba campo estimado de conductividad hidráulica con krigado ordinario (KO), abajo mapa de varianzas del campo de conductividad estimado

En la figura 5 se presentan los estadísticos tras la aplicación de KO, el tamaño de la muestra se ha visto incrementado de 14 a 3000 datos, la distribución de frecuencias de la muestra posee un comportamiento gaussiano (los valores mínimos se encuentran en los extremos y los máximos en el centro del histograma), comparando estos resultados con los estadísticos obtenido en la

figura 3 se observan valores similares con una disminución de la varianza del 80%, una reducción característica de los métodos de interpolación pues tienden a eliminar los valores extremos e incrementar la continuidad de los valores intermedios.

Ya estimado el campo heterogéneo de la conductividad hidráulica se procede a trabajar con el modelo de flujo en MODFLOW-2005. Para esto es importante tener en cuenta que SGeMS utiliza el formato de lectura y escritura de Geo-EAS y GSLib. Esto quiere decir que en el vector columna obtenido primero están los valores de las filas, luego las columnas y por último las capas, otra cosa para tener en cuenta es que el origen de coordenadas de SGeMS es diferente al de MODFLOW. SGeMS tiene el origen abajo, a la izquierda al fondo, mientras que MODFLOW arriba, a la izquierda, al fondo, por lo cual será necesario acondicionar los datos antes de cargarlos a ModelMuse.

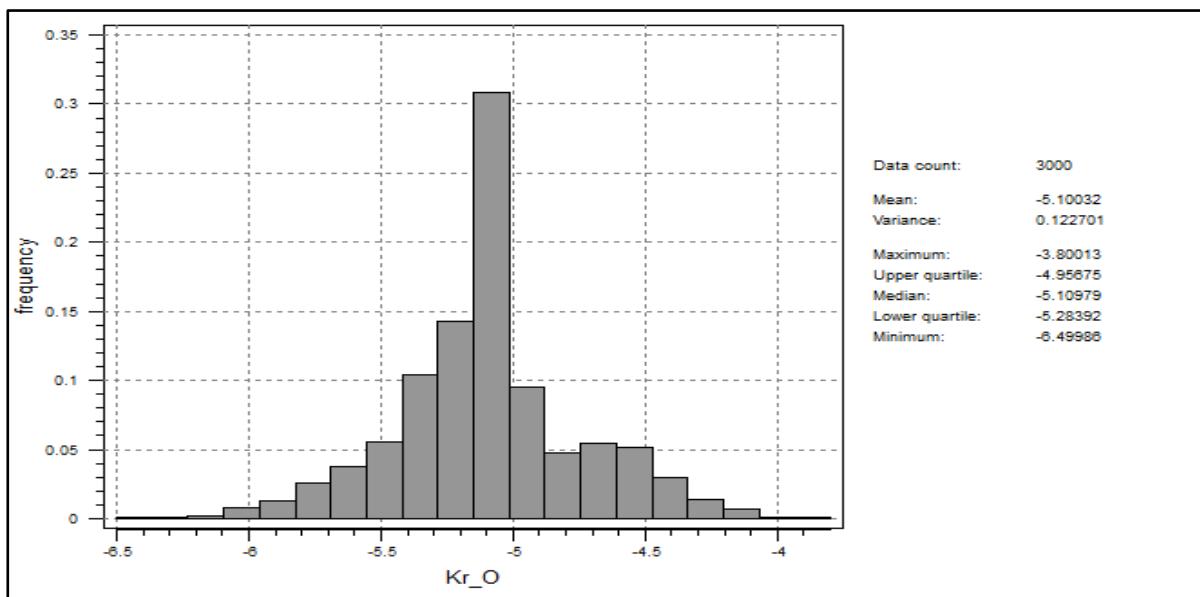


Figura 5: Histograma y principales estadísticas del campo estimado.

4.2. Simulación

Las técnicas de simulación estocástica permiten generar múltiples representaciones de una variable con arreglo a un determinado modelo estocástico, representando de esta manera las heterogeneidades de la o las variables de interés sobre los modelos de estimación que ofrecen una única respuesta que suaviza las reales dispersiones. El software SGeMS tiene un conjunto de herramientas que permiten simular una o más variables espacialmente distribuidas.

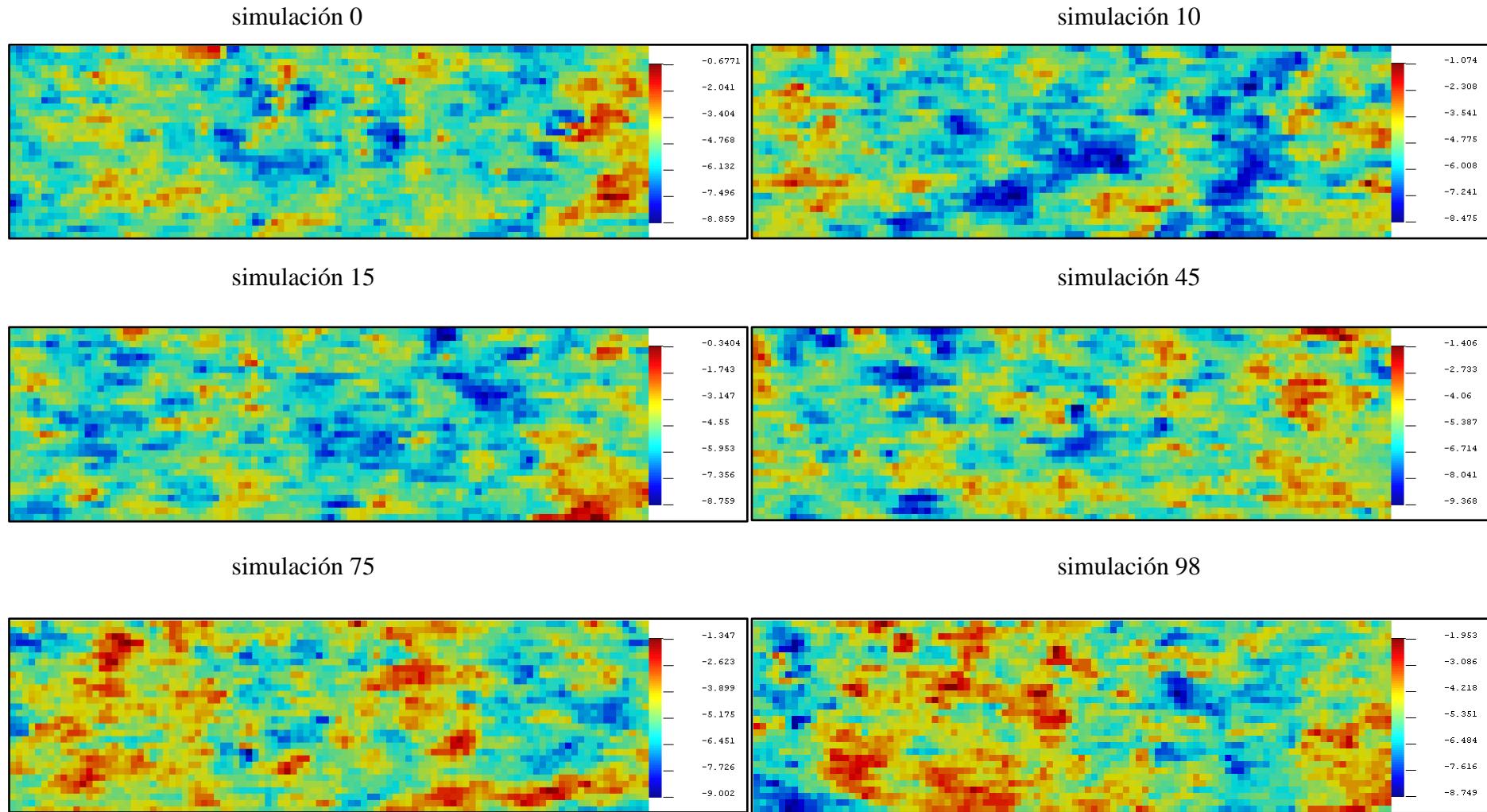


Figura 6: Campos generados con el algoritmo SGSim. se presentan algunos de los 100 campos resultantes tras la aplicación del algoritmo de simulación, generados con los valores del variograma utilizado en la estimación.

Influencia de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica

Para generar las 100 realizaciones de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica se utiliza el algoritmo de simulación secuencial gaussiana (SGSim). Al igual que en la sección 4.1 se hace uso de los datos de la tabla 1, el correspondiente semivariograma y definiendo un elipsoide de búsqueda de 700 x 700 m, para la generación de las realizaciones requeridas. Como se observa en la figura 6, los campos resultantes presentan gran heterogeneidad espacial de la conductividad hidráulica, siendo todos y cada uno de ellos equiprobables de representar la realidad, el análisis visual de los campos resultantes muestra la eliminación de estratos a diferencia de los resultados obtenidos con los métodos de estimación que mostraban claramente una estratificación en el plano vertical.

La figura 7 corresponde al mapa de varianzas condicionales, los valores de varianza más bajos se disponen en las locaciones que corresponden a los datos duros, a medida que nos alejamos de dichas locaciones se incrementa, se observa que existe mayor correlación de los datos dentro del área de estudio a comparación de los calculado con KO.

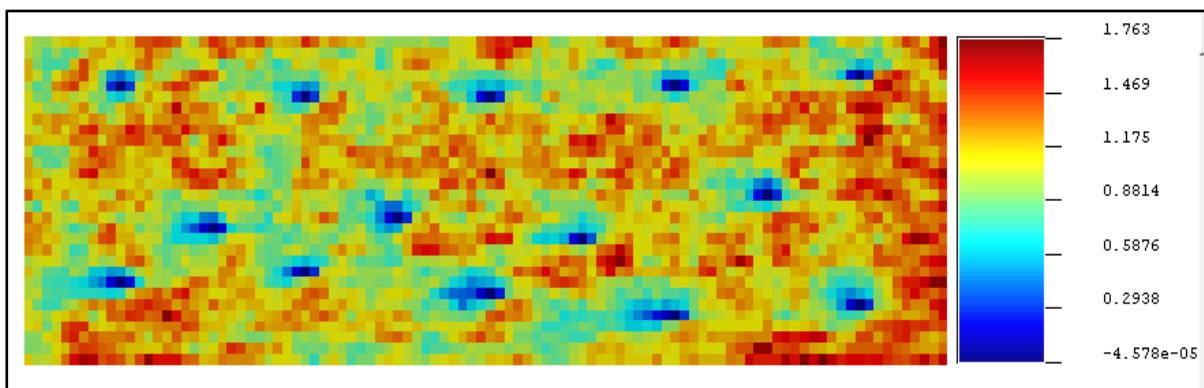


Figura 7: Mapa de varianzas condicionales de la simulación estocástica

En la figura 8 los estadísticos muestran que, a pesar de poseer heterogeneidad las propiedades estadísticas de la muestra como varianza y media son similares para cada realización, mostrando un comportamiento gaussiano.

Los métodos de interpolación buscan determinar el mejor estimador lineal minimizando la varianza. Son también conocidos como BLUE (Best Linear Unbiased Estimator) proporcionando una representación suave. Por el contrario, los métodos de simulación persiguen un objetivo distinto el cual consiste en reproducir simulaciones que reflejen la heterogeneidad espacial del parámetro estudiado, condicionado a los datos duros sin la necesidad de cumplir con la característica de BLUE (Fernández Martínez, 2005).

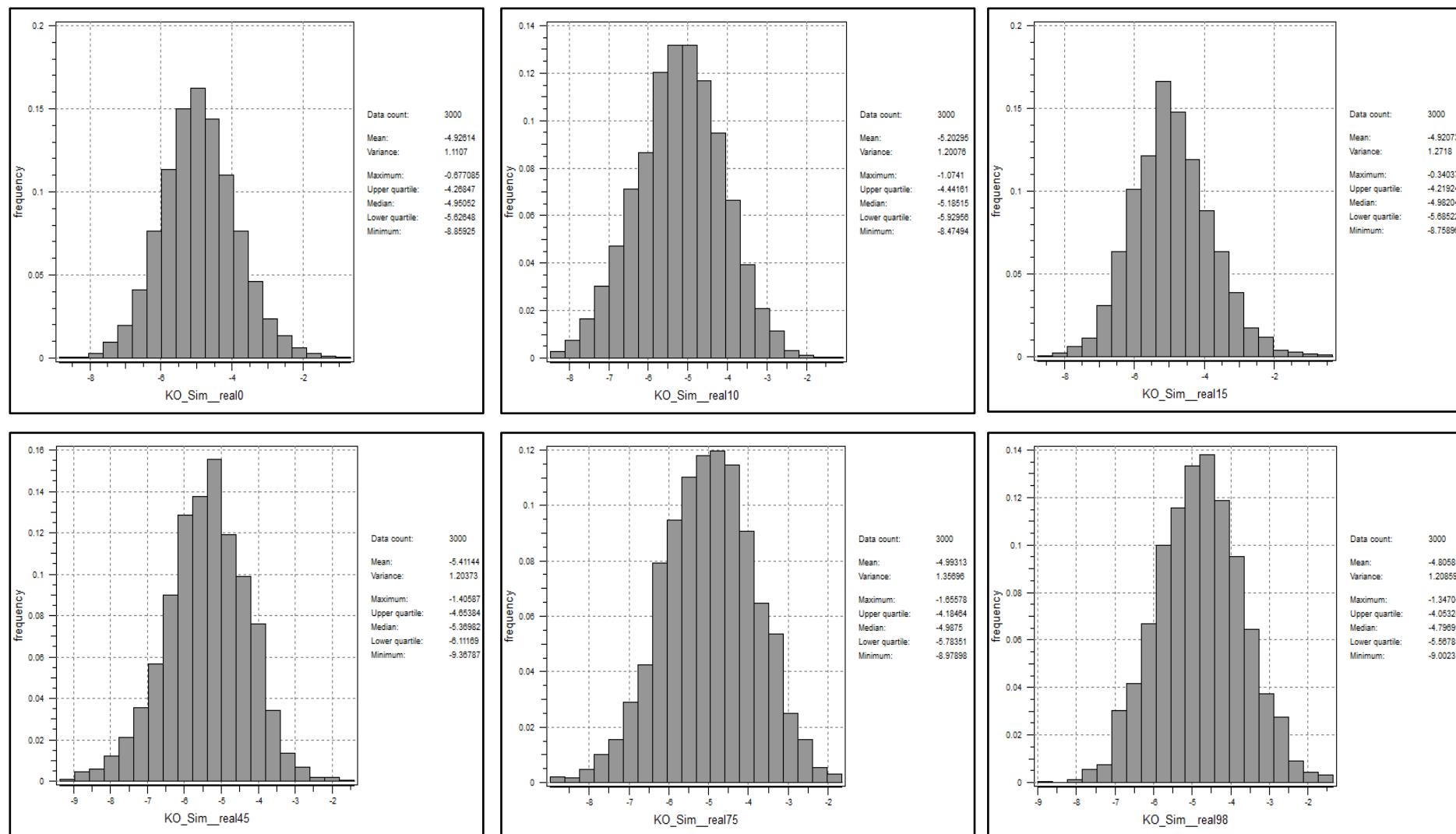


Figura 8: Histogramas de simulación y principales estadísticos: se presentan histogramas de algunos de los campos generados en la simulación estocástica de conductividad hidráulica junto a las principales estadísticas de la muestra.

Al igual que en el ítem anterior, ya acondicionada la información se procede a elaborar el modelo de flujo y transporte para cada una de estas simulaciones, en este caso al tener varias simulaciones que ejecutar no trabajaremos con ModelMuse, el utilizar esta interface supone un gasto innecesario de recursos computacionales y tiempo del modelador, entonces se optó por trabajar con lenguajes de programación de código abierto, los cuales permiten a través de empleo de líneas de comando crear, correr modelos y pos-procesar resultados. El uso de lenguajes de programación brinda mayor facilidad en el análisis de sistemas complejos que resulta difíciles o prácticamente imposibles de realizar al utilizar interface gráfica de usuario o por sus siglas en inglés GUI (Bakker et al., 2016)

El lenguaje de programación elegido es Python, un lenguaje que ha crecido rápidamente y viene siendo utilizado en numerosas aplicaciones científicas (Bakker & Kelson, 2009; Pérez et al., 2011), se puede ejecutar MODFLOW utilizando FLOPY que contiene los módulos de MODFLOW, MT3DMS, SEAWAT, etc., (Bakker, 2014), además de poseer extensas bibliotecas para diversos tipos de análisis e ingreso de datos.

La construcción de los scripts se realiza a través de un interface de usuarios basada en un servidor web denominada Jupyter Lab que ofrece un entorno de trabajo interactivo (Arsys, 2020), este visor web nos permite la construcción de un código para la generación automática de las 100 simulaciones de flujo y transporte, así como el pos-procesamiento de los resultados.

4.3. Estructura del medio, condiciones de contorno, parámetros

Este trabajo considera un modelo bidimensional heterogéneo de sección transversal en el plano xz , con una extensión del modelo de 1000 metros de longitud y 300 metros de altura, discretizadas en 100 columnas (sentido longitudinal x) y 30 capas (sentido vertical z), utilizando una sola fila por cada capa (sentido frontal y) siendo las dimensiones de las celdas (10, 1, 10) m. Las 30 capas del modelo se consideran como CONVERTIBLE (pueden ser confinado/no confinado) con transmisividad variable, un aspecto importante para la simulación de flujo es determinar correctamente las condiciones de contorno e iniciales, puesto que, estas determinan la interacción entre la masa de agua y el exterior, para el presente trabajo se utiliza la condición de Dirichlet (primer tipo) la cual indica una altura piezométrica fija. Se establece un nivel constante en los extremos de 500 m en el borde izquierdo y 300 m en el derecho, ubicándose en la primera columna desde el fondo de la capa 1 hasta la capa 29 y en la última columna desde el fondo de la capa 21 hasta la capa 29 respectivamente. Ver figura 9.

En la simulación de flujo, los parámetros utilizados son los resultados de los campos obtenidos de la aplicación de las técnicas geoestadísticas para determinar la heterogeneidad de la conductividad hidráulica, para efectos prácticos se asume que el acuífero es isotrópico, es decir, la conductividad hidráulica horizontal es igual a la vertical ($K_x = K_z$), este supuesto se realiza dado que la heterogeneidad está siendo contemplada en la variabilidad espacial a lo largo del plano horizontal (eje x).

En la discretización temporal, se establecen 3 períodos, un estacionario y 2 transitorios con una duración total de 80 años cuyas longitudes son las siguientes: el primero con una duración de 1 segundos (s), el segundo de 864000 segundos (10 días) durante el cual se suministra el contaminante y por último un periodo de 80 años, que muestra el desplazamiento de la masa de contaminante suministrada.

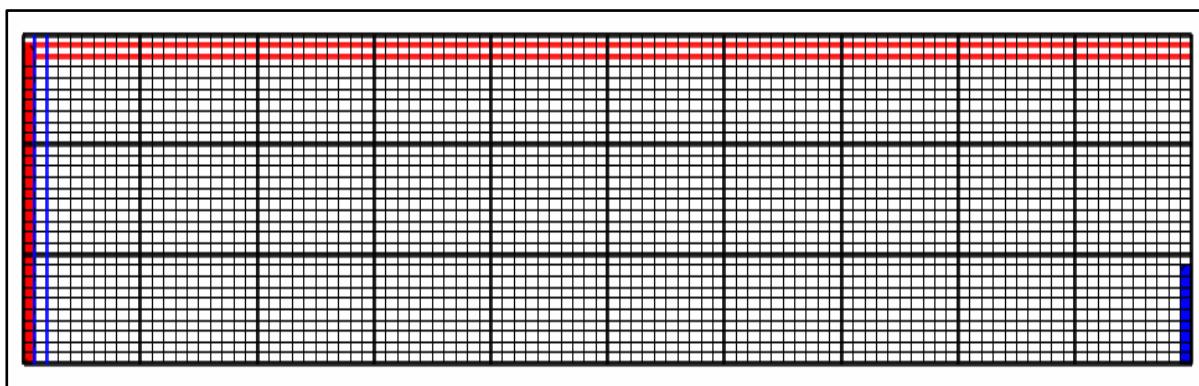


Figura 9: Discretización espacial del modelo, plano xz (100 columnas, 1 fila y 30 capas)

Como contaminante se considera una fuente de cadmio como soluto conservativo, cuya concentración es conocida y constante durante 10 días correspondiente al segundo *stress period* (fuente = 100 Cd, inicia en $t = 1$ s hasta $t = 864001$ s), mismo que está siendo suministrado en el extremo izquierdo entre las capas 1 a 29. Se contempla como predominante el movimiento advectivo por lo cual los términos de dispersión serán considerados nulos.

La ecuación del transporte de masa es resuelta a través de métodos eulerianos-lagrangianos comúnmente denominados métodos mixtos, específicamente el método híbrido de las características (HMOC), utilizada con mayor frecuencia en campos heterogéneos debido a los cambios bruscos de concentraciones (Fernández Torroba, 2004).

5. Resultados y discusiones

En esta sección se presentan y comentan los resultados obtenidos de la solución del modelo de flujo y transporte en el modelo interpolado, así como en el estocástico. Los resultados obtenidos se han dividido en dos grupos:

5.1. Modelo de flujo

El resultado de la simulación de flujo a partir de la conductividad hidráulica obtenida por krigeados se presenta en la figura 10, las celdas que se encuentran saturadas están coloreadas de celeste, en tanto, las celdas de color marrón indican las celdas secas durante el periodo de simulación.

Como era de esperarse, el flujo se desplaza desde las celdas con mayor a menor altura piezométrica (desplazamiento de flujo de izquierda a derecha), el análisis visual de los resultados indica que el flujo va descendiendo de forma gradual desde la cota 500 m hasta la salida del modelo que se encuentra a 300 m en el borde derecho.

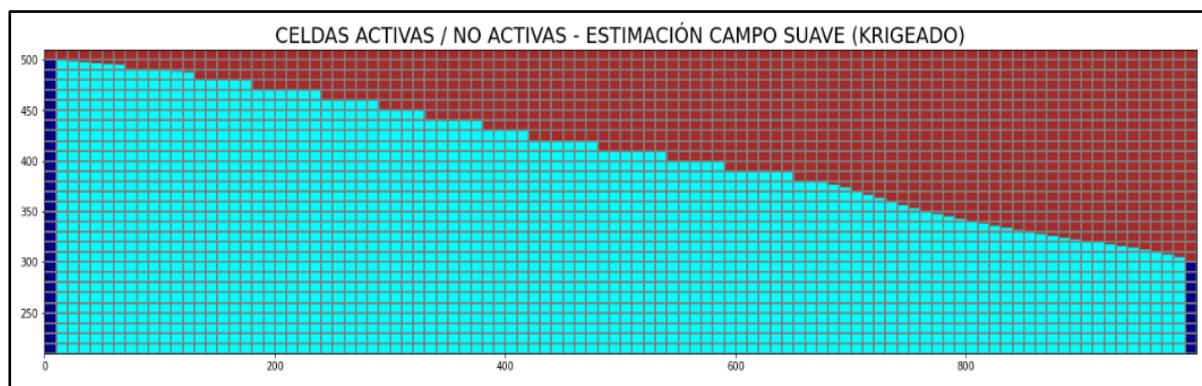


Figura 10: Modelo de flujo simulado a partir de k estimada mediante krigeados - celdas activas y no activas

La gráfica de los niveles piezométricos confirma que el descenso se produce de forma gradual tal como se indicó en el análisis visual. Las líneas de altura piezométrica prácticamente paralelas en el plano z, indican que se tiene un flujo horizontal fuerte, existiendo flujo vertical débil en los extremos de la discretización del modelo, hacia la parte central del modelo las líneas piezométricas tienden a curvarse, esto significa que entre los 400 a 700 metros (sentido longitudinal x) existe una zona con valores bajos de permeabilidad que dificulta el movimiento del agua, esto es corroborado con la figura 11 (zona de baja permeabilidad ubicada a 350 m de profundidad).

Se cuantifica aproximadamente un total de 1.288 hm³ de agua ha circulado por el sistema durante el periodo total de simulación (80 años).

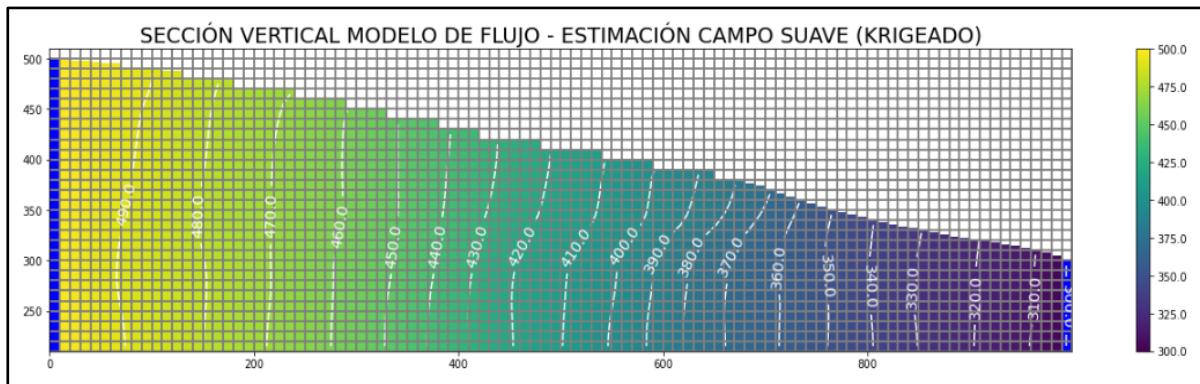


Figura 11: Alturas piezométricas del modelo de flujo simulado a partir de K estimada mediante krigedo

Antes de dar por correcto y únicos los resultados obtenidos del modelo de flujo en un campo estimado (modelo determinista único), debemos recordar que la heterogeneidad es una propiedad intrínseca del entorno geológico y la forma de representarla es a través de un enfoque estocástico, que permite cuantificar la incertidumbre de la distribución espacial de la conductividad hidráulica en masas de agua subterránea (Gómez-Hernández & Wen, 1998).

El paso siguiente consiste en realizar la simulación de flujo de los 100 campos de conductividad hidráulica generados, resolviendo numéricamente para cada caso la ecuación de flujo (simulación de Monte Carlo) y como se mencionó anteriormente esto es posible a través del uso de la biblioteca Flopy en Python, que permite programar y procesar un gran número de realizaciones de modelos basados en MODFLOW (Bakker et al., 2016) a un bajo coste computacional, el script generado para dicha simulación se puede ver en el anexo 1, también disponible para futuras consultas de otros usuarios en las siguientes direcciones web:
<https://github.com/arnold-carrasco/Stochastic-simulation-hydraulic-conductivity-heterogeneity.git>;
<https://github.com/modflowpy/flopy/pull/1089/commits/fc35fb2ad888f098550e5e7b3a64a7766883dd>

28

Como era de esperarse los resultados muestran que existe gran variabilidad entre las posibles soluciones del modelo flujo estocástico, teniendo todos y cada uno de ellos la misma probabilidad de representar el movimiento del flujo en el subsuelo. El perfil de lámina de agua se ve influenciado por la heterogeneidad de la conductividad hidráulica a lo largo del área de estudio en todas las simulaciones, la figura 12 muestra algunas de las realizaciones de la simula-

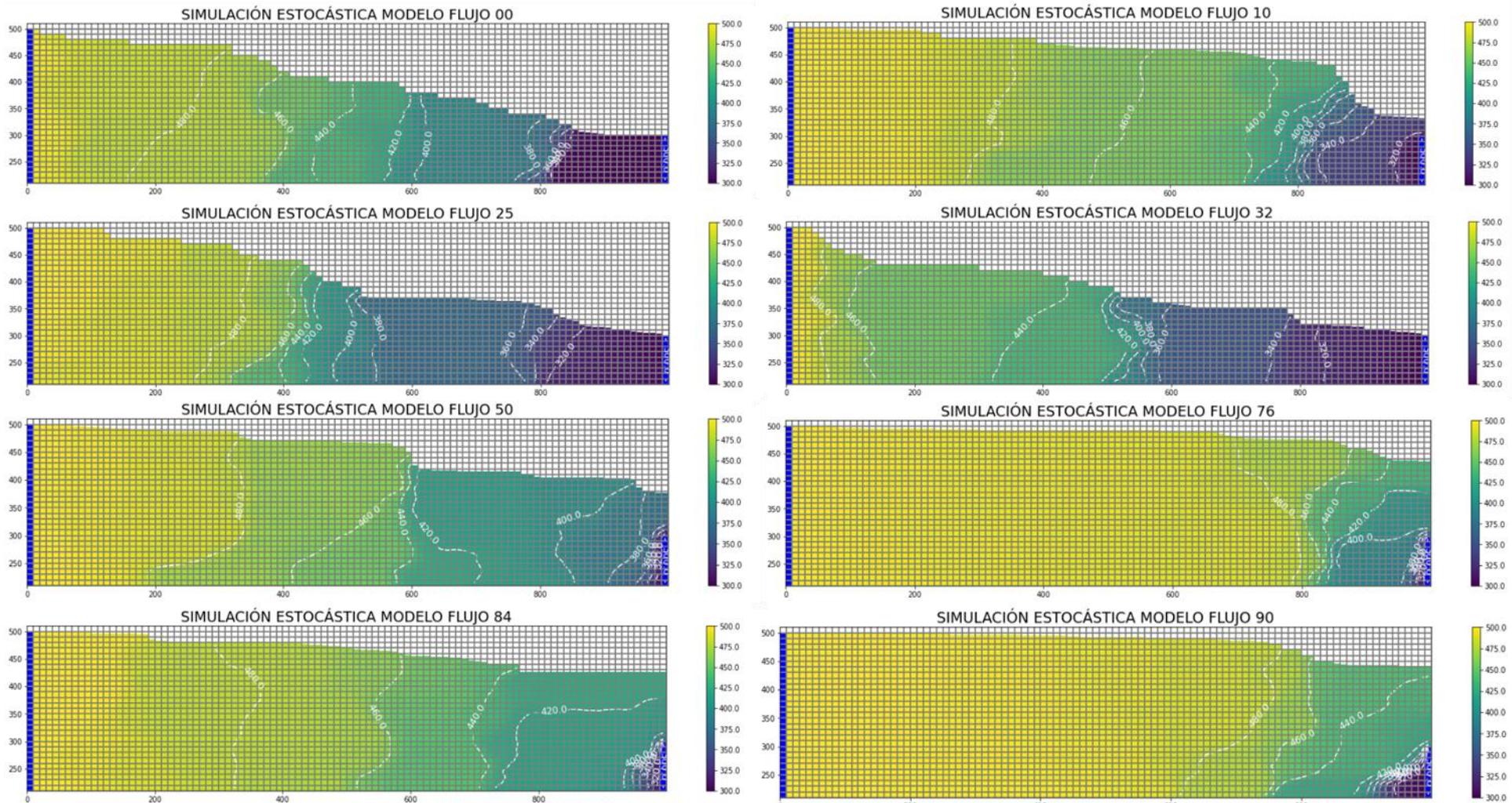


Figura 12: Campos de simulación estocástica de flujo: se presentan algunos de los campos simulados obtenidos

ción estocástica generada. Los cuatro modelos que se encuentran en la parte superior de la figura 12 muestran niveles piezométricos altos hasta una distancia de 900 metros del borde izquierdo disminuyendo hacia los últimos 100 metros del modelo para alcanzar la altura de 300 metros, mientras que algunas otras simulaciones como las de los modelos de flujo 50, 76, 84 y 90 por mencionar algunos, muestran niveles piezométricos que superan ampliamente el nivel prescrito en el borde derecho (el flujo se encuentra en celdas por encima de la capa 21), siendo esto un indicativo de permeabilidades muy bajas en el acuífero, impidiendo el descenso de la lámina de agua en los primeros 1000 metros. La gran diversidad de resultados responde a la representación de la heterogeneidad de la permeabilidad en el área de estudio.

El pos-procesamiento de los resultados del modelo de flujo consiste en elaborar un mapa de probabilidad de celdas saturadas del conjunto de soluciones de la simulación estocástica, esto se obtiene al convertir la matriz de alturas piezométricas de cada simulación en un mapa de indicadores (definidos como una variable binaria), donde para cada celda del acuífero saturada y no saturada, le corresponde el valor de uno y cero respectivamente. El código elaborado para el procesamiento de estos datos se puede ver en el anexo 3. El promedio de las matrices (100 simulaciones) muestra un mapa de probabilidad de celdas saturadas, estableciéndose un rango amplio de posibles soluciones y ninguna de las soluciones individuales corresponde al modelo de krigiado.

Los promedios calculados en cada celda indican la probabilidad de ocurrencia que dicha celda se encuentre o no saturada en cada una de las 100 simulaciones. La figura 13, muestra un mapa de escala de colores que va de amarillo a azul, la coloración amarilla corresponde a las mayores probabilidades de celdas húmedas en las simulaciones, a medida que nos desplazamos hacia la parte superior derecha del acuífero la coloración va cambiando, esto debido a disminución de la probabilidad de que alturas piezométricas lleguen a ese nivel, la línea sólida de color rojo

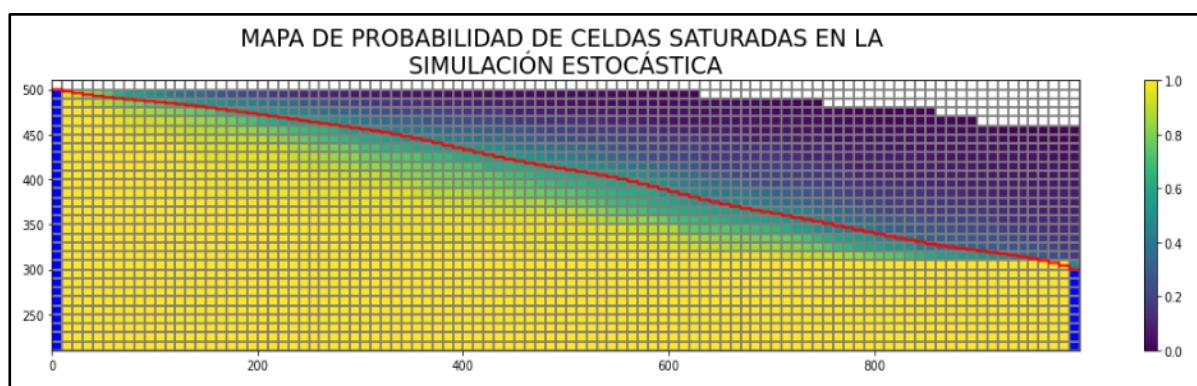


Figura 13: Mapa de probabilidad de modelos de flujo de la simulación estocástica

superpuesta sobre el mapa corresponde a la línea piezométrica de krigado, esta se encuentra alrededor de la probabilidad 50 % de ocurrencia (cerca de la media del modelo estocástico). Sin embargo, este resultado del krigado no asocia ningún nivel de incertidumbre en su predicción a diferencia de la media del método de Monte Carlo.

De la figura 13, observamos con una baja probabilidad que algunos de los modelos de flujo llegan con una altura piezométrica mayor a 400 metros al borde izquierdo (corresponde a algunos de los modelos mostrados en la figura 12), esto es atribuible a que la heterogeneidad ha disminuido algunos órdenes de magnitud y la longitud del área de estudio no es suficiente para que el flujo logre descender, agolpándose en el borde derecho e incrementando de esta manera el flujo hacia la izquierda.

La figura 14 es un extracto del mapa de probabilidades anterior, mostrándose únicamente aquellas celdas que tienen la probabilidad del 100 % de permanecer saturadas durante toda la simulación estocástica (corresponde a las celdas con valor 1.0), nótese que el perfil no corresponde a ninguna de las simulaciones individuales.

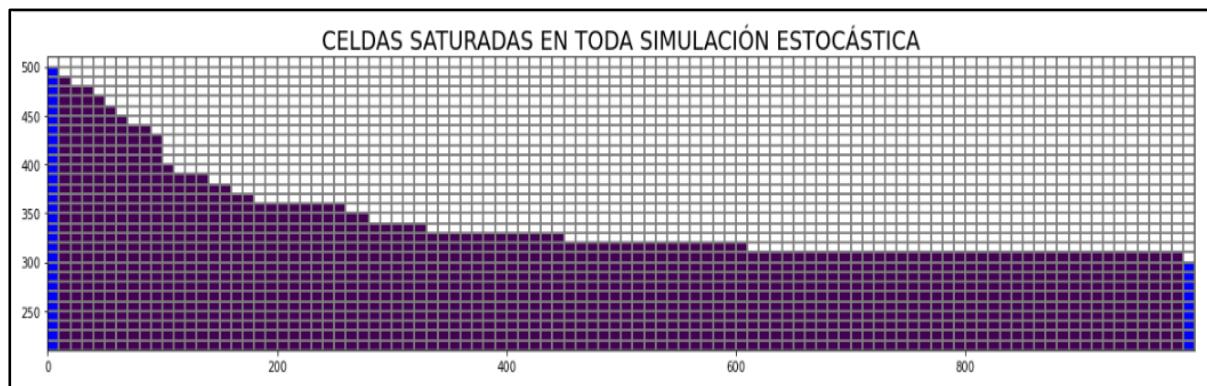


Figura 14: Celdas que permanecen saturadas durante las 100 simulaciones

5.2. Modelo de transporte

Para la evaluación del movimiento del contaminante, se han considerado 15 tiempos de observación los cuales son detallados en la tabla 3, los tiempos en las ubicaciones 0, 2 y 14 corresponden a las longitudes de los *stress period*. Se han dispuesto 9 cortes transversales como planos de control ubicados cada 100 metros en sentido horizontal (plano x) del área de estudio. El script de Python para simular el transporte puede ser consultado en el anexo 1 y anexo 2, la generación de gráficos tanto de flujo como transporte también puede ser consultados en el anexo 3, así como en la misma dirección web citada en el apartado anterior.

En el modelo se establece una fuente desde la cual se dispone de forma constante 100 gramos de cadmio (contaminante), ubicada en el límite izquierdo desde la capa 1 hasta la capa 29 (numeración correspondiente a lenguaje de programación), al igual que la condición de altura constante CHD. Dado que el contaminante no es inyectado al sistema directamente, la cantidad de cadmio que ingrese depende de la velocidad de flujo, es decir, la capacidad del flujo de arrastrarlo desde el borde izquierdo (fuente). Los resultados obtenidos muestran para el modelo interpolado, un rápido avance del contaminante por la parte inferior del sistema a una profundidad de entre 250 a 350 metros, donde está ubicado el estrato más conductivo (ver figura 4), en tanto en ambos extremos las velocidades de avance son menores, siendo la parte superior mucho menor y para la simulación de Monte Carlo las fronteras de mayor avance son completamente distintas en cada realización.

Transcurridos 7 años desde la liberación del contaminante, la masa de este presente en el sistema es muy reducida, existiendo pequeños residuos en la parte superior final del perfil de flujo (ver figura 15), dado que dicha zona posee valores bajos de permeabilidad que dificultan el desplazamiento del penacho de cadmio incrementando el tiempo de tránsito respecto a otras zonas del dominio.

Tabla 3: Tiempos (t) de observación del transporte del contaminante en el modelo de transporte

Item	Tiempos de observación del transporte de contaminante		Ítem	Tiempos de observación del transporte de contaminante	
	segundos	días/años		segundos	días/años
0	1		8	94672800	3.0 años
1	10800	3 horas	9	157788000	5.0 años
2	864000	10 días	10	220903200	7.0 años
3	1728000	20 días	11	946728000	30 años
4	4320000	50 días	12	1105000000	35 años
5	7776000	90 días	13	1578000000	50 años
6	15552000	0.5 años	14	2523800000	80 años
7	31536000	1.0 año			

El efecto de la heterogeneidad de la permeabilidad en la simulación del transporte es sumamente importante, se puede observar en la figura 16 varios mapas de concentraciones para distintos modelos de transporte producto de la simulación estocástica, la vista de los mapas en distintos tiempos de observación muestran lo complejo del desplazamiento del contaminante en el sub-

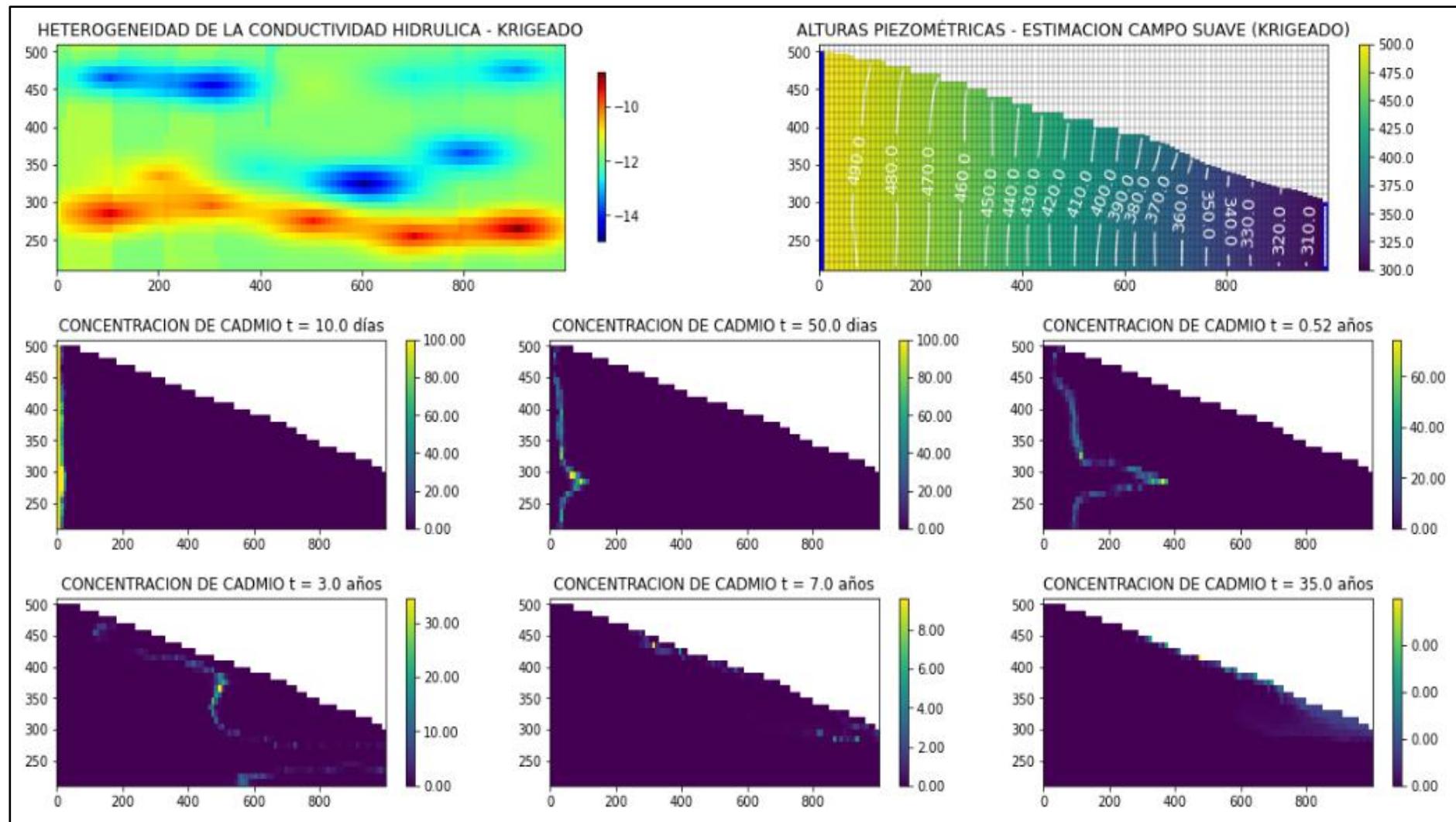
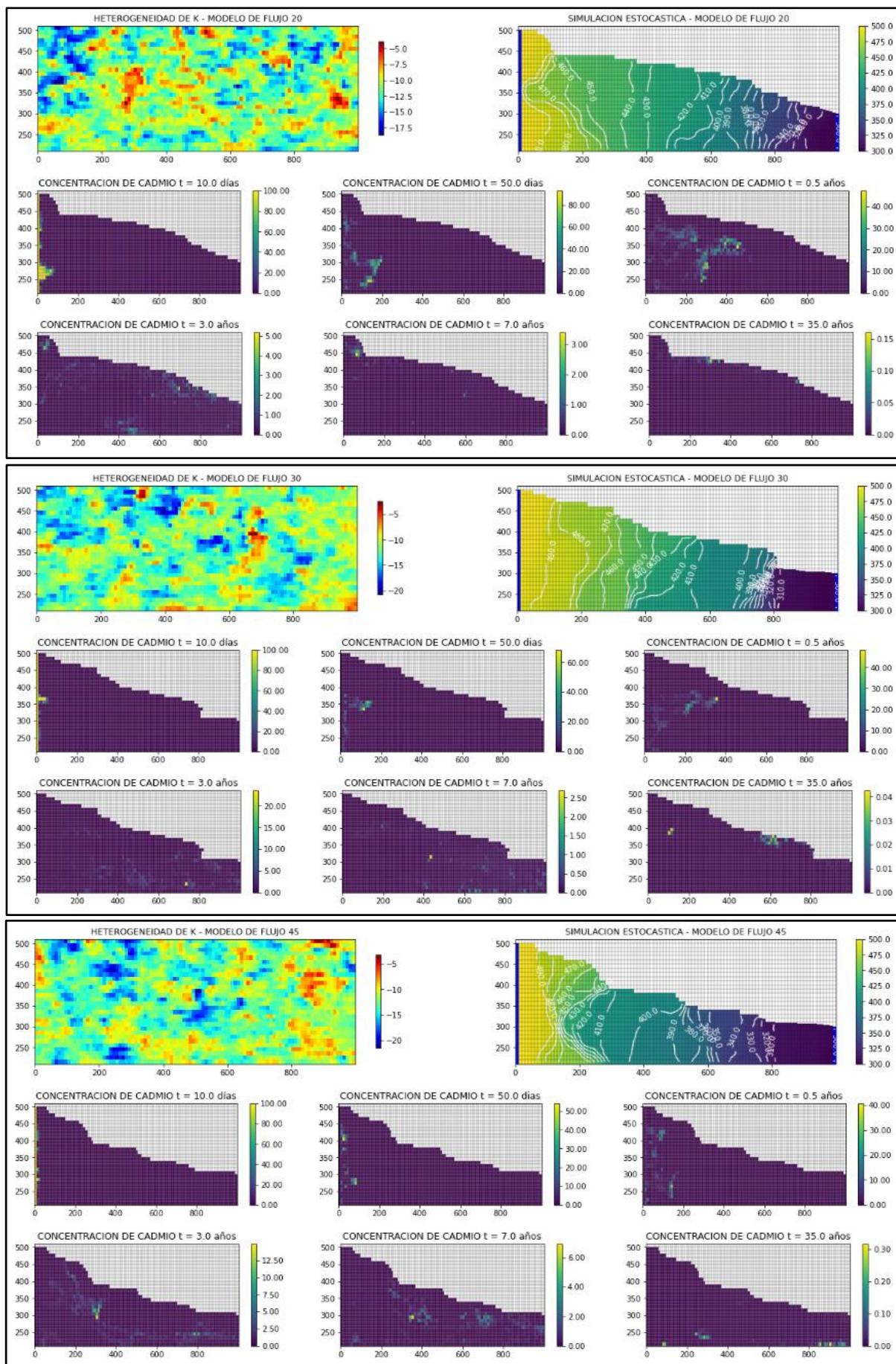


Figura 15: Mapa de conductividad hidráulica, alturas piezométricas y concentraciones en el modelo interpolado (krigeado)



Influencia de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica

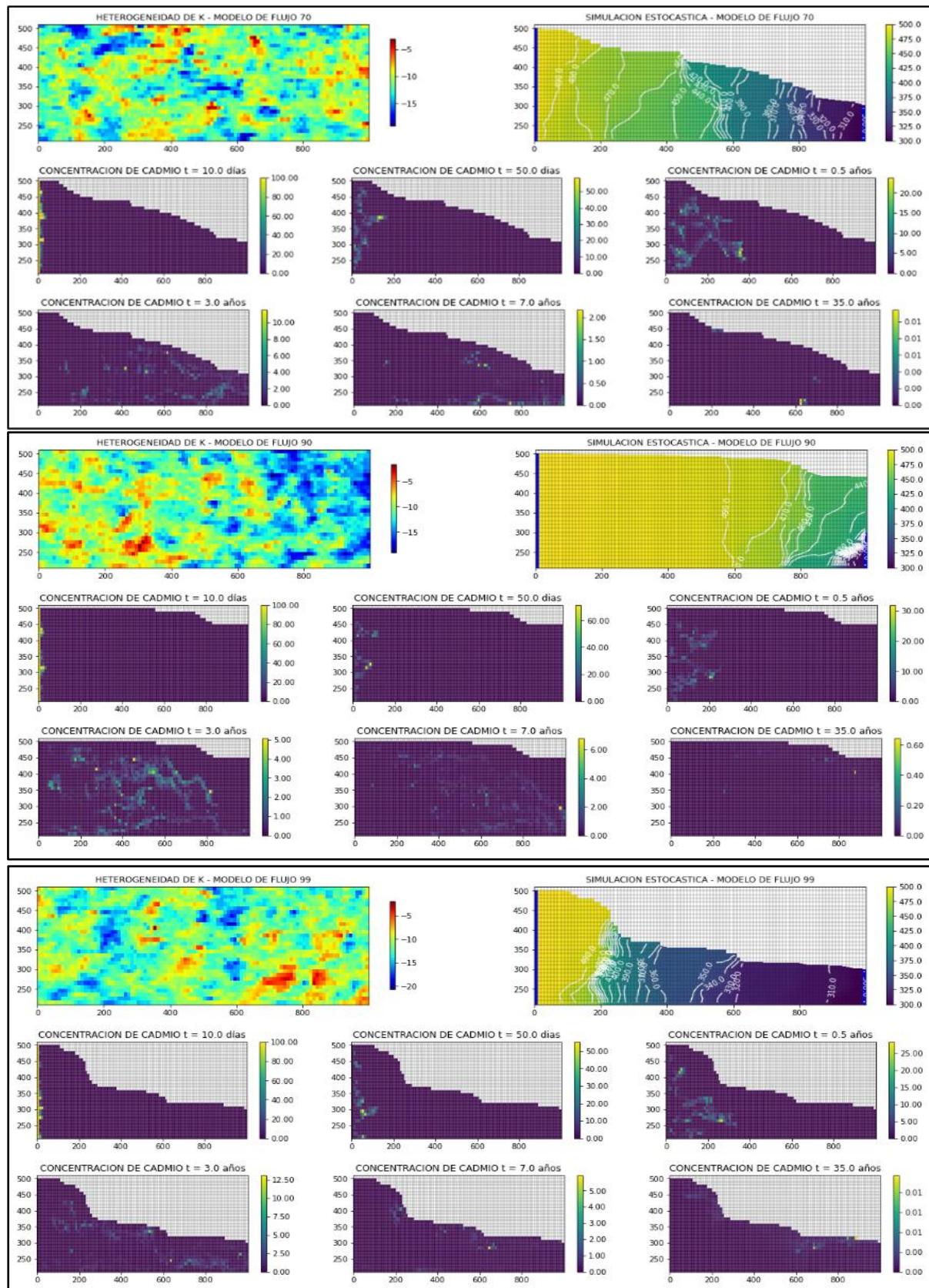


Figura 16: Algunos mapas de conductividad hidráulica, alturas piezométricas y concentraciones del modelo estocástico - modelo de flujo y transporte

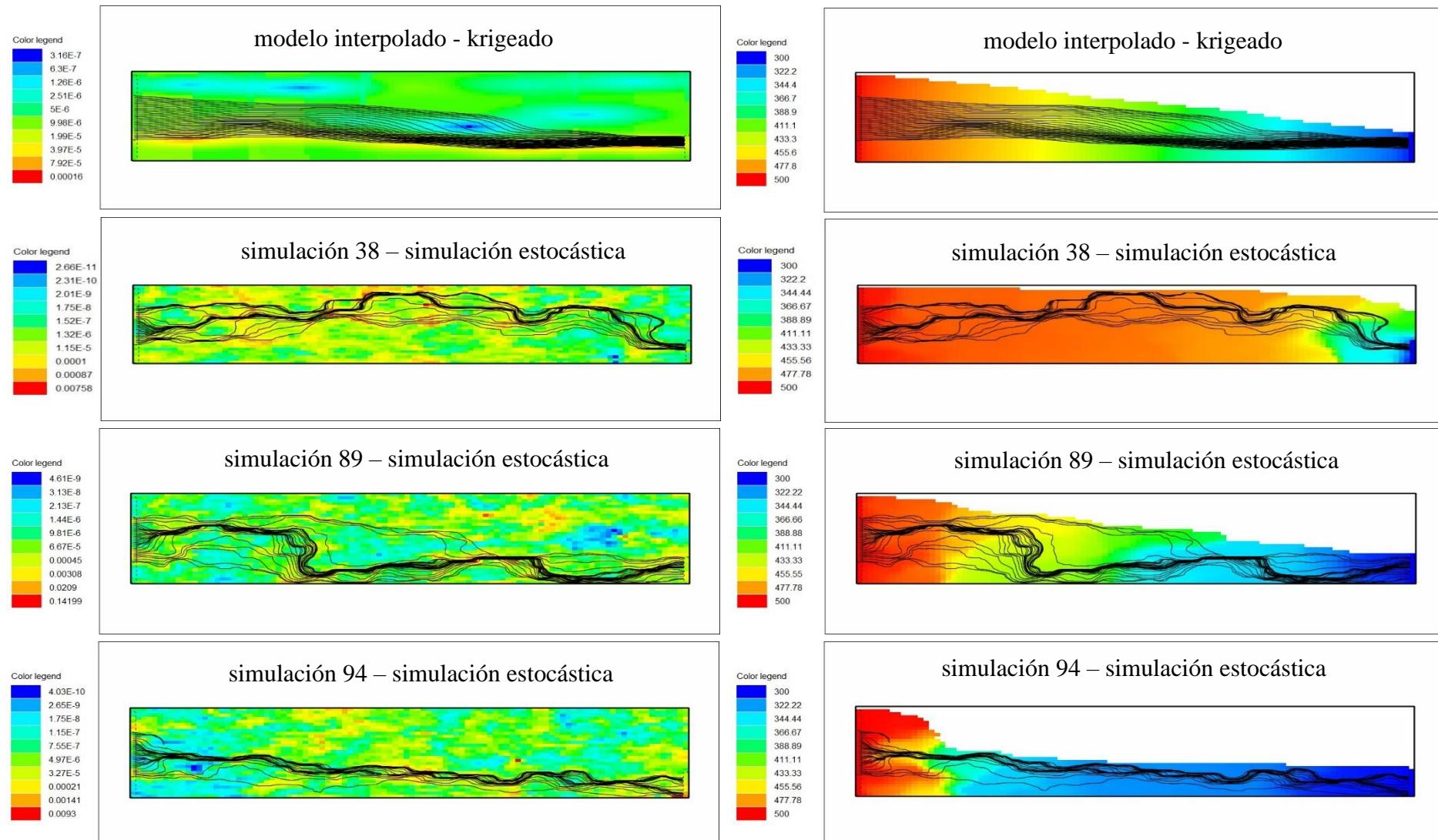


Figura 17: Trayectoria de partículas, a la izquierda sobre el mapa de conductividad hidráulica, a la derecha sobre el mapa de flujo.

suelo tras eliminarse los estratos verticales que se obtuvieron en el campo interpolado, es así que, se observa una mayor dispersión transversal y un desplazamiento caótico del penacho de cadmio, esto debido a que los contaminantes buscan desplazarse siguiendo rutas que ofrezcan menor resistencia (Sahuquillo, 2002), llegando a extenderse de esta manera sobre una mayor área en la formación hidrogeológica.

También se ha representado la trayectoria de partículas en el campo estimado y en algunos mapas de la simulación estocástica, disponiéndose de 30 partículas en el borde izquierdo desde la capa 8 hasta la capa 23, en el krigado las partículas describen una trayectoria rectilínea (paralela) en los primeros 500 metros, a partir del cual se aglomeran hacia la franja más conductiva hasta el punto de salida. La trayectoria descrita por las partículas en la simulación estocástica es variable, el mayor desplazamiento ocurre evitando las zonas de bajas permeabilidades, este comportamiento se recoge en la figura 17. La simulación 94 muestra partículas cuya trayectoria no ha llegado aún a la mitad del dominio, esto se debe a que la trayectoria seguida por dichas partículas ha caído sobre una zona de muy bajas conductividades y el tiempo de la simulación no ha sido suficiente para que estas logren salir hacia una ruta que ofrezca una menor resistencia.

Se identifica un comportamiento típico en el análisis visual de los resultados, una fracción del contaminante queda rezagado en todas las simulaciones en la parte superior del perfil de lámina de agua, esto se debe a que las simulaciones de Monte Carlo (100 mapas de permeabilidad) están condicionados por los datos duros de la muestra, a partir de los cuales se aplica el algoritmo de simulación y las medidas en la parte media-superior de la formación son valores bajos de conductividad (ver figura 2).

La solución de la ecuación del transporte contempla una porosidad efectiva de 25%, con un volumen de celda de 100 m³ (10, 1, 10), dado que la masa del contaminante es igual al producto de la concentración, volumen y porosidad efectiva, se supone solamente por fines operativos una porosidad efectiva del uno por ciento (1×10^{-2}) en el pos-procesamiento de los resultados, para que de esta manera la concentración en cada celda sea igual a la masa. El inicio de la salida del contaminante ocurre transcurrido medio año de la simulación para el modelo determinista, según se ve en la distribución temporal de la masa de Cd de la figura 18, estimada a partir de las concentraciones, la cual no asocia ningún nivel de incertidumbre, siendo necesario el empleo de modelos estocásticos para la incorporación de un grado de incertidumbre en los modelos de predicción.

Como se explicó al inicio de este apartado en el método de Monte Carlo, la masa que ingresa al sistema es variable, dando como resultado el histograma de la figura 19, las estadísticas del histograma indican los valores de 168.64; 1174.54 y 6481.62 correspondientes al mínimo, media y máximo de masa (en gramos) de Cd presente en el sistema tras la eliminación de la fuente, se ha superpuesto la masa estimada por krigado representada por la línea discontinua de color rojo, con un valor de 1.73 kilogramos tras la eliminación de la fuente.

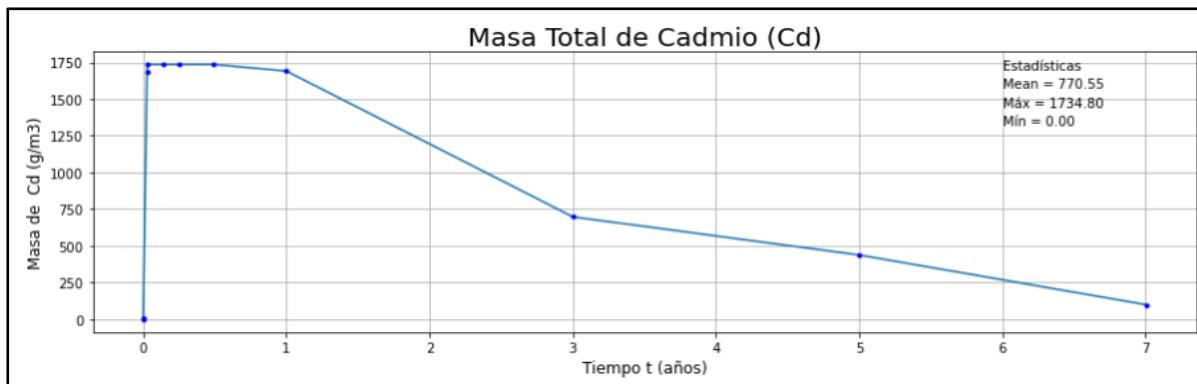


Figura 18: Evolución de masa total de cadmio (gramos) que ingresó al sistema

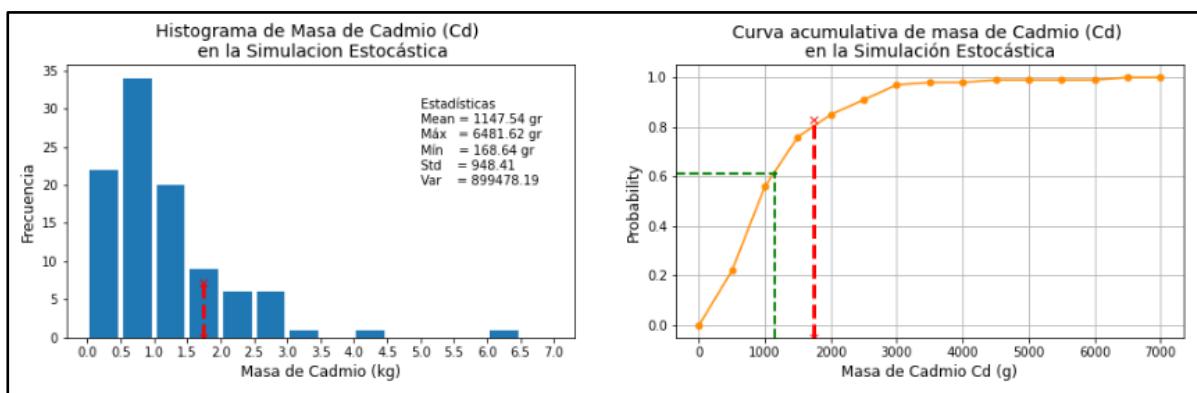


Figura 19: Histograma (izquierda) y curva distribución acumulada (derecha) de la masa total suministrada al sistema en la simulación estocástica

Según la curva de distribución acumulada (cdf) de la masa de cadmio, más del 80 % de las simulaciones predicen un ingreso de Cd menor al estimado por krigado, sobreestimando este último el ingreso medio de las simulaciones. Las simulaciones 94 y 89, corresponden a los ingresos mínimo y máximo respectivamente, las razones que justifican un ingreso bajo en la simulación 94 se encuentran en el mapa de conductividad, donde el límite izquierdo (ingreso de flujo) presenta tres zonas pequeñas ubicadas a las profundidades de 450, 400 y 300 metros con conductividades media-alta (-6.0 a -10.0 log10T), que permiten un fácil ingreso del conta-

Influencia de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica

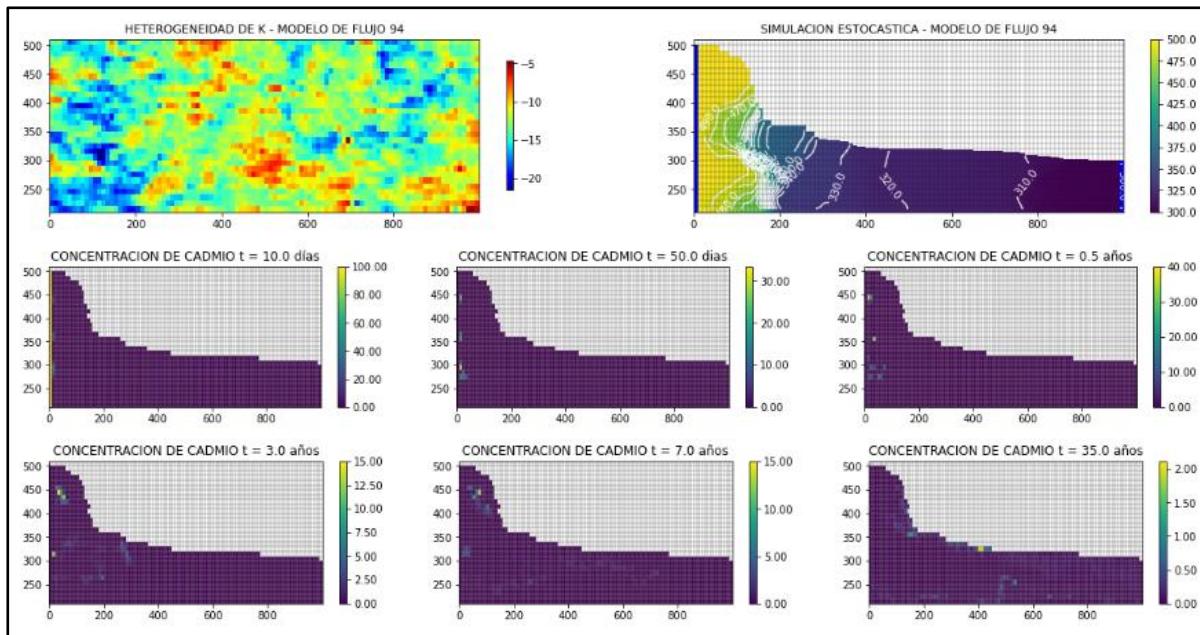


Figura 20: Modelo de flujo y transporte de masa correspondiente a la simulación 94 - mínimo ingreso de masa de Cd

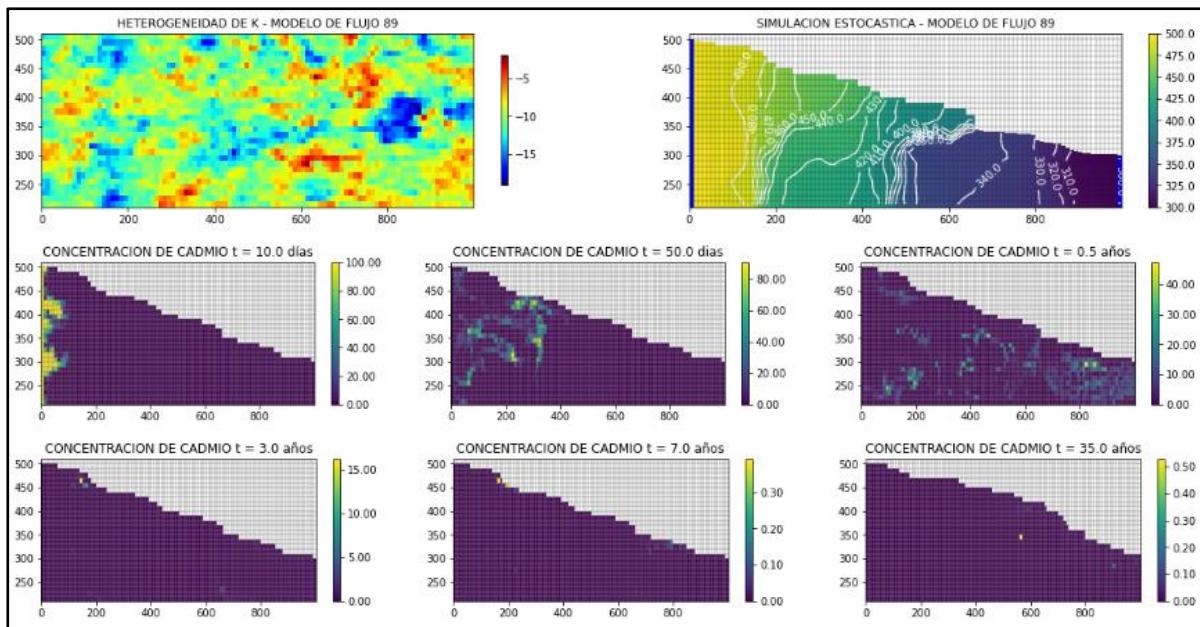


Figura 21: Modelo de flujo y transporte de masa correspondiente a la simulación 89 - máximo ingreso de masa de Cd

minante luego del cual el soluto se enfrenta a una zona de bajas conductividades ubicada entre los primeros 100 y 200 metros del plano horizontal que dificultan su desplazamiento, por el contrario la simulación 89 muestra una mayor extensión de la zona de media-alta permeabilidad (-5.0 a -10.0 log₁₀T), de izquierda a derecha, facilitando así la ruta de ingreso, la extensión del

área de altos valores de conductividad en esta zona permite el ingreso veloz de Cd desde los primeros instantes de la simulación, hecho que no ocurre en la simulación 94 según se aprecia en las figura 20 y 21 respectivamente.

En la figura 22, se presentan las curvas de avance del contaminante evaluado en los planos de control para el modelo interpolado, todas las curvas tienden hacia una asíntota horizontal transcurrido cierto periodo de tiempo, por lo que, podemos indicar que el transporte masivo ocurre dentro de los primeros 7 años de la simulación. Antes del primer año de la simulación la masa del contaminante ha llegado a todos los planos de control, ese comportamiento no ha sido



Figura 22: Curvas de avance de cadmio del modelo interpolado

recogido en la gráfica debido a los intervalos de tiempo en los que se captura la información, sin embargo, se tiene presente que las curvas que corresponden a los planos de control entre 400 y 900 metros deben tener un ligero desplazamiento en el origen del eje x (tiempo).

El mismo procesamiento se realiza para los resultados del método de Monte Carlo, la figura 23 muestra el conjunto de curvas de avance (líneas de color gris) en los primeros años de la simulación, cada curva representa la cantidad de masa total que ha logrado cruzar por los puntos de control en un tiempo dado. Se representa también un intervalo de confianza entre los percentiles 5 y 95 (curvas azules discontinuas), la línea roja discontinua representa la curva de avance del krigiado, finalmente la línea verde corresponde a la mediana, es evidente la diferencia entre los resultados de krigiado y la mediana de la simulación estocástica, en todos los puntos de control el resultado de éste (krigiado) ha superado dichos estadísticos.

Se han determinado a partir de las curvas de llegada de la figura 23, los histogramas de tiempos de llegada del 90 por ciento de la masa del contaminante a los diversos planos de control,

Influencia de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica

mostrándose en la figura 24, puntos de control a 100, 500 y 900 metros, la línea discontinua roja representa el tiempo de llegada para la misma fracción de masa del modelo determinista.

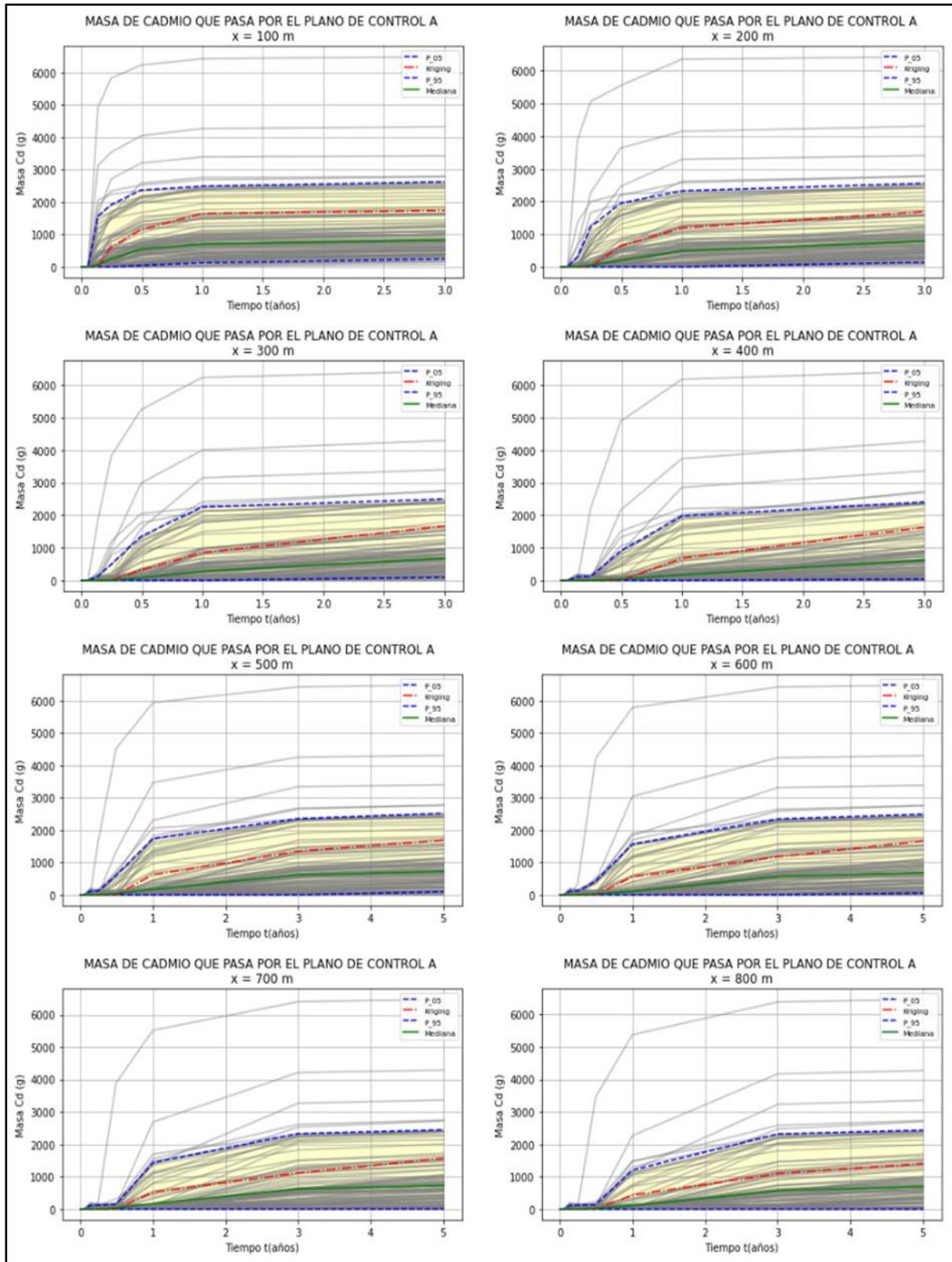


Figura 23: Curvas de avance en los planos de control ubicados cada 100 metros

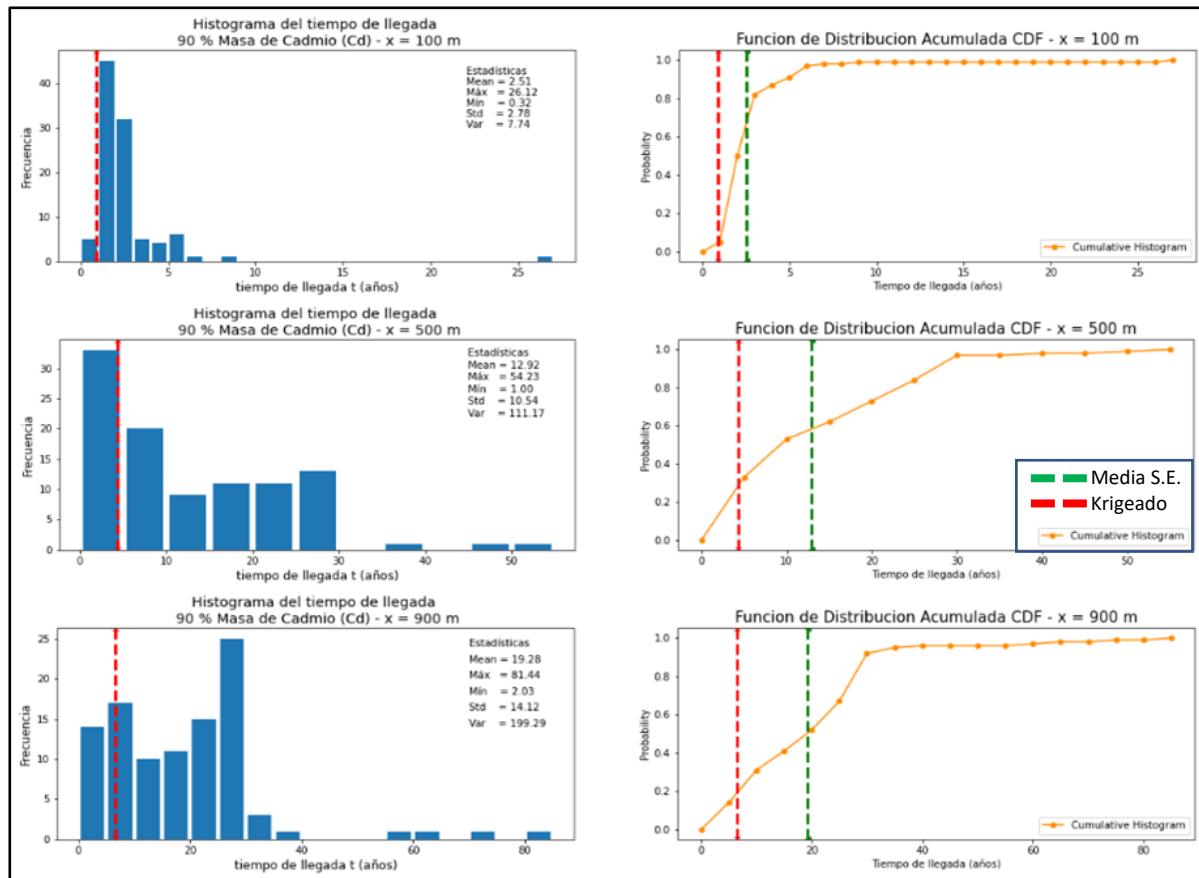


Figura 24: Histograma de tiempos de llegada del 90% de la masa de cadmio y curva de distribución acumulada para algunos planos de control

Comparando los valores medios del modelo estocástico de cada plano de control, con los resultados que arroja el krigeado, observamos que este último predice una subestimación de los tiempos de llegada, es decir, un rápido desplazamiento del penacho de contaminante observado en cada plano de control. Entre los planos de control ubicados a 100 y 500 metros hay un incremento del tiempo medio de llegada de 10.41 años, el incremento del tiempo de llegada medio entre los planos 500 a 900 metros corresponde a un 61 %, tomando como referencia el incremento del tiempo medio entre los planos 100 y 500, cuya sección está caracterizada por la presencia de conductividades medias-bajas.

Se ha realizado el mismo análisis para los tiempos de salida del sistema de diversas fracciones de masa del contaminante, el script utilizado puede consultarse en el anexo 4. A partir de estos histogramas se ha determinado la curva de distribución acumulada de tiempos de salida para cada caso, como se muestra en la Figura 25. El histograma de tiempos de salida del 90 por ciento de la masa de contaminante se observa en la Figura 25, el set de tiempos de salida muestra un mínimo de 3 años aproximadamente y un tiempo máximo que supera los 80 años. Sobre el

histograma se trazó el tiempo de salida de krigado (línea discontinua roja) para la misma fracción de masa, y la línea de color verde sobre la curva distribución acumulada (cdf) responde a la media de las simulaciones de Monte Carlo, cuya probabilidad de ocurrencia es no mayor de 50%.

Para las fracciones del 75 y 50 por ciento del contaminante los resultados se muestran en las Figura 26 y 27 respectivamente, obteniendo tiempos máximos de llegada de 66 y 41 años, el análisis de los histogramas en la Figura 25 indican que poco más del 25 % de los modelos predicen tiempos de salida en un intervalo entre 25 a 30 años, mientras que para las fracciones de 75 y 50 por ciento de la masa, los intervalos con mayor frecuencia son de 4 a 6 años para los $\frac{3}{4}$ de la masa y de 2 a 4 años para la mitad de la masa, cada intervalo tiene una frecuencia de ocurrencia de 26 y 32 por ciento respectivamente.

La media de la simulación estocástica determinada para todos los casos (fracciones de masa) es mayor que el resultado del modelo estimado (aproximadamente 3 veces), esto quiere decir que, el método de krigiado está subestimando los tiempos de salida, indicando un rápido desplazamiento del penacho de contaminante por la sección de estudio, esto se debe al suaviza-

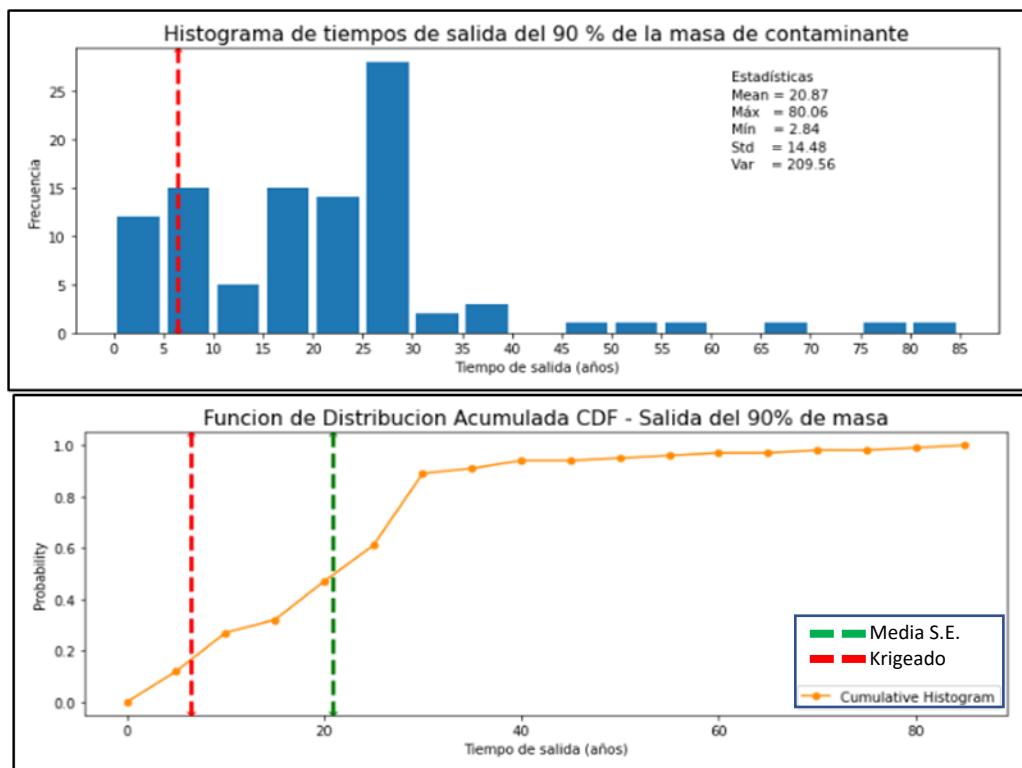


Figura 25: Histograma de tiempos de salida del 90% (arriba), función de distribución acumulada (CDF) de los tiempos de salida (abajo)

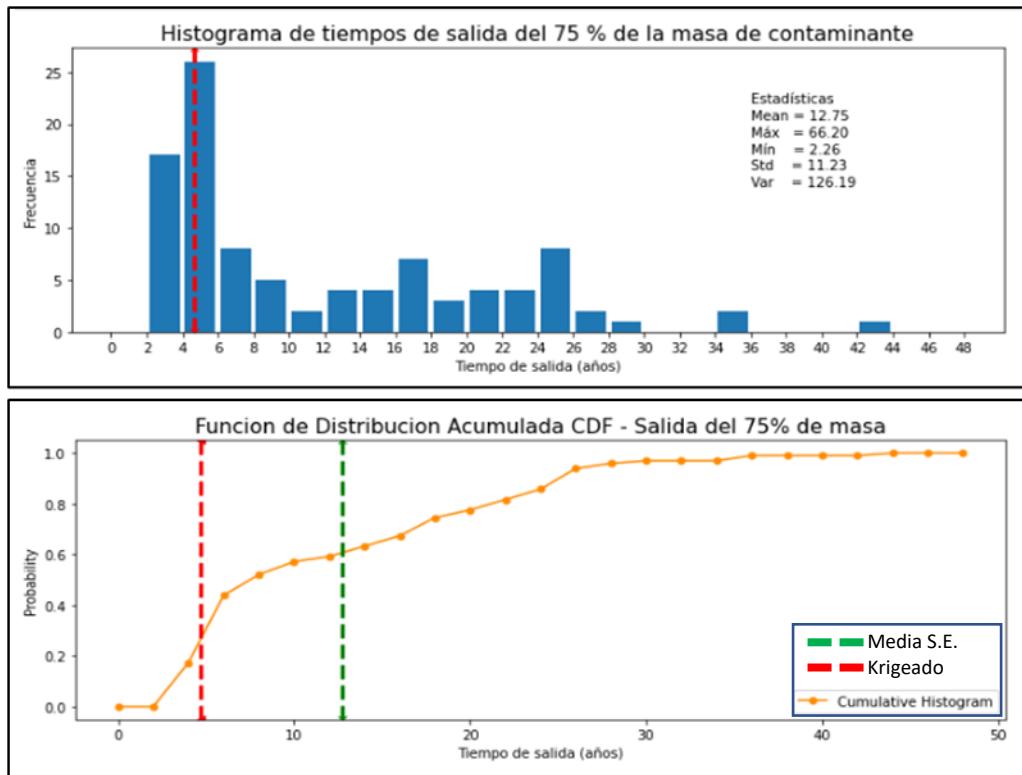


Figura 26: Histograma de tiempos de salida del 75% (arriba), función de distribución acumulada (CDF) de los tiempos de salida (abajo)

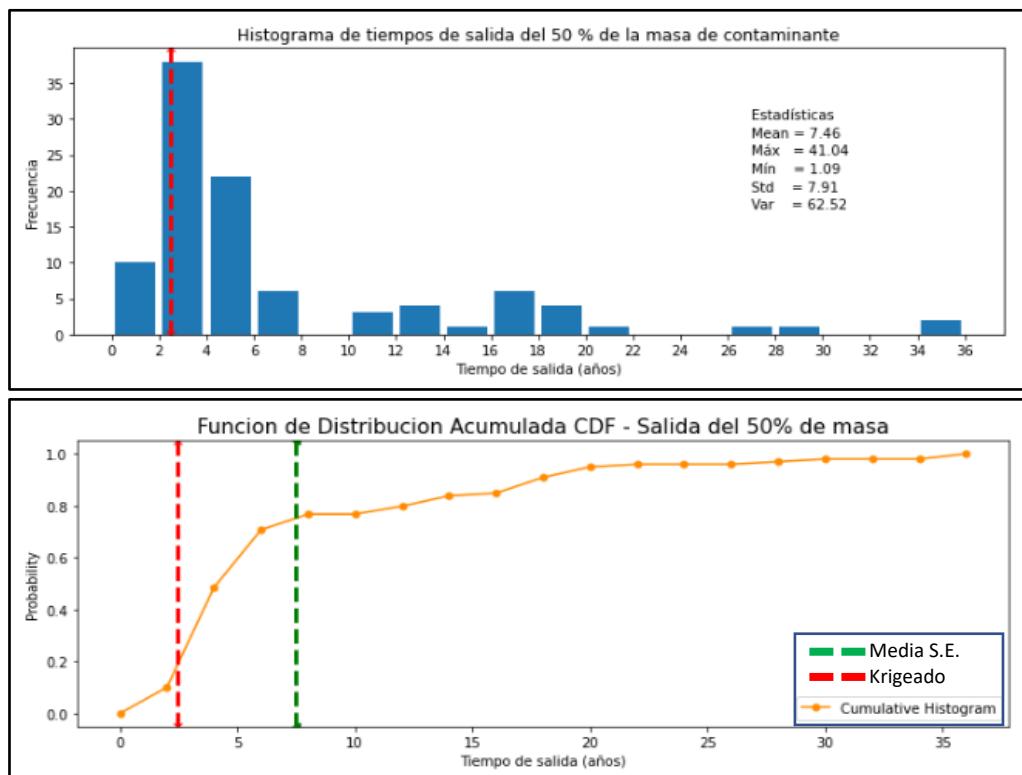


Figura 27: Histograma de tiempos de salida del 50% (arriba), función de distribución acumulada (CDF) de los tiempos de salida (abajo)

do que realizan los métodos de interpolación en comparación con los algoritmos de simulación, hecho que puede acarrear serias complicaciones a la hora de tomar decisiones para la gestión.

Se identificó la simulación 38 como aquella que necesita un tiempo superior a 80 años para la salida del 90 % de la masa de cadmio, para entender la causa debemos remontarnos al mapa de conductividades generado. En la figura 28, la mayor parte del dominio presenta altas conductividades salvo algunas zonas en la parte Este que presentan valores bajos especialmente en la zona de descarga (salida de flujo). La zona de baja conductividad antes de los 900 metros y en la desembocadura son las responsables de la aglomeración de las curvas de altura piezométrica en el mapa de flujo, los elevados niveles no implican un gran flujo de agua, por el contrario, representa la dificultad en la salida, por lo cual el flujo tiende a remansarse hacia atrás, generando de esta manera velocidades relativamente bajas, es así que, el desplazamiento transversal de la masa del contaminante se incrementa como se aprecia en los tiempos de observación de la figura 28.

La frontera de mayor avance se ubica en la parte superior del modelo, correspondiente a las zonas más conductivas, el ingreso de una gran cantidad de masas corresponde a la zona ubicada entre 210 a 250 metros de profundidad, y cuyo desplazamiento se da hacia la parte superior para finalmente descender pasado los 400 metros desde su origen, confirmando la búsqueda de caminos que ofrezcan menor resistencia al desplazamiento del soluto, hecho que se corrobora con la figura 17, que muestra una clara tendencia de ascenso de las partículas por consiguiente este comportamiento se traslada a la masa de contaminante.

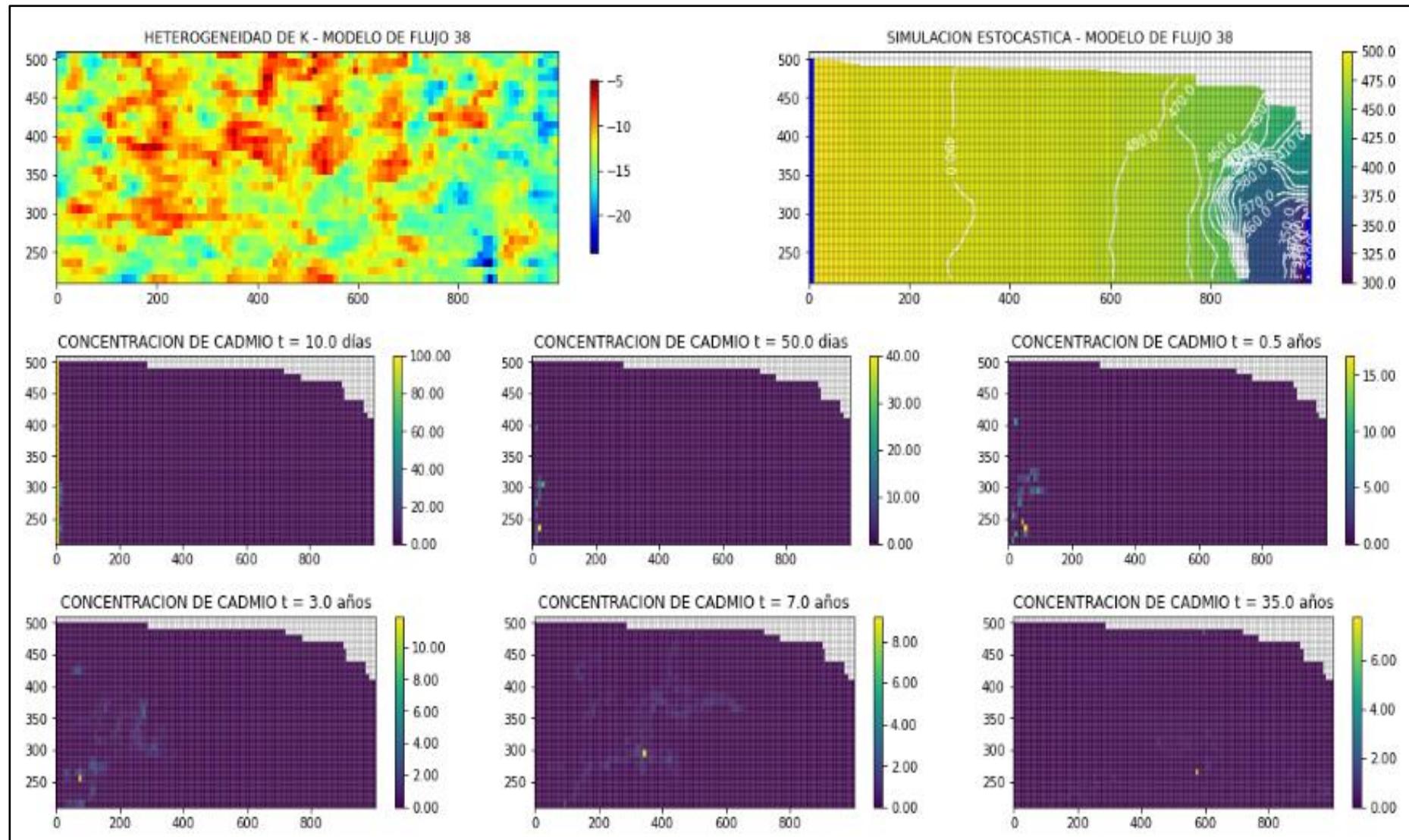


Figura 28:Simulación 38, modelo que requiere el máximo tiempo para salir del sistema

Con el análisis realizado en el presente trabajo, se optó por repetirlo, pero esta vez considerando una inyección forzada del contaminante, los parámetros se mantuvieron del modelo anterior exceptuando que se reemplazó la fuente del vertido por una inyección forzada (pozo) ubicado a 50 metros del borde izquierdo, desde la capa 10 hasta la capa 29, el caudal inyectado no es representativo para generar grandes cambios en el modelo de flujo ($q = 0.1 \text{ l/s}$) concentración se estableció en 32 gramos/litro de cadmio. Cuyos resultados están presentes en el anexo 5.

Se muestran también la figura 30, correspondiente al modelo estimado en la cual se aprecia que hacia el año 35 de la simulación no queda ningún rastro del contaminante en el sistema, una respuesta que contradice los resultados de la figura 15. En la figura 31, se presentan algunos de los campos del modelo estocástico que corresponde a los modelos de mínimo y máximo ingreso, de igual manera se presenta el modelo de máximo tiempo correspondiente a la figura 28.

Los resultados obtenidos no muestran cambios significativos en el modelo de flujo, en cambio el modelo de transporte se aprecian cambios considerables, la figura 19 se corresponde con la figura 25, de los tiempos de salida del 90% de la masa del contaminante del dominio en estudio. Los tiempos predichos han disminuido en el modelo estimado y estocástico, reduciéndose en un 43 % y 46 % respectivamente. El método de estimación aún predice transporte menor que la media de la simulación estocástica, entendiéndose que, el forzar una inyección en el sistema ha generado un rápido desplazamiento del penacho de contaminante respecto a la situación previa.

6. Síntesis: conclusiones y recomendaciones

El empleo de métodos estocásticos en hidrogeología incorpora a las predicciones de los modelos de flujo y transporte de solutos un nivel de incertidumbre del o los parámetros que se desean evaluar, frente a modelos deterministas que generan una única respuesta del sistema para el flujo y consiguientemente el transporte. El entorno geológico posee diversas variables que tienen asociadas gran incertidumbre y, ante la imposibilidad de conocerlas a detalle se opta por trabajar representaciones de dichos parámetros, los resultados aquí obtenidos centran su atención en la heterogeneidad de los parámetros hidráulicos exclusivamente en la conductividad hidráulica.

6.1. Conclusiones

Se han generado 3 modelos de incertidumbre, uno corresponde al modelo de flujo, otro al modelo de incertidumbre de la masa de ingreso al sistema y por último un modelo de incertidumbre de los tiempos de salida de distintas fracciones del contaminante, todos estos comparados con los resultados obtenidos por el método de interpolación producto de un campo suave. Los modelos de incertidumbre construidos responden a la heterogeneidad de la conductividad hidráulica considerada. Llegándose a las siguientes conclusiones:

- Cada predicción realizada en la simulación estocástica lleva asociada un grado de incertidumbre, dado que cualquiera de los campos simulados puede representar la realidad del acuífero, una característica imposible de determinar mediante krigado ordinario. Es así, que se toma la media de la simulación de Monte Carlo como una medida representativa de esta posible realidad.
- El primer modelo de incertidumbre construido (modelos de flujo), indica que aquellas simulaciones con bajas conductividades tienen a ocasionar un efecto de represamiento, es decir incrementan el nivel del agua hacia atrás desde las zonas poco permeables, consecuentemente, estos modelos están caracterizados por velocidad de flujo bajas. El modelo de flujo del campo interpolado se ubica en la parte central del mapa de probabilidad de celdas saturadas del modelo estocástico, siendo este una buena estimación dado que se encuentra muy cerca a la media de las simulaciones de Monte Carlo. A pesar que, ambos resultados coinciden la ventaja de la media estocástica es

que proporciona un nivel de incertidumbre junto a su predicción, algo que resulta imposible en el modelo determinista.

- La masa estimada por krigado es superior a la media de los modelos estocásticos, mostrando que el método de interpolación sobreestima en este caso la cantidad de contaminante que llegó a ingresar al sistema. Se identificaron las simulaciones 94 y 89 como los ingresos máximos y mínimos, estos dos modelos están condicionados por los frentes de conductividad en el límite izquierdo, el primero tiene un frente de media-alta conductividad pequeño, el cual disminuye la facilidad de entrar del cadmio mientras que el segundo tiene una frontera mucho más amplia y extensa en el eje x proporcionando una ruta de fácil acceso.
- El modelo de incertidumbre de los tiempos de llegada muestra que los tiempos estimados por krigado son una decena de años más rápidos que el tiempo medio del modelo estocástico, se ha identificado la simulación 38 como aquella que necesita un tiempo superior a 80 años para desplazar el 90% del contaminante, la razón de esto se encuentra en el mapa de conductividad que indica un dominio altamente conductor, excepto la desembocadura que presenta zonas con valores bajos de conductividad, dificultando el paso de flujo por dicha sección lo que ocasionan disminución de las velocidades dentro de la sección retrasando cualquier avance de contaminante.
- Se ha visto que, la influencia de la simulación estocástica evaluada a través de la media de un determinado número de realizaciones y comparada con el campo promedio (krigado), presenta una gran influencia en la simulación de transporte, por tal, no debemos limitar la modelación a un campo único, sino más bien debemos proporcionar junto a las predicciones de flujo y transporte un intervalo de confianza.
- Una de las desventajas del empleo de modelos estocásticos en hidrogeología es el elevado costo computacional y extensos tiempos de modelamiento que estos emplean.

6.2. Recomendaciones

- Si bien el presente trabajo aborda el problema de la heterogeneidad de la conductividad hidráulica en modelos deterministas y estocásticos, sería muy interesante evaluarlo en un caso real incorporando además del movimiento advectivo, el movimiento dispersivo y las reacciones físico-químicas.
- Otro tema interesante puede ser resolver el problema planteado con otros métodos además de MT3D, como por ejemplo el método inverso.
- Aplicar estos métodos a casos reales donde se disponga además de datos duros, información imprecisa y evaluar cuanto se reduce la incertidumbre calculada.

7. Referencias

- Álvarez-Villa, O., Ospina De los Ríos, S., Pérez, K., Monsalve, G., Blessent, D., & Vélez, J. I. (2017). Efficient parallel computing implementation of a code for solving the groundwater flow equation in heterogeneous and anisotropic media. *ResearchGate*, 9. https://www.researchgate.net/publication/322128989_Efficiente_parallel_computing_implementation_of_a_code_for_solving_the_groundwater_flow_equation_in_heterogeneous_and_anisotropic_media
- Arsys. (2020). *Primeros pasos para usar JupyterLab - Blog de arsys.es*. <https://www.arsys.es/blog/soluciones/primeros-pasos-para-usar-jupyterlab/>
- Bakker, M. (2014). Python Scripting: The Return to Programming. In *Groundwater* (Vol. 52, Issue 6, pp. 821–822). Blackwell Publishing Ltd. <https://doi.org/10.1111/gwat.12269>
- Bakker, M., & Kelson, V. A. (2009). Writing Analytic Element Programs in Python. *Ground Water*, 47(6), 828–834. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2009.00583.x>
- Bakker, M., Post, V., Langevin, C. D., Hughes, J. D., White, J. T., Starn, J. J., & Fienen, M. N. (2016). Scripting MODFLOW Model Development Using Python and FloPy. *Groundwater*, 54(5), 733–739. <https://doi.org/10.1111/gwat.12413>
- Carrera, J. (1993). An overview of uncertainties in modelling groundwater solute transport. *Journal of Contaminant Hydrology*, 13(1–4), 23–48. [https://doi.org/10.1016/0169-7722\(93\)90049-X](https://doi.org/10.1016/0169-7722(93)90049-X)
- Cassiraga, E. F. (1999). *Incorporación de información blanda para la cuantificación de la incertidumbre: Aplicación a la hidrogeología*. [Universitat Politècnica de València]. <https://doi.org/10.4995/Thesis/10251/4503>
- Cassiraga, E. F., & Gómez-Hernández, J. J. (1996). *Métodos geoestadísticos para la integración de información*. <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/378662>
- Chica-Olmo, M. (2005). La geoestadística como herramienta de análisis espacial de datos de inventario forestal. *Sociedad Española de Ciencias Forestales*, 19, 47–55. https://www.mendeley.com/catalogue/b751194e-a7a6-3c61-b71a-b23784d9cb55/?utm_source=desktop&utm_medium=1.19.8&utm_campaign=open_catalog&userDocumentId=%7Ba7e29863-4564-3cc5-959f-3d0a126c4b9a%7D
- Copty, N. K., & Findikakis, A. N. (2000). Quantitative Estimates of the Uncertainty in the Evaluation of Ground Water Remediation Schemes. *Ground Water*, 38(1), 29–37. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2000.tb00199.x>
- Cruces de Abia, J. (2006). Modelo Modflow. *Modelo Modflow, MODULO I*: 69.
- Custodio, E. (2000). Effects of Groundwater development on the environment. *Aguas*

- Subterráneas, 22.
<https://aguassubterraneas.abas.org/asubterraneas/article/view/23446/15533>
- Dou, C., Woldt, W., Dahab, M., & Bogardi, I. (1997). Transient ground-water flow simulation using a fuzzy set approach. *Ground Water*, 35(2), 205–215.
<https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1997.tb00076.x>
- Fernández Martínez, J. L. (2005). *Notas sobre Modelización Geoestadística*. 1–55.
- Fernández Torroba, M. A. (2004). *Estudio y modelización de la contaminación del acuífero del río Najarilla: aplicación de la microextracción en fase sólida para la determinación de los contaminantes* - Dialnet [Universidad de la Rioja].
<https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=105>
- Freeze, R. A. (1975). A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media. *Water Resources Research*, 11(5), 725–741.
<https://doi.org/10.1029/WR011i005p00725>
- Freeze, R. A., & Cherry, J. A. (1979). *Groundwater* (Cathy Brenn/Kim McNeily (ed.)).
<http://hydrogeologistswithoutborders.org/wordpress/textbook-project/>
- Golfier, F., Quintard, M., & Wood, B. D. (2011). Comparison of theory and experiment for solute transport in weakly heterogeneous bimodal porous media. *Advances in Water Resources*, 34(7), 899–914. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.04.019>
- Gómez-Hernández, J. J., & Cassiraga, E. F. (2004). Impact of Flow and Transport Coupling in the Upscaling of Transport Parameters for Performance Assessment in the Context of Nuclear Waste Disposal. In *Elsevier Geo-Engineering Book Series* (Vol. 2, Issue C, pp. 243–249). Elsevier Ltd. [https://doi.org/10.1016/S1571-9960\(04\)80048-X](https://doi.org/10.1016/S1571-9960(04)80048-X)
- Gómez-Hernández, J. J., & Journel, A. G. (1994). Stochastic characterization of gridblock permeabilities. *SPE Formation Evaluation*, 9(2), 93–99. <https://doi.org/10.2118/22187-pa>
- Gómez-Hernández, J. J., & Wen, X. H. (1994). Probabilistic assessment of travel times in groundwater modeling. *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 8(1), 19–55.
<https://doi.org/10.1007/BF01581389>
- Gómez-Hernández, J. J., & Wen, X. H. (1998). To be or not to be multi-Gaussian? A reflection on stochastic hydrogeology. *Advances in Water Resources*, 21(1), 47–61.
[https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(96\)00031-0](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(96)00031-0)
- Gómez Giraldo, A., Álvarez-Villa, O., Monsalve, G., Vélez, J. I., & Blessent, D. (2017). Simulación del transporte de contaminantes en un medio subterráneo heterogéneo mediante el rastreo aleatorio de partículas. *Aqua-LAC*, 9(2), 15–30.
<https://doi.org/10.29104/phi-aqualac/2017-v9-2-02>

- IHOBE, S. A. (2006). *Guía técnica para la aplicación de modelos informáticos para el tránsporte y el flujo de contaminantes en el agua subterránea.* https://www.euskadi.eus/contenidos/documentacion/contaminantes_aguasubterranea/es_doc/adjuntos/contaminantes_agua_subterranea.pdf
- Konikow, L. F. (2003). Uso de Modelos Numéricos para Simular el Flujo y el Transporte Subterráneo. In Instituto Geológico y Minero de España (Ed.), *Isotópos Ambientales en el Ciclo Hidrológico : Principios Y Aplicaciones* (p. 596). http://www-naweb.iaea.org/napc/ih/IHS_resources_publication_hydroCycle_es.html
- Kupfersberger, H., & Deutsch, C. V. (1999). Ranking stochastic realizations for improved aquifer response uncertainty assessment. *Journal of Hydrology*, 223(1–2), 54–65. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(99\)00113-4](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(99)00113-4)
- Li, L., Srinivasan, S., Zhou, H., & Gómez-Hernández, J. J. (2015). Two-point or multiple-point statistics? A comparison between the ensemble Kalman filtering and the ensemble pattern matching inverse methods. *Advances in Water Resources*, 86, 297–310. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2015.05.014>
- Li, L., Zhou, H., & Gómez-Hernández, J. J. (2011). A comparative study of three-dimensional hydraulic conductivity upscaling at the macro-dispersion experiment (MADE) site, Columbus Air Force Base, Mississippi (USA). *Journal of Hydrology*, 404(3–4), 278–293. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.05.001>
- Li, L., Zhou, H., Gómez-Hernández, J. J., & Hendricks Franssen, H. J. (2012). Jointly mapping hydraulic conductivity and porosity by assimilating concentration data via ensemble Kalman filter. *Journal of Hydrology*, 428–429, 152–169. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2012.01.037>
- Lu, C., Zhang, Y., Shu, L., Chen, X., Chen, S., Li, S., Wang, G., & Li, J. (2015). Stochastic analysis of the hydraulic conductivity estimated for a heterogeneous aquifer via numerical modelling. *IAHS-AISH Proceedings and Reports*, 368, 472–477. <https://doi.org/10.5194/piahs-368-472-2015>
- McDonald, M. G., & Harbaugh, A. W. (1984). *A modular three-dimensional finite-difference ground water flow model United.*
- Méndez-Venegas, J., Díaz-Viera, M. A., Herrera, G. S., & Valdés-Manzanilla, A. (2013). Geostatistical simulation of spatial variability of convective storms in Mexico City Valley. *Geofísica Internacional*, 52(2), 111–120. [https://doi.org/10.1016/S0016-7169\(13\)71466-1](https://doi.org/10.1016/S0016-7169(13)71466-1)
- Monachesi, L. B. (2013). *Modelado y análisis del flujo de agua en medios porosos*

- heterogéneos total o parcialmente saturados [Universidad Nacional de La Plata]. <https://doi.org/10.35537/10915/29818>
- Muñoz Núñez, L. J. (2001). *Application of Groundwater Flow and Contaminant Transport Mathematical Models To the Design of Remediation Systems.* 361–370. http://aguas.igme.es/DOCUMENTOS/ARTICULOS_EN_CONGRESOS/05-CON_RECU_ACUIFEROS/034.PDF
- Neuman, S. P. (1984). Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20(2), 321–337. <https://doi.org/10.1002/nme.1620200211>
- Pérez, F., Granger, B. E., & Hunter, J. D. (2011). Python: An ecosystem for scientific computing. *Computing in Science and Engineering*, 13(2), 13–21. <https://doi.org/10.1109/MCSE.2010.119>
- Remy, N. (2004). *Geostatistical Earth Modeling Software: User's Manual.*
- Riquelme Sandoval, Á. I. (2016). *Influencia de la densidad de muestras en la reconstrucción de cuerpos geológicos.* Universidad de Chile.
- Sahuquillo, A. (2002). *Desarrollos científicos y nuevas tendencias en hidrogeología.* 2000, 1–11.
- Sahuquillo, A., Custodio, E., & Ramón Llamas, M. (2008). *La gestión de las aguas subterráneas.*
- Sánchez-Vila, X., & Carrera, J. (2003). Sobre la no identificabilidad de los momentos estadísticos del tiempo de llegada de un soluto en un medio heterogéneo - Dialnet. *Boletín Geológico y Minero*, 114, 287–298. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=765403>
- Sánchez Barrero, L. (2009). *Modelación de efectos anómalos del transporte de masa en tanque de laboratorio: Análisis comparativo de la aplicación de distintas metodologías.* Universitat Politècnica de Valencia.
- Sreekanth, J., Moore, C., & Wolf, L. (2016). Pareto-based efficient stochastic simulation-optimization for robust and reliable groundwater management. *Journal of Hydrology*, 533, 180–190. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.12.001>
- Wen, X. H., Capilla, J. E., Deutsch, C. V., Gómez-Hernández, J. J., & Cullick, A. S. (1999). A program to create permeability fields that honor single-phase flow rate and pressure data. *Computers and Geosciences*, 25(3), 217–230. [https://doi.org/10.1016/S0098-3004\(98\)00126-5](https://doi.org/10.1016/S0098-3004(98)00126-5)
- Wen, Xian Huan, & Gómez-Hernández, J. J. (1996). Upscaling hydraulic conductivities in

- heterogeneous media: An overview. In *Journal of Hydrology* (Vol. 183, Issues 1–2, p. 24). Elsevier. [https://doi.org/10.1016/s0022-1694\(96\)80030-8](https://doi.org/10.1016/s0022-1694(96)80030-8)
- Winston, R. B. (2009). *ModelMuse-A Graphical User Interface for MODFLOW-2005 and PHAST*. <http://pubs.usgs.gov/tm/tm6A29>.
- Zheng, C. (1990). *M T 3 D A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reaction of Contaminants in Groundwater Systems*.
- Zheng, C. (1992). *MT3D: A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems*. <https://www.researchgate.net/publication/283742180>
- Zhou, H., Li, L., & Jaime Gómez-Hernández, J. (2010). Three-dimensional hydraulic conductivity upscaling in groundwater modeling. *Computers and Geosciences*, 36(10), 1224–1235. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2010.03.008>

Anejos

Anejo 1: Script de modelo de flujo - estocástico

a. IMPORTAR BIBLIOTECAS

```
import flopy, os, shutil
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import flopy.utils.binaryfile as bf
from ipywidgets import interact
```

b. MODELO DE FLUJO

- i. Asignación de nombre de modelo

```
model_ws = 'R_SIM'
modelname = 'Modelo_Flujo'
exe_name = 'Exe/mf2005.exe'
mf = flopy.modflow.Modflow(modelname, exe_name=exe_name,
                           model_ws=model_ws)
```

- ii. Discretización espacial y temporal

```
nlay, nrow, ncol = 30, 1, 100
delr=delc= 10.
laycbd=np.zeros((nlay), dtype=np.int32)
laycbd[-1]=1
top = 510.
botm = np.ones((nlay), dtype=np.int32)
for i in range (nlay):
    botm[i]= 500 -(i*10)
nper = 3
nstp = [1]+[1]*2
perlen = [1] + [864000]*1 + [314715599]*1
steady = [True] + [False]*2
dis=flopy.modflow.ModflowDis(mf, nlay=nlay, nrow=nrow, ncol=ncol,
                             delr=delr, laycbd=laycbd, delc=delc,
                             top=top, botm=botm, nper=nper,
                             perlen=perlen, steady=steady, itmuni=1,
                             lenuni=2)
```

- iii. Definición de celdas activas y constantes/ BAS

```
ibound = np.ones((nlay, nrow, ncol), dtype=np.int32)
ibound[1,:,:0] = -1
ibound[21,:,:-1] = -1
bas = flopy.modflow.ModflowBas(mf, ibound=ibound, strt=top)
```

- iv. Nivel constante - CHD

```
chdspd={}
chdspd[0]=[[], 0, 0, 500., 500.] for i in range(1,30):
for i in range (21,30):
    chdspd[0].append(([i, 0, 99, 300.,300.]))
chdspd[1]=[[], 0, 0, 500., 500.] for i in range(1,30):
for i in range (21,30):
    chdspd[1].append(([i, 0, 99, 300.,300.]))
chdspd[2]=[[], 0, 0, 500., 500.] for i in range(1,30):
for i in range (21,30):
    chdspd[2].append(([i, 0, 99, 300.,300.]))
chd = flopy.modflow.ModflowChd(mf, stress_period_data=chdspd)
```

- v. Conductividad hidráulica

```
kx=pd.read_excel('SIMULACION.xlsx', sheet_name=None, header=None)
```

- vi. Paquete solucionador mf2005

```
pcg =flopy.modflow.ModflowPcg(mf, mxiter=85, iter1=57, npcond=1,
                                 nbpoly=1, hclose=1e-05, rclose=1e-05,
                                 relax=1, iprprcg=0, mutpcg=0,
                                 ihcofadd=0)
n_estocasticas = [ '00', '01', '02', '03', '04', '05', '06', '07',
                   '08', '09', '10', '11', '12', '13', '14', '15', '16',
                   '17', '18', '19', '20', '21', '22', '23', '24', '25',
                   '26', '27', '28', '29', '30', '31', '32', '33', '34',
```

```
'35', '36', '37', '38', '39', '40', '41', '42', '43',
'44', '45', '46', '47', '48', '49', '50', '51', '52',
'53', '54', '55', '56', '57', '58', '59', '60', '61',
'62', '63', '64', '65', '66', '67', '68', '69', '70',
'71', '72', '73', '74', '75', '76', '77', '78', '79',
'80', '81', '82', '83', '84', '85', '86', '87', '88',
'89', '90', '91', '92', '93', '94', '95', '96', '97',
'98', '99']
```

vii. Generación de bucle para 100 simulaciones de flujo

```
For i in n_estocasticas:
    hk=kx[i].to_numpy()
    lpf=flopy.modflow.ModflowLpf(mf, laytyp=1, ipakcb=53, hk=hk,
                                    vka=hk, hdry=-2e+20, chani=-1.0, ss=1e-05, sy=0.15)
    #Output control - Paquete OC
    spd_oc = {}
    for kper in range(nper):
        for kstp in range(nstp[kper]):
            spd_oc[(kper, kstp)] = ['save head', 'save budget']
    oc= flopy.modflow.ModflowOc(mf,stress_period_data=spd_oc,
                                 compact=True)
    #LMT linkage with MT3DMS for multi-species mass transport modeling
    lmt = flopy.modflow.ModflowLmt(mf, output_file_name =
                                    'mt3d_{}.ftl'.format(i))
    #Escribir los archivos de salida mf2005
    mf.write_input()
    #Correr modelo de flujo
    mf.run_model(silent=True)
    #Copiar y guardar archivos de simulaciones
    shutil.copy(model_ws + '/' + 'Modelo_flujo.hds', model_ws + '/' +
                "Modelo_Flujo_{}.hds".format(i))
    shutil.copy(model_ws + '/' + 'Modelo_flujo.cbc', model_ws + '/' +
                "Modelo_Flujo_{}.cbc".format(i))
    shutil.copy(model_ws + '/' + 'Modelo_flujo.list',
                model_ws+'/'+'list'+'/'+
                "Modelo_Flujo_{}.list".format(i))
```

Anejo 2: Script de modelo de transporte – estocástico

```
For i in n_estocasticas:
    ftlfilename='mt3d'+'/'+'mt3d_{}.ftl'.format(j)
    namemt3d='transModel'
    mt_model = flopy.mt3d.Mt3dms(modelname=namemt3d, model_ws=model_ws,
                                   ftlfilename=ftlfilename, version='mt3d-usgs',
                                   exe_name = '../1_SOLVER/mt3d-usgs_1.1.0_64.exe',
                                   modflowmodel=mf)
    #BTN file
    Timprs = [3600, 10800, 86400.0, 2488724., 7466173., 14932347., 29864694.,
              89593688., 149322496., 238919296., 315576000.]
    Nprs = len(timprs)
    nper = 3
    perlen = [1] + [864000]*1 + [315580000]*1
    btn = flopy.mt3d.Mt3dBtn(mt_model, ncomp=1, nper=nper, mcomp=1, unit='sec',
                             lunit='m', munit='g', prsity=0.2, sconc=0.0,
                             cinact=-1e+30, thkmin=0.01, ifmtcn=12, ifmtnp=5,
                             ifmtrf=12, ifmtdp=12, perlen=perlen, savucn=True,
                             nprs=Nprs, timprs=timprs, dt0=0, mxstrn=50000,
                             ttsmult=1., ttsmax=0, icbund=1)
    #Paquete de Advection - ADV
    adv = flopy.mt3d.Mt3dAdv(mt_model, mixelm=3, percel=1, mxpart=75000, np1=0,
                             advfd=1, itrack=2, wd=0.5, dceps=1e-05, nplane=0,
                             nph=10, npmin=2, npmax=20, npsink=10,
                             dchmoc=0.01)
```

```
#Solucionador - GCG
gcg = flopy.mt3d.Mt3dGcg(mt_model, mxiter=1, iter1=200, isolve=3, ncrs=0,
                           cclose=1e-06, iprgcg=1)
#Paquete de Dispersion - DSP
dsp = flopy.mt3d.Mt3dDsp(mt_model, al=0.1, multiDiff=True, dmcoef=0,
                           trpt=0.1, trpv=0.01)
itype = flopy.mt3d.Mt3dSsm.itype_dict()
#Concentracion del contaminante - SSM
ssm_data = {}
ssm_data[1] = [(k, 0, 0, 100, 1) for k in range (1,30)]
for k in range (1,30):
    ssm_data[1].append((k, 0, 0, 100, -1))
ssm_data[2] = [(k, 0, 0, 0, 1) for k in range (1,30)]
for k in range (1,30):
    ssm_data[2].append((k, 0, 0, 0, -1))
ssm = flopy.mt3d.Mt3dSsm(mt_model, stress_period_data=ssm_data)
#Escribir archivos de Salida del modelo de transporte - MT3D
mt_model.write_input()
#Correr de modelo de Transporte - MT3D
mt_model.run_model(silent=True)
#Copiar y Guardar archivos de simulaciones
shutil.copy(model_ws + '/' + 'MT3D001.UCN', model_ws + ' /' + 'ucn' + ' /' +
            "MT3D001_{}.UCN".format(j))
shutil.copy(model_ws + '/' + 'MT3D001.MAS', model_ws + ' /' + 't_mas' + ' /' +
            "MT3D001_{}.MAS".format(j))
shutil.copy(model_ws + '/' + 'transModel.list', model_ws + ' /' + 't_list' +
            ' /' + "Trans_{}.list".format(j))
```

Anejo 3: Script posprocesamiento de resultados: generación de gráficos

```
a. IMPORT BIBILIOTECAS
import os
import pandas as pd
import flopy
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import flopy.utils.binaryfile as bf
from ipywidgets import interact

b. MODELO DE FLUJO
i. Cargar resultados de modelo de flujo
model_ws='..../4_OUT/R_SIM'
modelname='Modelo_Flujo'
exe_name= '..../1_SOLVER/mf2005.exe'
mf = flopy.modflow.Modflow.load(modelname+'.nam', exe_name=exe_name,
                                 model_ws=model_ws)
kx=pd.read_excel('..../3_IN/SIMULACION_K.xlsx', sheet_name=None,
                  header=None)
#número de simulaciones estocásticas
n_estocasticas = [ '00', '01', '02', '03', '04', '05', '06', '07',
                    '08', '09', '10', '11', '12', '13', '14', '15', '16',
                    '17', '18', '19', '20', '21', '22', '23', '24', '25',
                    '26', '27', '28', '29', '30', '31', '32', '33', '34',
                    '35', '36', '37', '38', '39', '40', '41', '42', '43',
                    '44', '45', '46', '47', '48', '49', '50', '51', '52',
                    '53', '54', '55', '56', '57', '58', '59', '60', '61',
                    '62', '63', '64', '65', '66', '67', '68', '69', '70',
                    '71', '72', '73', '74', '75', '76', '77', '78', '79',
                    '80', '81', '82', '83', '84', '85', '86', '87', '88',
                    '89', '90', '91', '92', '93', '94', '95', '96', '97',
                    '98', '99']
```

ii. Cargas de alturas piezométrica

```
altura = []
for i in n_estocasticas:
```

```

alt=[ ]
headobj = bf.HeadFile(model_ws + '/' + 'hds' + '/' +
                      'Modelo_Flujo_{}.hds'.format(i))
times = headobj.get_times()
cbb = bf.CellBudgetFile(model_ws + '/' + 'cbc' + '/' +
                        'Modelo_Flujo_{}.cbc'.format(i))
for iplot, time in enumerate(times):
    head = headobj.get_data(totim=time)
    #head_1=head.reshape(head.shape[0],-2)
    #Extract flow right face and flow front face
    frf = cbb.get_data(text='FLOW RIGHT FACE', totim=time)[0]
    flf = cbb.get_data(text='FLOW LOWER FACE', totim=time)[0]
    #CAMBIAR A MATRIZ DE 0 Y 1 LAS MATRICES DE ALTURA
    head[head < 0] = 0
    head[head > 0] = 1
    head
    altura.append(head)

#Convertir altura en array y redefinirlo a una matriz dada
alt_pt=np.array(altura_promedio)
alt_ptotal=alt_pt.reshape(30,1,100)
#alt_ptotal

iii. Generar gráficos de alturas piezométricas de la simulación
estocástica
for i in n_estocasticas:

    headobj = bf.HeadFile(model_ws + '/' + 'hds' + '/' +
                          'Modelo_Flujo_{}.hds'.format(i))
    times = headobj.get_times()
    cbb = bf.CellBudgetFile(model_ws + '/' + 'cbc' + '/' +
                            'Modelo_Flujo_{}.cbc'.format(i))
    for iplot, time in enumerate(times):
        #print('*****Processing time: ', time)
        head = headobj.get_data(totim=time)
        # First step is to set up the plot
        fig = plt.figure(figsize=(20,4))
        ax = fig.add_subplot(1, 1, 1)
        levels = np.arange(300, 501, 20)

        # Next we create an instance of the ModelMap class
        modelxsect = flopy.plot.PlotCrossSection(model=mf, line={'Row':0})
        contour_set = modelxsect.contour_array(head, masked_values=[999.,-
                                                                    2.00000E+20], levels=levels,
                                                colors='w')
        plt.clabel(contour_set, fmt='%3.1f', colors='w', fontsize=13)

        hv = modelxsect.plot_array(head, head=head, masked_values=[999.00,
                                                                    -2.00000E+20])
        patches = modelxsect.plot_ibound(head=head)
        linecollection = modelxsect.plot_grid()
        t = ax.set_title('CROSS SECTION SIMULACION ESTOCASTICA MODELO
                          FLUJO {}'.format(i), fontsize=20)
        fig.colorbar(hv, orientation='vertical', format='%2.1f')
        #plt.savefig(model_ws+'/'+'imagenes'+'/'+M_Flujo.png')
        plt.show()
        #shutil.copy(model_ws+'/'+'head'+'/'+ALTURA.txt',
                    model_ws+'/'+'head'+'/'+head_{}.txt'.format(i))
        #shutil.copy(model_ws+'/'+'imagenes'+'/'+M_Flujo.png',
                    model_ws+'/'+'imagenes'+'/'+M_Flujo_{}.PNG'.format(i))

iv. Gráfica de promedio de Alturas piezométricas
#cargar modelo del campo estimado
headobjk = bf.HeadFile('../4_OUT/R_SIM_KRIG' + '/' + modelname + '.hds')
timesk = headobjk.get_times()
cbb = bf.CellBudgetFile('../4_OUT/R_SIM_KRIG' + '/' + modelname + '.cbc')

```

```

for iplot, time in enumerate(timesk):
    #print('*****Processing time: ', time)
    headjk = headobjjk.get_data(totim=time)

#graficar mapa de probabilidades que celdas se encuentren saturadas
fig = plt.figure(figsize=(20,4))
ax = fig.add_subplot(1, 1, 1)

modelxsect = flopy.plot.PlotCrossSection(model=mf, line={'Row': 0})
hv = modelxsect.plot_array(alt_ptotal, masked_values=[0])
hv = modelxsect.plot_array(alt_ptotal, head=alt_ptotal,
                            masked_values=[-2.00E+20]) #graficar escala
patches = modelxsect.plot_ibound()
linecollection = modelxsect.plot_grid()
t = ax.set_title('MAPA DE PROBABILIDAD QUE LAS CELDAS SE ENCUENTREN
                  SAUTRADAS DE SIMULACION ESTOCASTICA', fontsize=20)
fig.colorbar(hv, orientation='vertical', format='%2.1f')
cts = modelxsect.plot_surface(headjk[21], masked_values=[-2.0000E+20],
                               color='red', linewidth=2)#incorporar altura piezométrica krigado
#plt.savefig(model_ws+'/'+M_Flujo.PNG')
plt.show()

```

- c. MODELO DE TRANSPORTE
- Cargar resultados del modelo de transporte
 namemt3d='transModel'


```

mt_model = flopy.mt3d.Mt3dms.load(namemt3d+'.nam', model_ws =
                                    model_ws, version='mt3d-usgs', exe_name =
                                    '../1_SOLVER/mt3d-usgs_1.1.0_64.exe', modflowmodel=mf)
#tiempos de observación a graficar
tim=[10.0, 50.0, 0.5, 3.0, 7.0, 35.0]

```
 - Generar gráficos de conductividad hidráulica, altura piezométrica y concentraciones a distintos tiempos


```

for j in n_estocasticas:
    headobj = bf.HeadFile(model_ws + '/' + 'hds' + '/' +
                          'Modelo_Flujo_{}.hds'.format(j))
    times = headobj.get_times()
    cbb = bf.CellBudgetFile(model_ws + '/' + 'cbc' + '/' +
                           'Modelo_Flujo_{}.cbc'.format(j))
    for iplot, time in enumerate(times):
        #print('*****Processing time: ', time)
        head = headobj.get_data(totim=time)
        fname = os.path.join(model_ws + '/' + 'ucn' + '/' +
                             'MT3D001_{}.UCN'.format(j))
        ucnobj = flopy.utils.UcnFile(fname)
        times = ucnobj.get_times()
        conc = ucnobj.get_alldata()
        fname = os.path.join(model_ws + '/' + 't_mas' + '/' +
                             'MT3D001_{}.MAS'.format(j))
        mvt = mt_model.load_mas(fname)
        Conc_1=conc.reshape(head.shape[0],-1)

        #shutil.copy(model_ws+'/'+t_Concentraciones+'/'+'conc.txt',
        #            model_ws+'/'+t_Concentraciones+'/'+"conc_{}.txt".format(j))

        hk=kx[j].to_numpy()
        lpf=flopy.modflow.ModflowLpf(mf, laytyp=1, ipakcb=53, hk=hk,
                                      vka=hk, hdry=-2e+20, chani=-1.0, ss=1e-05,
                                      sy=0.15)
        a = mf.lpf.hk.array
        fig = plt.figure(figsize=(20,3))

        #Graficar la conductividad hidráulica
        ax = fig.add_subplot(1,2,1)
        xsect = flopy.plot.PlotCrossSection(model=mf, line={'Row': 0})

```

```

csa = xsect.plot_array(np.log(a), cmap='jet')
cb = plt.colorbar(csa, shrink=0.75)
t = ax.set_title('HETEROGENEIDAD DE K - MODELO DE FLUJO
    {}'.format(j), fontsize=11)

ax = fig.add_subplot(1, 2, 2)
levels = np.arange(300, 501, 10)
# Next we create an instance of the ModelMap class
modelxsect = flopy.plot.PlotCrossSection(model=mf, line={'Row':0})
contour_set = modelxsect.contour_array(head, colors='w',
    masked_values=[999., -2.00000E+20], levels=levels)
plt.clabel(contour_set, fmt='%5.1f', colors='w', fontsize=10)

#Graficar la modelo de flujo
hv = modelxsect.plot_array(head, head=head,
    masked_values=[999.00, -2.00000E+20])
patches = modelxsect.plot_ibound(head=head)
linecollection = modelxsect.plot_grid(color='.1', alpha=0.1)
t = ax.set_title('SIMULACION ESTOCASTICA - MODELO DE FLUJO
    {}'.format(j), fontsize=11)
fig.colorbar(hv, orientation='vertical', format='%1.1f')

#Graficar de algunos tiempos de concentración
fig = plt.figure(figsize=(20,2.5))

ax = fig.add_subplot(1, 3, 1)
mx = flopy.plot.PlotCrossSection(ax=ax, model=mf, line={'row':0})
mx.plot_ibound()
mx.plot_grid(color='.5', alpha=0.2)
c_s = mx.plot_array(conc[2], masked_values=[-1.00000E+30])
plt.title('CONCENTRACION DE CADMIO t = {} días'.format(tim[0]))
fig.colorbar(c_s, orientation='vertical', format='%1.2f')

ax = fig.add_subplot(1, 3, 2)
mx = flopy.plot.PlotCrossSection(ax=ax, model=mf, line={'row':0})
mx.plot_ibound()
mx.plot_grid(color='.5', alpha=0.2)
c_s = mx.plot_array(conc[4], masked_values=[-1.00000E+30])
plt.title('CONCENTRACION DE CADMIO t = {} días'.format(tim[1]))
fig.colorbar(c_s, orientation='vertical', format='%1.2f')

ax = fig.add_subplot(1, 3, 3)
mx = flopy.plot.PlotCrossSection(ax=ax, model=mf, line={'row':0})
mx.plot_ibound()
mx.plot_grid(color='.5', alpha=0.2)
c_s = mx.plot_array(conc[6], masked_values=[-1.00000E+30])
plt.title('CONCENTRACION DE CADMIO t = {} años'.format(tim[2]))
fig.colorbar(c_s, orientation='vertical', format='%1.2f')

fig = plt.figure(figsize=(20,2.5))

ax = fig.add_subplot(1, 3, 1)
mx = flopy.plot.PlotCrossSection(ax=ax, model=mf, line={'row':0})
mx.plot_ibound()
mx.plot_grid(color='.5', alpha=0.2)
c_s = mx.plot_array(conc[8], masked_values=[-1.00000E+30])
plt.title('CONCENTRACION DE CADMIO t = {} años'.format(tim[3]))
fig.colorbar(c_s, orientation='vertical', format='%1.2f')

ax = fig.add_subplot(1, 3, 2)
mx = flopy.plot.PlotCrossSection(ax=ax, model=mf, line={'row':0})
mx.plot_ibound()
mx.plot_grid(color='.5', alpha=0.2)
c_s = mx.plot_array(conc[10], masked_values=[-1.00000E+30])
plt.title('CONCENTRACION DE CADMIO t = {} años'.format(tim[4]))
fig.colorbar(c_s, orientation='vertical', format='%1.2f')

```

```

ax = fig.add_subplot(1, 3, 3)
mx = flopy.plot.PlotCrossSection(ax=ax, model=mf, line={'row':0})
mx.plot_ibound()
mx.plot_grid(color='0.5', alpha=0.2)
c_s = mx.plot_array(conc[12], masked_values=[-1.00000E+30])
plt.title('CONCENTRACION DE CADMIO t = {} años'.format(tim[5]))
fig.colorbar(c_s, orientation='vertical', format='%1.2f')

#plt.savefig(model_ws+'/'+'imagenes'+'/'+M_TRANSPORTE.png')
plt.show()

```

Anejo 4: Script posprocesamiento de resultados: generación de estadísticos

- a. IMPORTAR BIBLIOTECAS

```

import os,flopy, sys, platform
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib as mpl
import matplotlib.pyplot as plt
import flopy.utils.binaryfile as bf
from seaborn import load_dataset
from pandas import ExcelWriter
from pandas import ExcelFile
from openpyxl import load_workbook
from pynverse import inversefunc
from scipy.interpolate import InterpolatedUnivariateSpline

```
- b. MODELO DE TRANSPORTE
 - i. Cargar resultados del modelo de transporte

```

namemt3d='transModel'
mt_model = flopy.mt3d.Mt3dms.load(namemt3d+'.nam', model_ws=model_ws,
version='mt3d-usgs', exe_name='../l_SOLVER/mt3d-usgs_1.1.0_64.exe',
modflowmodel=mf)

```
 - ii. Número de simulaciones estocásticas

```

n_estocasticas=['00','01','02','03','04','05','06','07','08','09','10',
                 '11','12','13','14','15',
                 '16','17','18','19','20','21','22','23','24','25','26',
                 '27','28','29',
                 '30','31','32','33','34','35','36','37','38','39','40',
                 '41','42','43','44','45','46','47','48','49','50','51',
                 '52','53','54','55','56','57','58','59','60','61','62',
                 '63','64','65','66','67','68','69','70','71','72','73',
                 '74','75',
                 '76','77','78','79','80','81','82','83','84','85','86',
                 '87','88','89','90','91','92','93','94',
                 '95','96','97','98','99']

```
 - iii. Cálculo de la masa total que ingreso al sistema

```

t_total=[]# ingreso de masa total por cada tiempo de observación
masa_Total=[]#masa que ha pasado por el punto de observación a x
for j in n_estocasticas:
    #cargar resultados modelo de flujo
    headobj = bf.HeadFile(model_ws +
                           '/'+hds+'/'+Modelo_Flujo_{}.hds'.format(j))
    times = headobj.get_times()
    cbb = bf.CellBudgetFile(model_ws +
                           '/'+cbc+'/'+Modelo_Flujo_{}.cbc'.format(j))
    for iplot, time in enumerate(times):
        head = headobj.get_data(totim=time)
    #cargar resultados del modelo de transporte
    fname = os.path.join(model_ws
                         + '/'+ucn+'/'+MT3D001_{}.UCN'.format(j))
    ucnobj = flopy.utils.UcnFile(fname)
    times = ucnobj.get_times()
    conc = ucnobj.get_alldata()

```

```

fname = os.path.join(model_ws + '/' + 't_mas' + '/' +
                     'MT3D001_{}.MAS'.format(j))
mvt = mt_model.load_mas(fname)
#suma de concentraciones en cada tiempo de observación
suma=[]
for h in range(0,15):
    for k in range (0,30):
        C=(conc[h,k,0,:])
        a=[]
        for i in C:
            if i >= 0:
                a.append(i)
        b=np.sum(a)
        suma.append(b)
t_1=np.sum(suma[0:30])
t_2=np.sum(suma[30:60])-100*29
t_3=np.sum(suma[60:90])-100*29
t_4=np.sum(suma[90:120])
t_5=np.sum(suma[120:150])
t_6=np.sum(suma[150:180])
t_7=np.sum(suma[180:210])
t_8=np.sum(suma[210:240])
t_9=np.sum(suma[240:270])
t_10=np.sum(suma[270:300])
t_11=np.sum(suma[300:330])
t_12=np.sum(suma[330:360])
t_13=np.sum(suma[360:390])
t_14=np.sum(suma[390:420])
t_15=np.sum(suma[420:450])

t=[t_1,t_2,t_3,t_4,t_5,t_6,t_7,t_8,t_9,t_10,t_11,t_12,t_13,t_14,t_
15]
t_total.append(t)
#suma de concentraciones hacia la izquierda del punto de
#observación (antes de pasar x el punto de observación)
suma_DIST=[]
for z in [10,20,30,40,50,60,70,80,90]:
    for h in range(0,15):
        a_0=[]
        for k in range (0,30):
            C=(conc[h,k,0,1:z])
            a=[]
            for i in C:
                if i > -1e+30:
                    a.append(i)
            b=np.sum(a)
            a_0.append(b)
        b_1=np.sum(a_0)
        suma_DIST.append(b_1)

s_100=suma_DIST[0:15]
s_200=suma_DIST[15:30]
s_300=suma_DIST[30:45]
s_400=suma_DIST[45:60]
s_500=suma_DIST[60:75]
s_600=suma_DIST[75:90]
s_700=suma_DIST[90:105]
s_800=suma_DIST[105:120]
s_900=suma_DIST[120:135]
#Cálculo de masa que pasa por el punto de control (resta de la
#concentración máxima - la concentración que aún no ha
#pasado)
paso=[]
for y in [s_100,s_200,s_300,s_400,s_500,s_600,s_700,s_800,s_900]:
    for i in y:
        a=t_4-i

```

```

        if a > 0:
            paso.append(a)
        else:
            a=0
            paso.append(a) #valores mayores al máxima
            concentración ingresada al sistema se igualan a cero
p_100=paso[0:15]
p_200=paso[15:30]
p_300=paso[30:45]
p_400=paso[45:60]
p_500=paso[60:75]
p_600=paso[75:90]
p_700=paso[90:105]
p_800=paso[105:120]
p_900=paso[120:135]
#reemplazar valores a 0 antes de la carga másica máxima
for y in [p_100,p_200,p_300,p_400,p_500,p_600,p_700,p_800,p_900]:
    for i in range (0,4):
        y[i]=0 # valores antes del tiempo t[3] se igualan a 0
#crear lista de paso de masa por el sistema a c/distancia de
    observación
a_0 = [p_100,p_200,p_300,p_400,p_500,p_600,p_700,p_800,p_900]

masa_Total.append(a_0)
iv. Determinar estadísticas de las curvas de la simulacion estocastica
#Cálculo de curvas de referencia
p_05=[]#percentile 5
p_95=[]#percentile 95
mediana=[]
mean=[]
for j in range (0,9):
    b_1=[]
    b_2=[]
    b_m=[]
    b_mean=[]
    for k in range (0,15):
        b_3=[]
        for h in range (0,100):
            a=masa_Total[h][j][k]
            b_3.append(a)
        b_4=np.percentile(b_3,5)
        b_1.append(b_4)
        b_5=np.percentile(b_3,95)
        b_2.append(b_5)
        b_6=np.median(b_3)
        b_m.append(b_6)
        b_7=np.mean(b_3)
        b_mean.append(b_7)
    p_05.append(b_1)
    p_95.append(b_2)
    mediana.append(b_m)
    mean.append(b_mean)
v. Cargar resultados de Kriging
with open('../4_OUT/R_SIM_KRIG/Curvas_Kriging.txt','r') as f:
    lineas=[linea.split() for linea in f]
#pasar a lista
k_r=[]
for j in range(0,9):
    for i in range(0,15):
        a= float(lineas[j][i])
        k_r.append(a)
k_100=k_r[0:15]
k_200=k_r[15:30]
k_300=k_r[30:45]
k_400=k_r[45:60]
k_500=k_r[60:75]

```

```

k_600=k_r[75:90]
k_700=k_r[90:105]
k_800=k_r[105:120]
k_900=k_r[120:135]
kr=[k_100,k_200,k_300,k_400,k_500,k_600,k_700,k_800,k_900]
vi. Transformar tiempo a años
times_y=[]
for i in range(0,15):
    b = times[i]/(86400*365)
    times_y.append(b)
vii.     masa de cadmio que pasa por cada plano de control
fig = plt.figure(figsize=(16,4))
b1=0
b2=9
for j in range (0,2):
    ax = fig.add_subplot(1, 2, j+1)
    for i in range(0,100):
        a=masa_Total[i][j]
        plt.plot(times_y[b1:b2],a[b1:b2], markersize="2",
                 markeredgewidth="2", color="gray", alpha=0.5)

    plt.plot(times_y[b1:b2],p_05[j][b1:b2], label='P_05',linestyle='--',
              markersize= "2", markeredgewidth="2",color="blue",
              alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],kr[j][b1:b2],
              label='Kriging',linestyle='-.',markersize="2",
              markeredgewidth="2",color="red", alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],p_95[j][b1:b2], label='P_95',linestyle='--',
              markersize= "2", markeredgewidth="2",color="blue",
              alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],mediana[j][b1:b2], label='Mediana',
              markersize="2", markeredgewidth="2",color="green", alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],mean[j][b1:b2], label='Media',
              markersize="2", markeredgewidth="2",color="brown", alpha=1)
    plt.fill_between(times_y[b1:b2], p_05[j][b1:b2], p_95[j][b1:b2],
                     color='yellow', alpha=0.2)
    plt.title('MASA DE CADMIO QUE PASA POR EL PLANO DE CONTROL A \nx
                = {} m'.format((j+1)*100))
    plt.xlabel('Tiempo t(años)')
    plt.ylabel('Masa Cd (g)')
    plt.legend(loc=1, fontsize=7.5)
    plt.grid()
#v=[times_y[b1],times_y[b2-1],a[b1],5000]
#plt.axis(v)

fig = plt.figure(figsize=(16,4))
b1=0
b2=9
for j in range (0,2):
    ax = fig.add_subplot(1, 2, j+1)
    for i in range(0,100):
        a=masa_Total[i][j+2]
        plt.plot(times_y[b1:b2],a[b1:b2], markersize="2",
                 markeredgewidth="2",color="gray", alpha=0.5)
#Graficar lineas de referencia
n=2
plt.plot(times_y[b1:b2],p_05[j+n][b1:b2],
          label='P_05',linestyle='--', markersize="2",
          markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],kr[j+n][b1:b2],
          label='Kriging',linestyle='-.', markersize="2",
          markeredgewidth="2",color="red", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],p_95[j+n][b1:b2],
          label='P_95',linestyle='--', markersize="2",
          markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)

```

```

plt.plot(times_y[b1:b2],mediana[j+n][b1:b2], label='Mediana',
         markersize="2", markeredgewidth="2",color="green", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],mean[j+n][b1:b2], label='Media',
         markersize="2", markeredgewidth="2",color="brown", alpha=1)
#dibujar relleno tenue de color rojo
plt.fill_between(times_y[b1:b2], p_05[j+n][b1:b2],
                 p_95[j+n][b1:b2], color='yellow', alpha=0.2)
plt.title('MASA DE CADMIO QUE PASA POR EL PLANO DE CONTROL A \nx
           = {} m'.format((j+3)*100))
plt.xlabel('Tiempo t(años)')
plt.ylabel('Masa Cd (g)')
plt.legend(loc=1, fontsize=7.5)
plt.grid()

fig = plt.figure(figsize=(16,4))
b1=0
b2=10
for j in range (0,2):
    ax = fig.add_subplot(1, 2, j+1)
    for i in range(0,100):
        a=masa_Total[i][j+4]
        plt.plot(times_y[b1:b2],a[b1:b2], markersize="2",
                 markeredgewidth= "2",color="gray", alpha=0.5)

m=4
plt.plot(times_y[b1:b2],p_05[j+m][b1:b2],
         label='P_05',linestyle='--', markersize="2",
         markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],kr[j+m][b1:b2],
         label='Kriging',linestyle='-.', markersize="2",
         markeredgewidth="2",color="red", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],p_95[j+m][b1:b2],
         label='P_95',linestyle='---', markersize="2",
         markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],mediana[j+3][b1:b2], label='Mediana',
         markersize="2", markeredgewidth="2",color="green", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],mean[j+m][b1:b2], label='Media',
         markersize="2", markeredgewidth="2",color="brown", alpha=1)
plt.fill_between(times_y[b1:b2], p_05[j+m][b1:b2],
                 p_95[j+m][b1:b2], color='yellow', alpha=0.2)
plt.title('MASA DE CADMIO QUE PASA POR EL PLANO DE CONTROL A \nx
           = {} m'.format((j+5)*100))
plt.xlabel('Tiempo t(años)')
plt.ylabel('Masa Cd (g)')
plt.legend(loc=1, fontsize=7.5)
plt.grid()

fig = plt.figure(figsize=(16,4))
b1=0
b2=10
for j in range (0,2):
    ax = fig.add_subplot(1, 2, j+1)
    for i in range(0,100):
        a=masa_Total[i][j+6]
        plt.plot(times_y[b1:b2],a[b1:b2], markersize="2",
                 markeredgewidth= "2",color="gray", alpha=0.5)

m=6
plt.plot(times_y[b1:b2],p_05[j+m][b1:b2],
         label='P_05',linestyle='--', markersize="2",
         markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],kr[j+m][b1:b2],
         label='Kriging',linestyle='-.', markersize="2",
         markeredgewidth="2",color="red", alpha=1)

```

```

plt.plot(times_y[b1:b2],p_95[j+m][b1:b2],
         label='P_95',linestyle='--', markersize="2",
         markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],mediana[j+3][b1:b2], label='Mediana',
         markersize="2", markeredgewidth="2",color="green", alpha=1)
plt.plot(times_y[b1:b2],mean[j+m][b1:b2], label='Media',
         markersize="2", markeredgewidth="2",color="brown", alpha=1)
plt.fill_between(times_y[b1:b2], p_05[j+m][b1:b2],
                 p_95[j+m][b1:b2], color='yellow', alpha=0.2)
plt.title('MASA DE CADMIO QUE PASA POR EL PLANO DE CONTROL A \nx =
{} m'.format((j+7)*100))
plt.xlabel('Tiempo t(años)')
plt.ylabel('Masa Cd (g)')
plt.legend(loc=1, fontsize=7.5)
plt.grid()

fig = plt.figure(figsize=(16,4))
b1=0
b2=10
for j in range (0,1):
    ax = fig.add_subplot(1, 1, j+1)
    for i in range(0,100):
        a=masa_Total[i][j+8]
        plt.plot(times_y[b1:b2],a[b1:b2], markersize="2",
                  markeredgewidth="2",color="gray", alpha=0.5)

    l=8
    plt.plot(times_y[b1:b2],p_05[j+l][b1:b2],
             label='P_05',linestyle='--', markersize="2",
             markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],kr[j+l][b1:b2],
             label='Kriging',linestyle='-.',markersize="2",
             markeredgewidth="2",color="red", alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],p_95[j+l][b1:b2],
             label='P_95',linestyle='--', markersize="2",
             markeredgewidth="2",color="blue", alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],mediana[j+l][b1:b2], label='Mediana',
             markersize="2", markeredgewidth="2",color="green", alpha=1)
    plt.plot(times_y[b1:b2],mean[j+l][b1:b2], label='Media',
             markersize="2", markeredgewidth="2",color="brown", alpha=1)
    plt.fill_between(times_y[b1:b2], p_05[j+l][b1:b2],
                     p_95[j+l][b1:b2], color='yellow', alpha=0.2)
    plt.title('MASA DE CADMIO QUE PASA POR EL PLANO DE CONTROL A \nx =
{} m'.format((j+9)*100))
    plt.xlabel('Tiempo t(años)')
    plt.ylabel('Masa Cd (g)')
    plt.legend(loc=1, fontsize=7.5)
    plt.grid()

plt.show()
viii. salida de fracciones de contaminante
Suma_Total=[]
S_90=[]#paso del 90% del contaminante
S_75=[]#paso del 75% del contaminante
S_50=[]#paso del 50% del contaminante
S_25=[]#paso del 25% del contaminante
for j in n_estocasticas:

    headobj = bf.HeadFile(model_ws + '/'+'hds'+'/'+
                           'Modelo_Flujo_{}.hds'.format(j))
    times = headobj.get_times()
    cbb = bf.CellBudgetFile(model_ws + '/' + 'cbc' + '/'+
                           'Modelo_Flujo_{}.cbc'.format(j))
    for iplot, time in enumerate(times):
        head = headobj.get_data(totim=time)
        fname = os.path.join(model_ws
                           +'/'+'ucn'+'/'+MT3D001_{}.UCN'.format(j))

```

```

ucnobj = flopy.utils.UcnFile(fname)
times = ucnobj.get_times()
conc = ucnobj.get_alldata()
fname = os.path.join(model_ws
+'/'+'t_mas'+'/'+MT3D001_{}.MAS'.format(j))
mvt = mt_model.load_mas(fname)
#calculo de masa total que ingresa al sistema en cada simulación
suma=[]
for h in range(0,15):
    for k in range (0,30):
        C=(conc[h,k,0,:])
        a=[]
        for i in C:
            if i >= 0:
                a.append(i)
        b=np.sum(a)
        suma.append(b)
    t_1=np.sum(suma[0:30])
    t_2=np.sum(suma[30:60])-100*29
    t_3=np.sum(suma[60:90])-100*29
    t_4=np.sum(suma[90:120])
    t_5=np.sum(suma[120:150])
    t_6=np.sum(suma[150:180])
    t_7=np.sum(suma[180:210])
    t_8=np.sum(suma[210:240])
    t_9=np.sum(suma[240:270])
    t_10=np.sum(suma[270:300])
    t_11=np.sum(suma[300:330])
    t_12=np.sum(suma[330:360])
    t_13=np.sum(suma[360:390])
    t_14=np.sum(suma[390:420])
    t_15=np.sum(suma[420:450])

t=[t_1,t_2,t_3,t_4,t_5,t_6,t_7,t_8,t_9,t_10,t_11,t_12,t_13,t_14,t_15]
Suma_Total.append(t)
#interpolacion de puntos de tiempo de observación en cada modelo
f_interp90=InterpolatedUnivariateSpline(times,t,k=1,ext=0)
f_interp75=InterpolatedUnivariateSpline(times,t,k=1,ext=0)
f_interp50=InterpolatedUnivariateSpline(times,t,k=1,ext=0)
f_interp25=InterpolatedUnivariateSpline(times,t,k=1,ext=0)
#cálculo de puntos de intersección de valores de concentraciones
presentes en el sistema
inverse_90 = inversefunc(f_interp90, y_values=(t[3]*.10),
                           domain=(times[4],times[14]),open_domain=False,
                           image=(times[0],times[14]))
inverse_75 = inversefunc(f_interp75, y_values=(t[3]*.25),
                           domain=(times[4],times[14]),open_domain=False,
                           image=(times[0],times[14]))
inverse_50 = inversefunc(f_interp50, y_values=(t[3]*.50),
                           domain=(times[4],times[14]),open_domain=False,
                           , image=(times[0],times[14]))
S_90.append(inverse_90)
S_75.append(inverse_75)
S_50.append(inverse_50)
ix. Calculo de concentracion maxima ingresada al sistema (tiempo t[3],
luego eliminar fuente de cadmio)
Total_ingreso=[]
for i in range (0,100):
    a=Suma_Total[i][3]
    Total_ingreso.append(a)
x. Grafico de histograma de masa que ingresa al sistema
#Estadisticas
m=np.mean(Total_ingreso)
ma=np.max(Total_ingreso)
mi=np.min(Total_ingreso)
de=np.std(Total_ingreso)

```

```

va=np.var(Total_ingreso)
#Título de estadísticas
w_1 = "Mean = {:.2f}".format(m)
w_2 = "Máx = {:.2f}".format(ma)
w_3 = "Mín = {:.2f}".format(mi)
w_4 = "Std = {:.2f}".format(de)
w_5 = "Var = {:.2f}".format(va)
v=[w_1,w_2,w_3,w_4,w_5]
#v
krig=1734
fig = plt.figure(figsize=(16,4))
ax = fig.add_subplot(1, 2, 1)
intervalos = np.arange(0,7500,500)
#indicamos los extremos de los intervalos
values, base, _ = plt.hist(x=Total_ingreso, bins=intervalos,
rwidth=0.85)
plt.title('Histograma de Masa de Cadmio (Cd) \n en la Simulación
Estocástica', fontsize=14)
plt.xlabel('Masa de Cadmio (kg)', fontsize=12)
plt.ylabel('Frecuencia', fontsize=12)
plt.xticks(intervalos,np.arange(0,7.5,.5))
plt.axvline(x=krig, ymin=0, ymax=.2,color='r', linestyle='dashed',
marker='x', linewidth=3)

a1=5500
b1=30
b2=2
plt.text(a1, b1,"Estadísticas",)
plt.text(a1, b1-b2, v[0])
plt.text(a1, b1-2*b2, v[1])
plt.text(a1, b1-3*b2, v[2])
plt.text(a1, b1-4*b2, v[3])
plt.text(a1, b1-5*b2, v[4])
ax = fig.add_subplot(1, 2, 2)
values = np.insert(values,0,0)
ax.plot(base, np.cumsum(values)/ np.cumsum(values)[-1],
color='darkorange',
marker='o', linestyle='-', markersize = 5, label =
"ACumulativo Histograma" )
plt.axvline(m, color='g',ymax=.61, linestyle='dashed', linewidth=2)
plt.axhline(y=.61, color='g',xmin=0, xmax=0.2, linestyle='dashed',
linewidth= 2)
plt.axvline(krig, color='r',ymax=.8, linestyle='dashed',
marker='x', linewidth=3)
plt.title('Curva acumulativa de masa de Cadmio (Cd) \nen la Simulación
Estocástica', fontsize=14)
plt.xlabel('Masa de Cadmio Cd (g)', fontsize=12)
plt.ylabel("Probability", fontsize=12)
plt.grid()
plt.show() #dibujamos el histograma
#convertir los tiempos en años
a90=np.array(S_90).tolist()
year_ar90=[]
for i in range(0,100):
    b90 = a90[i]/(86400*365)
    year_ar90.append(b90)
a75=np.array(S_75).tolist()
year_ar75=[]
for i in range(0,100):
    b75 = a75[i] /(86400*365)
    year_ar75.append(b75)
a50=np.array(S_50).tolist()
year_ar50=[]
for i in range(0,100):
    b50 = a50[i] / (86400*365)
    year_ar50.append(b50)

```

```
#dibujar histogramas y CDF de tiempos de salida
Lista=year_ar90
#Estadísticas
m=np.mean(Lista)
ma=np.max(Lista)
mi=np.min(Lista)
de=np.std(Lista)
va=np.var(Lista)
#Título de estadísticas
w_1 = "Mean = {:.2f}".format(m)
w_2 = "Máx = {:.2f}".format(ma)
w_3 = "Mín = {:.2f}".format(mi)
w_4 = "Std = {:.2f}".format(de)
w_5 = "Var = {:.2f}".format(va)
v=[w_1,w_2,w_3,w_4,w_5]
#v
fig = plt.figure(figsize=(12,4))
ax = fig.add_subplot(1, 1, 1)
intervalos = np.arange(0,86,5)
#indicamos los extremos de los intervalos
plt.axvline(tkrig[0], color='r', linestyle='dashed',
marker='x', linewidth=3)
values, base, _ = plt.hist(x=year_ar90, bins=intervalos, rwidth=0.85)#
,color='b')
plt.title('Histograma de tiempos de salida del 90 % de la masa de
contaminante', fontsize=15)
plt.xlabel('Tiempo de salida (años)')
plt.ylabel('Frecuencia')
plt.xticks(intervalos)
b1=26
b2=1.8
plt.text(62, b1,"Estadísticas",)
plt.text(62, b1-b2, v[0])
plt.text(62, b1-2*b2, v[1])
plt.text(62, b1-3*b2, v[2])
plt.text(62, b1-4*b2, v[3])
plt.text(62, b1-5*b2, v[4])
#plt.grid()
#cálculo de CDF
fig = plt.figure(figsize=(12,4))
ax = plt.axes()
values = np.insert(values,0,0)
ax.plot(base, np.cumsum(values)/ np.cumsum(values)[-1],
color='darkorange',
marker='o', linestyle='-', markersize = 5, label =
"Cumulative Histogram" )
# plt.axhline(0.66, color='r', linestyle='dashed',
marker='<', linewidth=3)
plt.axvline(tkrig[0], color='r', linestyle='dashed',
marker='x', linewidth=3)
plt.axvline(m, color='g', linestyle='dashed', marker='x', linewidth=3)
plt.xlabel('Tiempo de salida (años)')
plt.ylabel("Probabilidad")
plt.title('función de distribución Acumulada CDF - Salida del 90% de
masa', fontsize=15)
ax.legend()
plt.show() #dibujamos el histograma
```

Anejo 5: Resultados de simulación de flujo con inyección forzada de contaminante

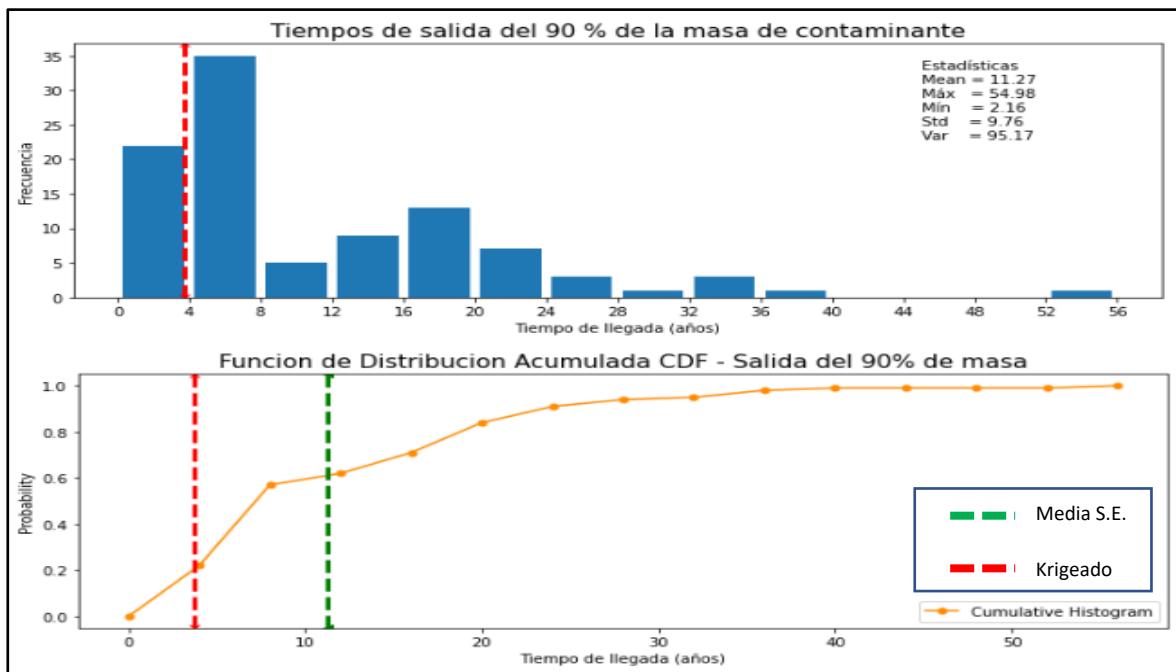


Figura 29: Histograma de tiempos de salida del 90% de masa para modelo con inyección forzada de contaminante

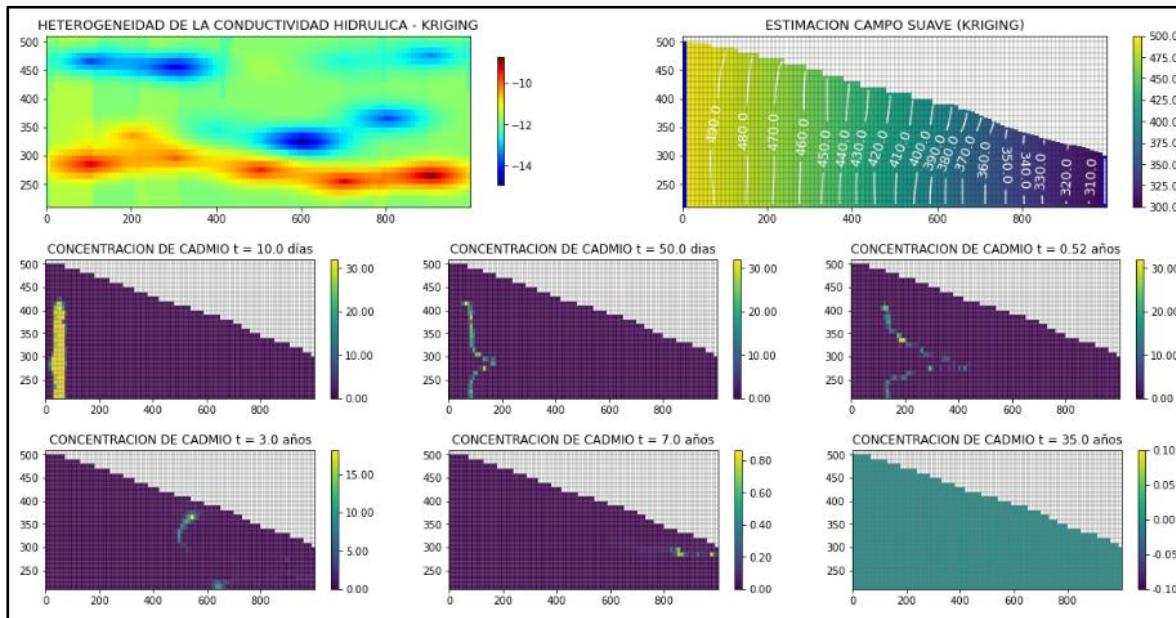


Figura 30: Mapa de inyección forzada del contaminante en el campo estimado.

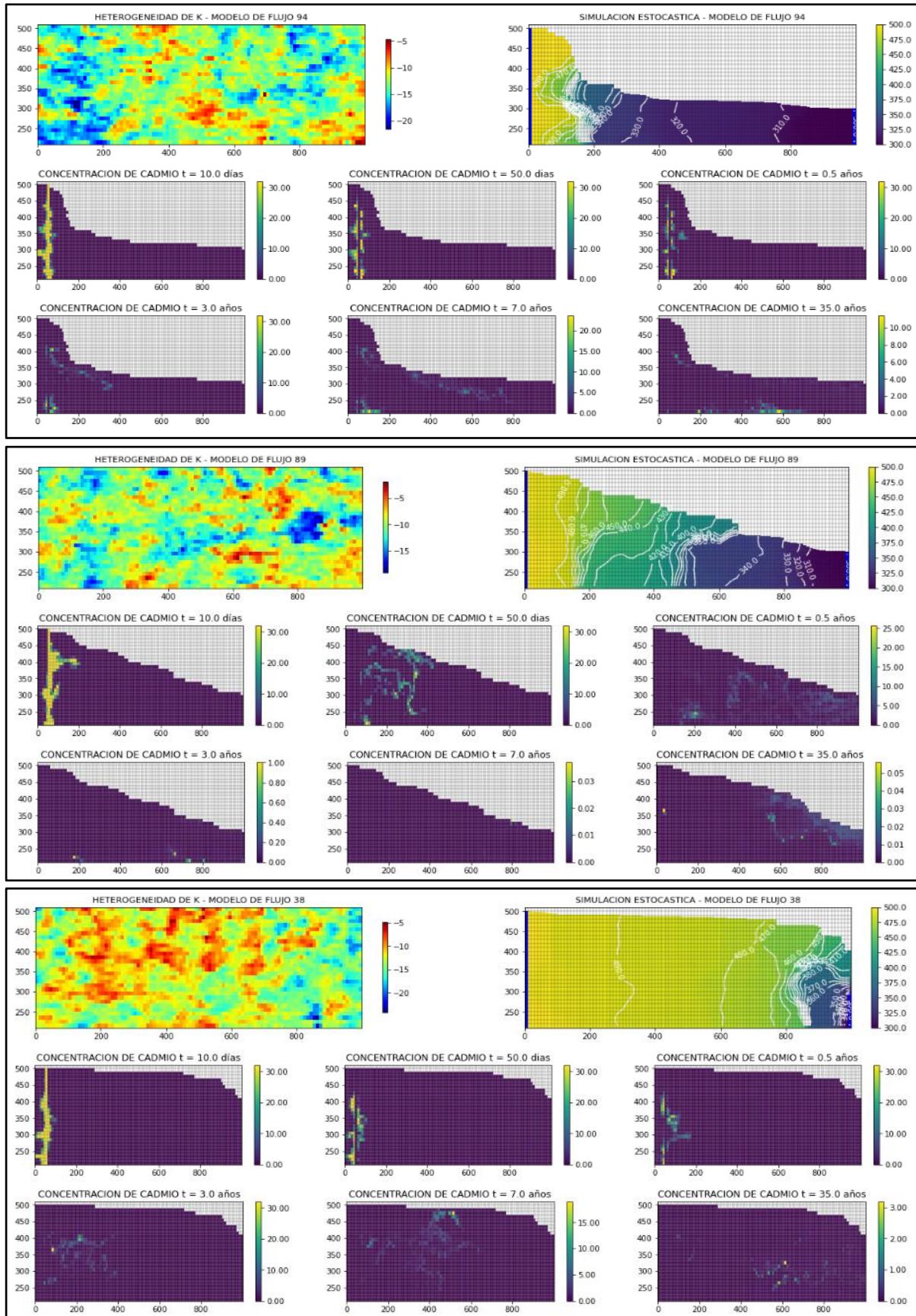


Figura 31: Simulación de transporte se presentan algunos de los campos simulados.