

# Transporte de masa en medio fracturado: impacto del modelo estocástico de conductividad en las fracturas

J.E. Capilla<sup>(1)</sup>, J. Rodrigo<sup>(2)</sup> y J.J. Gómez Hernández<sup>(2)</sup>

(1) Departamento de Física Aplicada, Universidad Politécnica de Valencia.  
Camino de Vera s/n, 46071, Valencia, Spain.  
E-mail: jcapilla@upv.es

(2) Departamento de Ingeniería Hidráulica y Medio Ambiente.  
Universidad Politécnica de Valencia, Camino de Vera s/n, 46071, Valencia, Spain.  
E-mails: jrodrigo@upv.es - jaime@dihma.upv.es

## RESUMEN

Caracterizar la incertidumbre asociada a las predicciones de modelos de flujo y transporte de contaminantes requiere la definición de modelos estocásticos para los parámetros hidrodinámicos implicados. Entre estos se tienen la porosidad y la conductividad hidráulica ( $K$ ) que presentan variaciones de órdenes de magnitud.  $K$  es normalmente el parámetro cuya variación influye más notablemente en el transporte. En el caso de un medio fracturado, es crítica la caracterización de este parámetro en las zonas más alteradas, donde se concentra el flujo y el movimiento de solutos. Dado que las medidas de  $K$  son generalmente pocas y dispersas, es necesario llevar a cabo una modelización estocástica del parámetro que permita cuantificar la incertidumbre de las predicciones del flujo y del transporte.

El presente artículo presenta la resolución del problema del transporte convectivo en un bloque 3D de roca cristalina fracturado. El problema planteado se define a partir de datos obtenidos de una formación geológica real. Dado que estos datos son escasos para demostrar la multigaussianeidad de  $K$  en las fracturas, se analiza el impacto que la asunción de no-multigaussianeidad tendría en el transporte. Esta hipótesis permite que los valores extremos de la conductividad puedan presentar mayor conectividad espacial dando lugar a vías de transporte más rápido, característica ésta que se presenta en la naturaleza y que debe ser modelada para efectuar predicciones conservadoras del movimiento de potenciales contaminantes en la formación. Los resultados obtenidos para las dos hipótesis alternativas muestran el claro impacto de la elección del modelo de función aleatoria de  $K$  en el movimiento de solutos.

Palabras clave: conductividad hidráulica, medio fracturado, multigaussianeidad, simulación estocástica, transporte de masa

## ***Mass transport in fracture media: impact of the random function model assumed for fractures conductivity***

### ABSTRACT

*Characterizing the uncertainty of flow and mass transport models requires the definition of stochastic models to describe hydrodynamic parameters. Porosity and hydraulic conductivity ( $K$ ) are two of these parameters that exhibit a high degree of spatial variability.  $K$  is usually the parameter whose variability influence to a more extended degree solutes movement. In fracture media, it is critical to properly characterize  $K$  in the most altered zones where flow and solutes migration tends to be concentrated. However,  $K$  measurements use to be scarce and sparse. This fact calls to consider stochastic models that allow quantifying the uncertainty of flow and mass transport predictions.*

*This paper presents a convective transport problem solved in a 3D block of fractured crystalline rock. The case study is defined based on data from a real geological formation. As the scarcity of  $K$  data in fractures does not allow supporting classical multiGaussian assumptions for  $K$  in fractures, the non multiGaussian hypothesis has been explored, comparing mass transport results for alternative Gaussian and non-Gaussian assumptions. The latter hypothesis allows reproducing high spatial connectivity for extreme values of  $K$ . This feature is present in nature, might lead to reproduce faster solute pathways, and therefore should be modeled in order to obtain reasonably safe predictions of contaminants migration in a geological formation. The results obtained for the two alternative hypotheses show a remarkable impact of the  $K$  random function model in solutes movement.*

*Key words: fractured medium, hydraulic conductivity, mass transport, multiGaussian, stochastic simulation*

## Introducción

La modelización de medios fracturados mediante el análisis de redes de fracturas discretas (Discrete Fracture Networks - DFN) se utiliza habitualmente para modelizar el flujo y transporte en rocas fracturadas como una alternativa a la modelización como medio continuo. Un inconveniente importante de los modelos DFN es su dificultad a ser calibrados con medidas experimentales. Por una parte esto es debido a la necesidad de conocer con suficiente precisión la geometría de las fracturas así como la distribución de los parámetros hidrodinámicos en las fracturas. Además, estos modelos tienden a ser demasiado rígidos, en el sentido de que una vez definida la localización de las fracturas, el proceso de calibración del modelo difícilmente permite modificar el comportamiento general del sistema corrigiendo, o compensando, posibles deficiencias en la definición de la geometría de las fracturas. Un caso práctico donde no se consiguió realizar la calibración de modelos DFN fue en la modelización de Sellafield (Reino Unido), véase NIREX (1995).

En el presente artículo se propone una aproximación pseudo-continua alternativa: en una representación continua del medio, las fracturas se introducen mediante la asignación de valores altos de conductividad hidráulica ( $K$ ) a aquellos bloques, de una discretización en diferencias finitas del medio, que intersectan la fractura. Los posibles inconvenientes de este tipo de aproximación podrían venir de cuestiones como (1) un inadecuado conocimiento de la geometría de las fracturas, (2) selección de un tamaño de bloque de la discretización demasiado grande en relación con el tamaño del dominio de estudio y de la geometría de las fracturas, (3) problemas numéricos originados por altos contrastes entre valores de  $K$  en bloques contiguos, y (4) posible falta de conectividad entre bloques contiguos (en un esquema en diferencias finitas).

Sin embargo, con las consideraciones anteriores en mente, es posible construir un modelo pseudo-continuo que considere satisfactoriamente los caminos preferentes de flujo y transporte definidos por las fracturas. De hecho, este tipo de modelo ya ha sido usado con éxito por Hendricks *et al.* (1999), e incluso se ha visto que es posible implementarlo aplicando métodos de inversión estocástica. Así, es posible simular campos de conductividad hidráulica ( $K$ ) condicionados a medidas de altura piezométrica que permitan llevar a cabo caracterizaciones más realistas de los resultados de los modelos. Los autores anteriores, Hendricks *et al.* (1999), han implementado el método autocalibrante, debido a Sahuquillo *et al.* (1992) y

desarrollado más tarde por Gómez-Hernández *et al.* (1997) y Capilla *et al.* (1997, 1998), aplicándolo al caso de un modelo pseudo-continuo de una formación de roca cristalina fracturada. La variabilidad espacial de la conductividad es descrita con funciones aleatorias de distinta naturaleza aplicables por una parte a la matriz rocosa menos alterada y, por otra, a las fracturas. En todo caso, los autores anteriores asumen que tanto en la matriz como en las fracturas, la variabilidad espacial de  $K$  es adecuadamente descrita mediante modelos multigaussianos. Tal y como argumentan Gómez-Hernández y Wen (1998), este tipo de modelos tienden a desconectar los valores extremos de  $K$ , dificultando la posible reproducción de vías de flujo y transporte rápidas, pudiendo llevar a predecir tiempos de viaje y concentraciones poco conservadoras.

En este artículo se analiza el impacto de la hipótesis de no-multiGaussioidad en la conductividad hidráulica de las fracturas, comparándose los resultados del transporte convectivo para los casos Gaussiano y no-Gaussiano. El caso de estudio utilizado corresponde a un ejemplo sintético tridimensional, basado en datos reales de una formación cristalina fracturada. Dichos datos han sido obtenidos de Molinero (2000) y SKB (2002, 2003).

La investigación descrita en este artículo continúa la línea de investigación emprendida por los autores, hace más de diez años, siendo el objetivo final la aplicación de métodos de inversión estocástica no multi-gaussianos para el análisis del flujo y transporte en medios de baja permeabilidad fracturados. En este sentido, se tiene el método de las Probabilidades Condicionales, desarrollado e implementado por Capilla *et al.* (1999), que está siendo actualmente aplicado al caso de estudio usado en este artículo.

## Descripción del modelo y de los datos disponibles

El bloque de roca cristalina modelizado tiene unas dimensiones de 286 m (profundidad) x 226 m x 246 m, resolviéndose las ecuaciones del flujo y del transporte mediante el método de diferencias finitas. El volumen de roca analizado queda englobado en una discretización de 43x34x37 bloques (54094 bloques).

Las condiciones de contorno son de presión prescrita en todas las caras del bloque modelizado y se basan en los resultados de un modelo de flujo regional descrito en la documentación anteriormente mencionada. En dicho bloque se tienen varios ensayos de bombeo y de inyección de trazadores que proporcionan información acerca del comportamiento hidrodinámico del mismo. La Figura 1 muestra la localiza-

ción de los 294 datos de logK y de las 51 medidas de altura piezométrica, en condiciones de régimen estacionario o natural, disponibles.

La investigación se ha centrado en la identificación de campos de conductividad hidráulica a escala de metros que reproduzcan de forma realista la heterogeneidad natural de la formación geológica y todos los datos disponibles de conductividad hidráulica. El objetivo final, en fases más avanzadas del trabajo, es

la simulación de campos de K condicionados además a medidas de altura piezométrica, y a otros posibles datos, que permitan realizar predicciones realistas del transporte de masa en la formación.

La figura 2 muestra el histograma de los datos de logK localizados en la matriz y en las fracturas. Obsérvese que en el segundo caso la información disponible ni siquiera permite establecer *a priori* una posible distribución de probabilidades de valores de

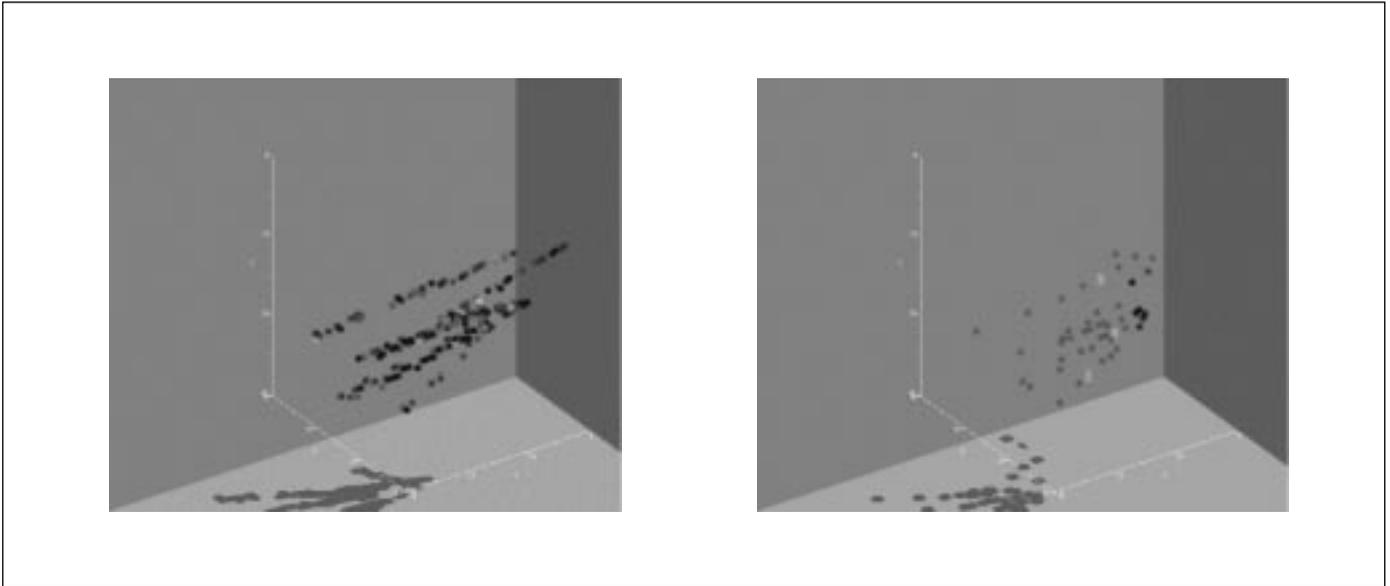


Fig. 1. Localización de los datos de K (izquierda) y de las medidas de altura piezométrica (derecha)  
 Fig. 1. K measurements locations (left) and piezometric measurements locations (right)

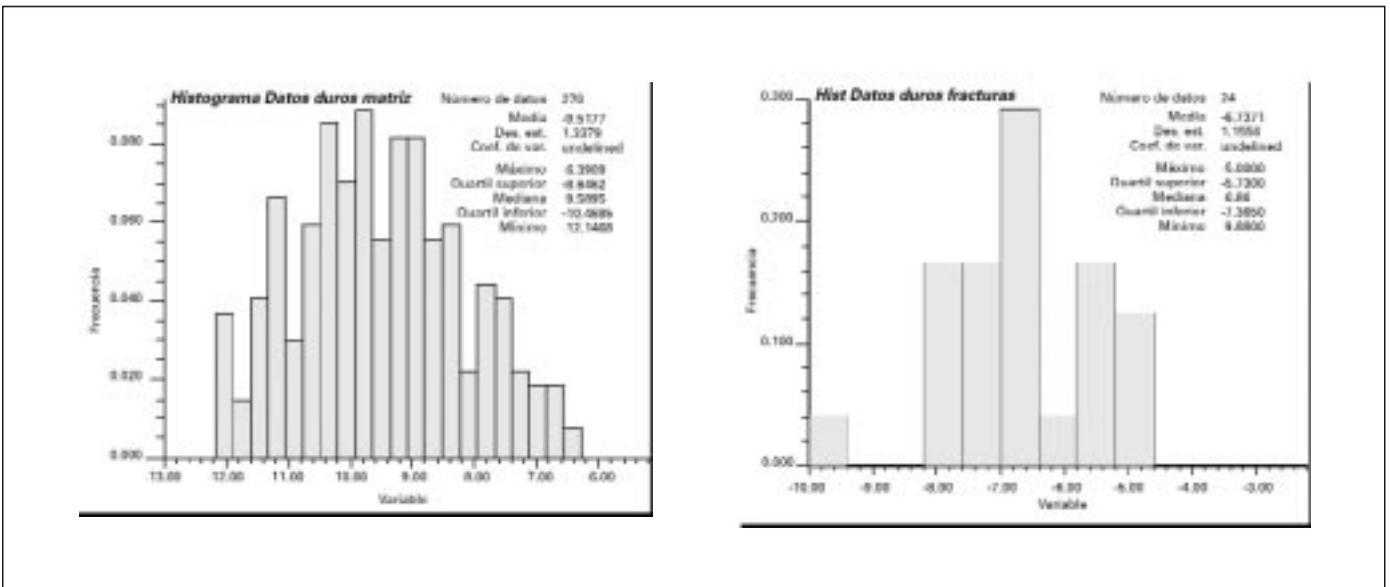


Fig. 2. Histograma de valores de logK en la matriz rocosa (izquierda) y en las fracturas (derecha)  
 Fig. 2. Histogram of available logK data in the rock matrix (left), and in fractures (right)

logK. En la matriz hay disponibles 270 medidas de logK mientras que sólo se tienen 24 medidas en las 20 fracturas identificadas en la formación. En general las fracturas constituyen estructuras donde K es varios órdenes de magnitud mayor que en la matriz. El valor medio de logK en la matriz es  $-9.5 \log \text{ms}^{-1}$  y en las fracturas  $-6.7 \log \text{ms}^{-1}$ . La variografía de logK en la matriz muestra mayor continuidad para valores altos de K. Esta circunstancia es importante pues podría justificar la existencia de zonas de conductividad alta más interconectadas, favoreciendo así una migración más veloz de la masa a través de la matriz rocosa. Sin embargo, K en las fracturas es mucho mayor y por tanto su impacto en el transporte a través de la formación va a ser determinante. No obstante no es posible estudiar la variografía de K en las fracturas a partir de los datos disponibles. Por ello se plantea la necesidad de analizar el impacto que una elevada correlación espacial de valores altos de K podría tener en el transporte. Para ello, se plantean dos hipótesis de trabajo basados en un modelo multigaussiano y otro no multigaussiano.

### Modelización estocástica de la conductividad hidráulica

A la vista de las características de los distintos conjuntos de datos disponibles y considerando que K en

las fracturas normalmente presenta un alto grado de variabilidad espacial se decidió proceder obteniendo simulaciones estocásticas independientes de logK para la matriz y las fracturas, combinándolas posteriormente para obtener campos de logK correspondientes al bloque completo. Se consideraron dos hipótesis de trabajo. En ambas se asume un modelo multigaussiano para logK en la matriz, diferenciándose en el tratamiento asumido para logK en las fracturas. En la primera hipótesis (MG) logK se modeliza como multigaussiana con el mismo variograma para todas las fracturas y con media desviación estándar coherente con los datos disponibles. En la segunda hipótesis (NMG) se asume un modelo no multigaussiano común para todas las fracturas, con el mismo alcance que en la hipótesis MG (40 m) y un modelo de variograma mosaico (mismo variograma para distintos umbrales). La Figura 3 muestra la diferencia en una simulación del campo de logK en una de las fracturas. El primer caso (MG) lleva a un valor más bajo de la conductividad efectiva y un patrón de variabilidad espacial típicamente multigaussiano mientras que en el segundo caso (NMG), se obtiene un valor más alto de la conductividad efectiva con mayor conectividad para valores altos de logK. En ambas figuras los colores más oscuros indican valores más altos de logK.

Tanto para la hipótesis MG como la NMG, pueden obtenerse campos de logK condicionados a datos de

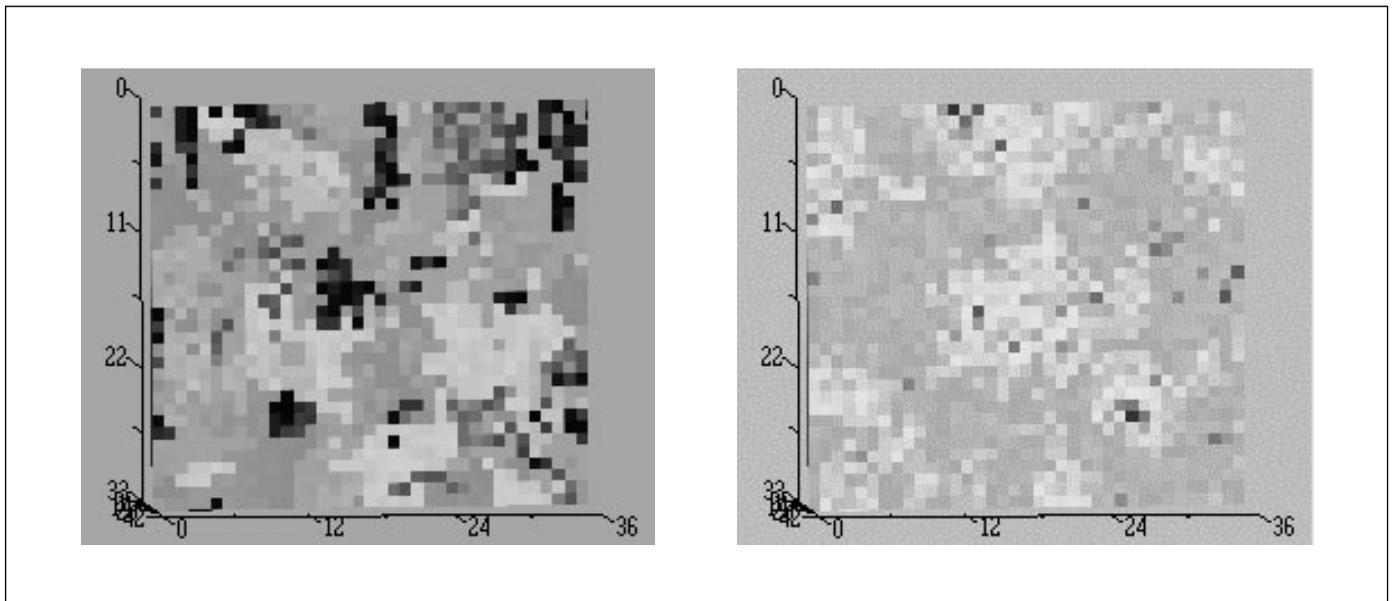


Fig. 3. Realización estocástica del campo de logK simulado en la fractura #16 en la hipótesis multigaussiana (izquierda) y no multigaussiana (derecha)  
 Fig. 3. Stochastic realization of LogK field in fractured #16 for the multiGaussian hypothesis (left) and for the non multiGaussian hypothesis

altura piezométrica mediante la aplicación del método de las Probabilidades Condicionales (CP). El método CP (Capilla *et al.*, 1999) es una técnica de modelación inversa estocástica que presenta la gran ventaja de ser capaz de reproducir un modelo no multigaussiano definido por las funciones de distribución de probabilidad condicionadas locales (ccdf's) en cada bloque de la discretización de diferencias finitas, y por la estructura espacial de las probabilidades asociadas. El método se basa en la actualización, o perturbación, de simulaciones estocásticas de logK previamente generadas (denominadas campos semilla) que reproducen las medidas de logK disponibles y la estructura geoestadística inferida de estos. Una vez actualizado el campo semilla, se obtiene una realización de logK que además reproduce las medidas de altura piezométrica. La Figura 4 muestra una realización del campo semilla para la hipótesis MG y su correspondiente campo actualizado.

El método CP presenta numerosas ventajas en comparación con otras aproximaciones. Preserva la ccdf local definida para cada bloque de la discretización. Esta característica es realmente importante por cuanto en el proceso para obtener la función de distribución local puede haberse incorporado no sólo la información proveniente de los datos de K disponibles sino también información blanda y secundaria como la que proporciona el juicio experto o las campañas de prospección geofísica.

## Resultados y discusión

El objetivo final de la investigación descrita en el presente artículo era obtener campos de logK que permitieran realizar predicciones realistas del transporte de masa. Así, la forma de comparar las realizaciones obtenidas para las hipótesis consideradas, MG y NMG, es comparar los resultados del transporte de masa correspondientes. El análisis realizado se ha basado hasta ahora en los resultados para el transporte convectivo liberando partículas en zonas localizadas del bloque de roca, y estudiando sus trayectorias y tiempos de viaje dentro de este. Los resultados obtenidos proporcionan interesantes conclusiones que, de alguna manera, eran esperadas. También se han comparado resultados de campos semilla y los correspondientes a los actualizados. Aunque se han procesado pocas realizaciones de logK, y por tanto no pueden extraerse conclusiones con carácter general, pueden interpretarse claramente diferencias entre el comportamiento de las hipótesis MG y NMG al condicionar o no a datos de presión.

La Figura 5 muestra diferentes trayectorias obtenidas para los casos MG y NMG. En esta figura se presentan los resultados correspondientes al transporte convectivo para el primer campo simulado. Los valores de logK en la matriz son exactamente los mismos en ambas hipótesis cambiando únicamente los valores de logK en las fracturas. Nótese las variaciones en

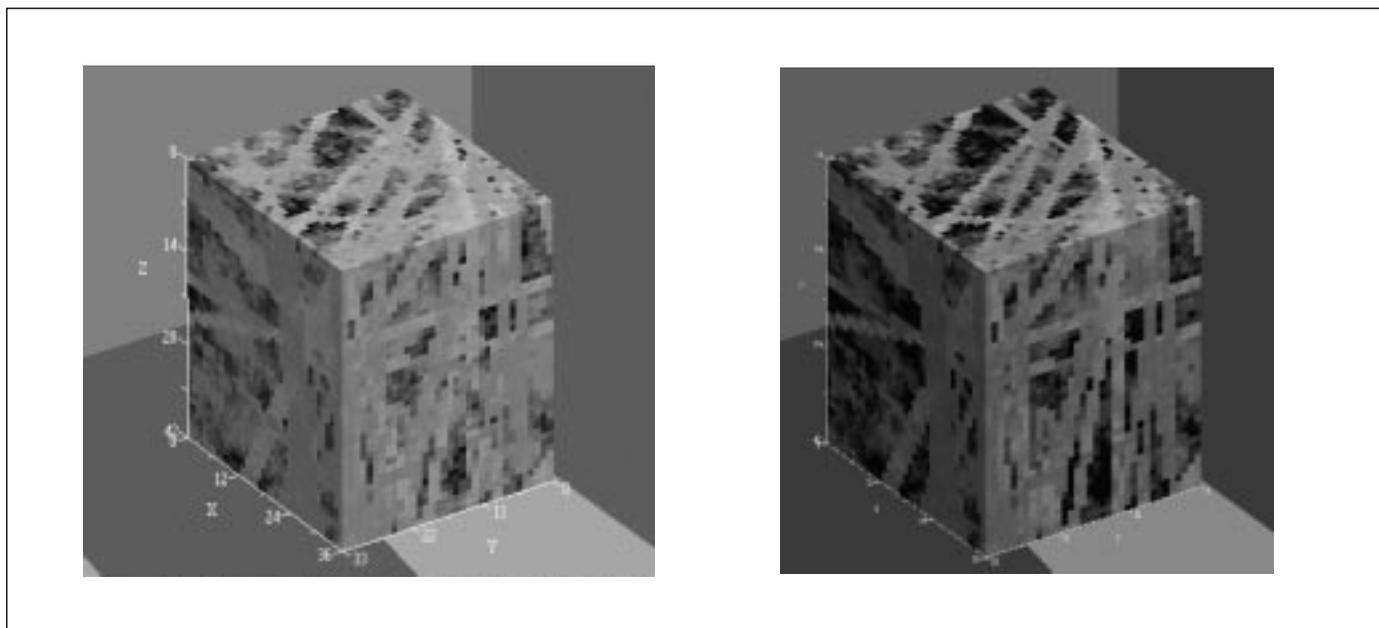


Fig. 4. Realización estocástica del campo de logK para la hipótesis multigaussiana: campo semilla (izquierda) y campo actualizado (derecha)

Fig. 4. Stochastic realization of logK field for the multiGaussian assumption: seed field (left) and updated field (right)

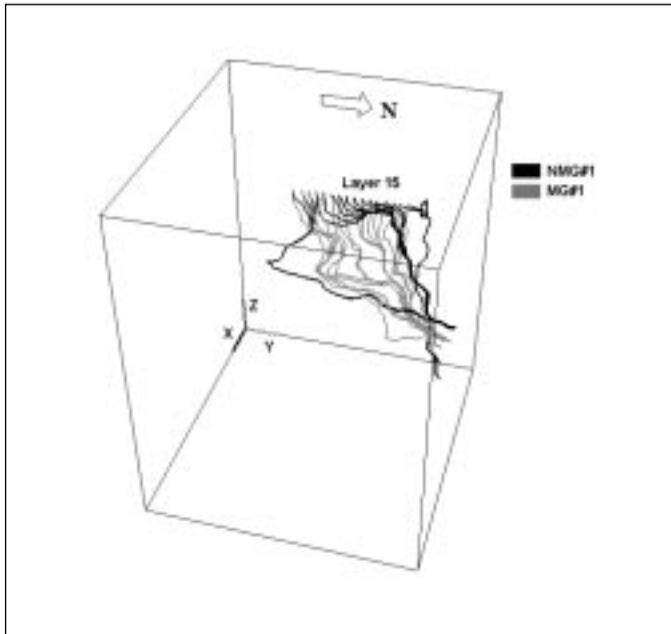


Fig. 5. Resultados del transporte convectivo para el primer campo simulado en la hipótesis multigaussiana (MG) y no multigaussiana (NMG). Las partículas de masa son liberadas sobre la cara Oeste del bloque

*Fig. 5. Convective transport results for logK simulated field in case of multiGaussian hypothesis (left) and non multiGaussian hypothesis. Mass particles are released from the West side of the block*

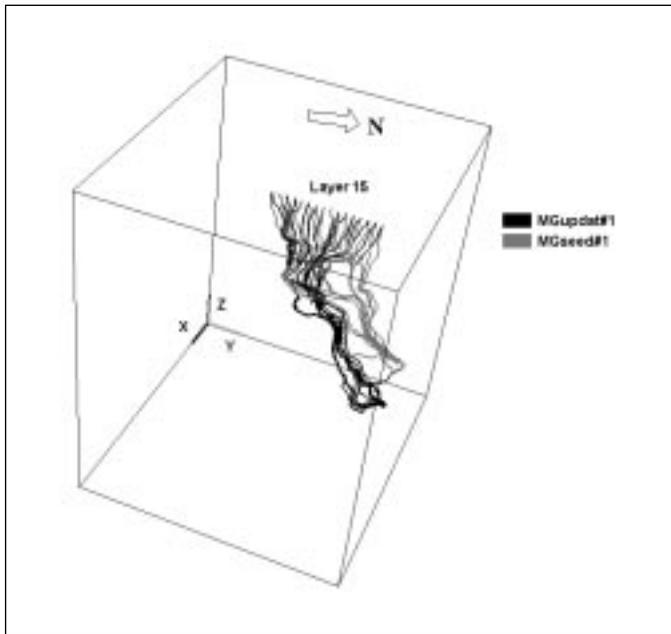


Fig. 6. Resultados del transporte convectivo para el primer campo semilla multigaussiano simulado (MGseed) y su correspondiente campo actualizado (MGupdat). Las partículas de masa son liberadas sobre la cara Oeste del bloque

*Fig. 6. Convective transport results for the first simulated seed multiGaussian field (MGseed) and for the correspondind updated field (MGupdat). Mass particles are released from the West side of the block*

las trayectorias y el efecto de concentración de las mismas ("chanelling effect") en el caso NMG. Estos "canales" se localizan en las fracturas y se han observado para diferentes campos simulados, con variaciones en la posición de salida de las partículas liberadas. La Figura 6 muestra las distintas partículas obtenidas para el primer campo MG simulado y su correspondiente campo actualizado. Las diferencias encontradas entre los campos semilla y los actualizados son muy significativas al comparar tanto las trayectorias como los tiempos de viaje para cada campo simulado.

Aunque el análisis de los resultados requeriría considerar cuidadosamente la influencia de la estructura estocástica de los campos de logK, las condiciones de contorno, las posiciones de partida de las partículas liberadas y la localización de las fracturas con respecto al campo de flujo y las trayectorias, pueden establecerse algunas conclusiones generales:

- El transporte tiende a concentrarse claramente en las fracturas tal y como era esperable. La conectividad de valores altos de conductividad hidráulica encontrada en muchas fracturas al asumir no multigaussianeidad, promueve de forma marcada el efecto de concentración de las trayectorias en las fracturas ("chanelling effect").
- La asunción de no gaussianeidad para logK en las fracturas puede proporcionar valores de los tiempos de viaje tanto mayores como menores. Este hecho hace que la incertidumbre asociada a los modelos de transporte de masa sea mayor, aunque estas predicciones sean más realistas. La manera de reducir esta incertidumbre debe ser la aplicación de técnicas de simulación MonteCarlo que integren la mayor cantidad de información posible.
- El modelo estocástico adoptado para logK tiene una gran influencia en el transporte y la hipótesis multigaussiana puede proporcionar predicciones no realistas.
- La aplicación de técnicas de inversión utilizando el método de las probabilidades condicionales (CP) permite obtener campos de logK que proporcionarían predicciones más realistas del transporte de masa. El impacto del condicionamiento a las medidas de piezometría se observa tanto en la posición de las trayectorias como en la distribución de los tiempos de viaje.

## Agradecimientos

El presente trabajo ha sido financiado parcialmente por ENRESA y mediante el proyecto CICYT HID 99-0481.

## Referencias

- Capilla, J.E., Gómez-Hernández, J.J. y Sahuquillo, A. 1998. Stochastic Simulation of Transmissivity Fields Conditional to Both Transmissivity and Piezometric Data, 3. Application to the Waste Isolation Pilot Plant, in New Mexico (USA). *J. of Hydrology*, 207, 254-269.
- Capilla, J.E., Gómez-Hernández, J.J. y Sahuquillo, A. 1997. Stochastic Simulation of Transmissivity Fields Conditional to Both Transmissivity and Piezometric Data, 2. Demonstration on a Synthetic Aquifer. *J. of Hydrology*, 203, 162-174.
- Capilla, José E., Rodrigo, J. y Gómez J.J. 1999. Simulation of non-Gaussian transmissivity fields honoring piezometric data and integrating soft and secondary information. *Mathematical Geology* 31, No. 7, pp. 907-927.
- Gómez-Hernández, J.J., Sahuquillo, A. y Capilla, J.E. 1997. Stochastic Simulation of Transmissivity Fields Conditional to Both Transmissivity and Piezometric Data, 1. Theory. *J. of Hydrology*, 203, 175-188.
- Gómez-Hernández, J.J. y Wen, X.H. 1998. To be or not to be multiGaussian: A reflection on stochastic hydrology. *Advances in Water Resources*, 21(1), 46-61.
- Hendricks Franssen, H.J.W.M., Gómez-Hernández, Capilla, J.E. y Sahuquillo, A. 1999. Joint Simulation of Transmissivity and Storativity Fields Conditional to Hydraulic Head Data. *Adv. Water Resour.*, 23 (1) 1999, pp. 1-13.
- Moliner Huguet, J. 2000. *Testing and validation of numerical models of groundwater flow, solute transport and chemical reactions in fractured granites: A quantitative study of the hydrogeological and hydrochemical impact produced by the construction of the Åspo underground laboratory (Sweden)*. Tesis doctoral. Universidad de A Coruna.
- NIREX. 1995. Sellafield geological and hydrogeological investigations, factual report - compilations of maps and drawing. *Tech. Report S/95/002. NIREX*
- Sahuquillo, A., Capilla, J.E., Gómez-Hernández, J.J. y Andreu, J. 1992. Conditional Simulation of transmissivity fields honoring piezometric data. In: Blain and Cabrera (Eds.), *Hydraulic Engineering Software IV, Fluid Flow Modeling*, Vol. II, pp. 201-214, Elsevier Applied Science.

Recibido: Mayo 2003

Aceptado: Septiembre 2003