Trabajo Fin de Máster

MODELACIÓN NUMÉRICA DE UN EXPERIMENTO DE TRANSPORTE DE MASA EN UN TANQUE DE ARENA DE LABORATORIO

Intensificación:

ANÁLISIS DE SISTEMAS DE RECURSOS HÍDRICOS

Autor:
JANIRE URIBE ASARTA

Tutor:
J. JAIME GÓMEZ HERNÁNDEZ

JULIO, 2019

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

máster en ingeniería hidráulica y medio ambiente
mihma

Resumen

El Departamento de Ingeniería Civil, Ambiental, Territorial y Arquitectura (DICAteA) de la Universidad de Parma, Italia, llevó a cabo un experimento de transporte de masa empleando un tanque de plexiglás de medidas interiores de 0,96 m × 0,70 m × 0,10 m y relleno de cuentas de vidrio de diámetro 1 mm, en el que se inyecta una solución de fluoresceína de sal de sodio, la cual al ser excitada por rayos ultravioleta emite luz verde. Para inducir cierta tortuosidad en las líneas de flujo, se insertó una barra de plástico vertical a modo de tablestaca en el centro del tanque. Posteriormente, se empleó un modelo numérico para reproducir dicho experimento. Al comparar los penachos de contaminación, observado y simulado, se apreciaron ciertas discrepancias entre ambos, a pesar de que los parámetros, variables externas y condiciones de contorno e iniciales son perfectamente conocidas.

La discordancia entre ambos penachos motiva este trabajo, cuyo objetivo es analizar la razón por la cual se produce. Para ello se discuten varias hipótesis como a) la conductividad hidráulica de las esferas en el tanque no es completamente homogénea, b) las dispersividades no son homogéneas, c) la tablestaca no está perfectamente sellada contra las paredes del tanque y se produce una filtración a lo largo del contacto entre la tablestaca y el tanque, d) el transporte tiene una componente tridimensional que no está recogida en el modelo numérico bidimensional inicial.

Para el estudio de las hipótesis anteriores, se lleva a cabo la calibración de los parámetros conductividad hidráulica y dispersividad longitudinal, mediante el uso del modelo inverso para la estimación de parámetros PEST. Mediante un proceso iterativo, este software optimiza el valor de dichos parámetros de flujo y transporte para intentar reproducir las mediciones de concentración usando el método mínimos cuadrados ponderados e incorporando la regularización de Tikhonov. La calibración se realiza considerando una zonificación del tanque, donde los parámetros a calibrar son homogéneos en cada zona.

Se emplea un modelo numérico bidimensional en el plano xz, empleando una malla de diferencias finitas con una discretización de 96 columnas (dirección x, sentido longitudinal del tanque) y 70 capas (dirección z, altura del tanque) empleando únicamente una fila por cada capa (profundidad del tanque). Por lo tanto, el tamaño de cada celda es de $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 10, 1)$ cm. Para la resolución de la ecuación de flujo se emplea el código MODFLOW 2005 y para la ecuación de transporte, MT3DMS.

La calibración de los parámetros produce campos de valores heterogéneos por zonas. Al considerar tanto la conductividad hidráulica como la dispersividad longitudinal heterogéneas se consigue una gran mejora del ajuste de las concentraciones y también de la forma del penacho. No obstante, se siguen produciendo disimilitudes con respecto al penacho experimental. Cuando se estudia la tercera hipótesis, se concluye que un pequeño flujo a través de la barra vertical y las pareces del tanque mejora la calibración. Los mejores resultados se obtienen cuando se considera conjuntamente que los parámetros de flujo y transporte son heterogéneos y que la estanqueidad de la barrera no es perfecta.

Para el estudio de la última hipótesis se realiza un modelo tridimensional, con un tamaño de celda de $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 1, 1)$ cm. Se verifica que la simplificación realizada al experimento es correcta, pues la variación de la concentración sobre el espesor del tanque es despreciable.

Palabras clave: transporte de masa, modelo inverso, conductividad hidráulica, dispersividad, heterogeneidad.

Resum

El Departament d'Enginyeria Civil, Ambiental, Territorial i Arquitectura (DICAteA) de la Universitat de Parma, Itàlia, va dur a terme un experiment de transport de massa emprant un tanc de plexiglàs de mesures interiors de 0,96 m × 0,70 m × 0,10 m, farcit de comptes de vidre de diàmetre 1 mm, en el qual s'injecta una solució de fluoresceïna de sal de sodi, la qual en ser excitada per raigs ultraviolats emet llum verda. Per induir certa tortuositat en les línies de flux, es va inserir una barra de plàstic vertical a manera de palplanxa al centre del tanc. Posteriorment, es va emprar un model numèric per reproduir aquest experiment. En comparar els plomalls de contaminació, observat i simulat, es van apreciar certes discrepàncies entre tots dos, tot i que els paràmetres, variables externes i condicions de contorn i inicials són perfectament conegudes.

La discordança entre els dos plomalls motiva aquest treball, l'objectiu és analitzar la raó per la qual es produeix. Per a això es discuteixen diverses hipòtesis com ara a) la conductivitat hidràulica de les esferes en el tanc no és completament homogènia, b) les dispersivitats no són homogènies, c) la palplanxa no està perfectament segellada contra les parets del tanc i es produeix una filtració al llarg del contacte entre la palplanxa i el tanc, d) el transport té una component tridimensional que no està recollida en el model numèric bidimensional inicial.

Per a l'estudi de les hipòtesis anteriors, es porta a terme el calibratge dels paràmetres conductivitat hidràulica i dispersivitat longitudinal, mitjançant l'ús del model invers per a l'estimació de paràmetres, PEST. Mitjançant un procés iteratiu, aquest programa optimitza el valor d'aquests paràmetres de flux i transport per intentar reproduir els mesuraments de concentració usant el mètode de regularització de Tikhonov i mínims quadrats ponderats. El calibratge es realitza considerant una zonificació del tanc, on els paràmetres a calibrar són homogenis a cada zona.

Es fa servir un model numèric bidimensional en el pla xz, emprant una malla de diferències finites amb una discretització de 96 columnes (direcció x, sentit longitudinal del tanc) i 70 capes (direcció z, altura del tanc) emprant únicament una fila per cada capa (profunditat del tanc). Per tant, la mida de cada cel·la és de $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 10, 1)$ cm. Per a la resolució de l'equació de flux s'empra el codi MODFLOW 2005 i per a l'equació de transport, MT3DMS.

El calibratge dels paràmetres produeix camps de valors heterogenis per zones. En considerar tant la conductivitat hidràulica com la dispersivitat longitudinal heterogènies s'aconsegueix una gran millora de l'ajust de les concentracions i també de la forma del plomall. No obstant això, se segueixen produint dissimilituds respecte al plomall experimental. Quan s'estudia la tercera hipòtesi, es conclou que un petit flux a través de la barra vertical i les parets del tanc millora el calibratge. Els millors resultats s'obtenen quan es considera conjuntament que els paràmetres de flux i transport són heterogenis i que l'estanquitat de la barrera no és perfecta.

Per a l'estudi de l'última hipòtesi es realitza un model tridimensional, amb una mida de cel·la de $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 1, 1)$ cm. Es verifica que la simplificació realitzada a l'experiment és correcta, ja que la variació de la concentració sobre el gruix del tanc és menyspreable.

Paraules clau: transporte de massa, model invers, conductivitat hidràulica, dispersivitat, heterogeneïtat.

Abstract

The Department of Civil, Environmental, Land Management Engineering and Architecture (DICATeA) of the University of Parma, Italy, conducted a mass transport experiment in a sandbox built with plexiglass and internal dimensions of 0,96 m × 0,70 m × 0,10 m, filled with glass beads with a diameter equal to 1 mm, in which a fluorescein sodium salt solution was injected, which when excited by ultraviolet rays, emits green light. As a sheet pile, a vertical plastic plate was inserted in the centre of the sandbox in order to induce some tortuosity in the flow lines. Subsequently, a numerical model was used to reproduce this experiment. When comparing both contamination plumes, the observed one and the simulated one, some discrepancies were noticed, although the parameters, external variables and boundary and initial conditions were well known.

The discordance between both plumes motivates this work and its aim is to analyse the reason why it occurs. For this, several hypotheses are discussed such as a) the hydraulic conductivity of the porous medium is not completely homogeneous, b) the dispersivities are not homogeneous, c) the vertical plate is not perfectly sealed against the walls of the sandbox and a filtration occurs along the contact between the plate and the sandbox, d) transport has a three-dimensional component that was not included in the initial two-dimensional numerical model.

The study of the previous hypotheses has involved the calibration of the hydraulic conductivity and longitudinal dispersivity by using the inverse model for parameter estimation PEST. Through an iterative process, this software optimizes the value of these flow and transport parameters to try to reproduce the concentration measurements using the Tikhonov regularization and weighted least squares method. The calibration is carried out dividing into zones the whole domain of the numerical model, the parameters to be calibrated are homogeneous in each zone.

A two-dimensional numerical model in the xz plane is employed, using a finite difference mesh with a discretization of 96 columns (x direction, longitudinal size of the sandbox) and 70 layers (z direction, sandbox height) using only one row for each layer (y direction, sandbox depth). Therefore, the size of each cell is $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 10, 1)$ cm. The code MODFLOW 2005 was used to solve the flow equation and MT3DMS, for the transport equation.

Parameter calibration produces fields of heterogeneous values by zones. By considering the hydraulic conductivity and longitudinal dispersivity heterogeneous a great improvement of the adjustment of the concentration and also of the shape of the plume is achieved. However, dissimilarities continue to occur with respect to the experimental plume. When the third hypothesis is studied, it is concluded that a small flow through the vertical plate and the walls of the tank improves the calibration. The best results are obtained when it is jointly considered that the parameters of flow and transport are heterogeneous and the water tightness of the barrier is not perfect.

A three-dimensional model is built to study the last hypothesis, with a cell size of $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 1, 1)$ cm. It is verified that the simplification made is correct, since the variation of the concentration on the thickness of the tank is negligible.

Keywords: mass transport, inverse modeling, hydraulic conductivity, dispersivity, heterogeneity.

Agradecimientos

Esta tesis de máster se ha podido realizar gracias a la colaboración del Departamento de Ingeniería y Arquitectura de la Universidad de Parma, Italia, y sus integrantes, quienes nos proporcionaron indicaciones y permitieron emplear información relativa a uno de sus ensayos de laboratorio.

Quisiera agradecer a mi director de tesis de máster, Jaime Gómez Hernández, su dedicación y supervisión; aun estando inmerso en varios proyectos, siempre he recibido su apoyo. De igual manera, quiero mostrar mi gratitud por darme la oportunidad de hacer uso de las instalaciones del Grupo de Hidrogeología de la Universidad Politécnica de Valencia.

Asimismo, quiero agradecer la buena acogida que me dieron tanto los profesores como los becarios de dicho grupo de investigación. En especial, he de mencionar a Zi Chen, por el tiempo empleado y disposición a ayudarme con cualquier cuestión desde el primer día. También quisiera nombrar a Vanessa Godoy, por su interés y la ayuda ofrecida.

Índice de contenido

1. Introducción 1

1.1. Justificación y objetivos 1

1.2. Organización del documento 11

2. Material de partida 13

2.1. Descripción del experimento 13

2.2. Descripción del modelo numérico 16

3. Discusión de las hipótesis 21

3.1. Software PEST 22

3.2. Heterogeneidad de la conductividad hidráulica 26

3.3. Heterogeneidad de la dispersividad 39

3.4. Falta de estanqueidad en la tablestaca 61

3.5. Transporte tridimensional 71

4. Síntesis y conclusiones 77

5. Bibliografía 83

Índice de figuras

Figura 1. Penacho en el momento t = 440 s. (Ensayo de laboratorio).....4

Figura 2. Penacho en el momento t = 440 s. (Modelo numérico inicial 2D).....4

Figura 3. Penacho en el momento t = 540 s. (Ensayo de laboratorio).....5

Figura 4. Penacho en el momento t = 540 s. (Modelo numérico inicial 2D).....5

Figura 5. Penacho en el momento t = 700 s. (Ensayo de laboratorio).....6

Figura 6. Penacho en el momento t = 700 s. (Modelo numérico inicial 2D).....6

Figura 7. Penacho en el momento t = 900 s. (Ensayo de laboratorio).....7

Figura 8. Penacho en el momento t = 900 s. (Modelo numérico inicial 2D).....7

Figura 9. Penacho en el momento t = 1.040 s. (Ensayo de laboratorio).....8

Figura 10. Penacho en el momento t = 1.040 s. (Modelo numérico inicial 2D).....8

Figura 11. Penacho en el momento t = 1.400 s. (Ensayo de laboratorio).....9

Figura 12. Penacho en el momento t = 1.400 s. (Modelo numérico inicial 2D).....9

Figura 13. Gráficas concentración observada versus concentración simulada (mg/L) por el modelo inicial para los tiempo de estudio (t = 440 s, t = 540 s, t = 700 s, t = 900 s, t = 1.040 s y t = 1.400 s).....10

Figura 14. Equipo de laboratorio. (Citarella et al., 2015a).....14

Figura 15. Esquema del experimento. El rectángulo interior corresponde al área fotografiada, donde se realiza el estudio de las concentraciones. Los puntos de calibración y observación indicados en esta imagen no son empleados en el presente trabajo. (Chen et al., 2018).....14

Figura 16. Penacho simulado considerando únicamente el transporte convectivo (modelo inicial).....20

Figura 17. Distribución de los puntos de observación de la concentración del trazador en el tanque de arena.....24

Figura 18. Discretización espacial de la distribución de las zonas de distinta conductividad hidráulica.....28

Figura 19. Distribución de la conductividad hidráulica tras su calibración (con todos los puntos de observación).....29

Figura 20. Penacho simulado considerando únicamente el transporte convectivo (1ª calibración de K, con todos los puntos de observación).....30

Figura 21. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....31

Figura 22. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 31

Figura 23. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 32

Figura 24. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 32

Figura 25. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 32

Figura 26. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 33

Figura 27. Distribución de la conductividad hidráulica tras su calibración (sin punto de observación 9). 35

Figura 28. Penacho simulado considerando únicamente el transporte convectivo (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). 36

Figura 29. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (2º calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 36

Figura 30. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 36

Figura 31. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 37

Figura 32. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 37

Figura 33. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 37

Figura 34. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 38

Figura 35. Discretización espacial de la distribución de las zonas de distinta dispersividad longitudinal. 41

Figura 36. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 42

Figura 37. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....43

Figura 38. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....44

Figura 39. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....44

Figura 40. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....44

Figura 41. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....45

Figura 42. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....45

Figura 43. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 47

Figura 44. Penacho y gráfica de valores de concentración observada – simulada en el momento t = 440 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....48

Figura 45. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....48

Figura 46. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....49

Figura 47. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....49

Figura 48. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....49

Figura 49. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.....50

Figura 50. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 52

Figura 51. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 53

Figura 52. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 54

Figura 53. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 54

Figura 54. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 54

Figura 55. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 55

Figura 56. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de αL, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 55

Figura 57. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 57

Figura 58. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 58

Figura 59. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 58

Figura 60. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 59

Figura 61. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 59

Figura 62. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 59

Figura 63. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de αL, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 60

Figura 64. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 63

Figura 65. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 64

Figura 66. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 64

Figura 67. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 64

Figura 68. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 65

Figura 69. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 65

Figura 70. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 67

Figura 71. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 68

Figura 72. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 68

Figura 73. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 68

Figura 74. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 69

Figura 75. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 69

Figura 76. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 72

Figura 77. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 72

Figura 78. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 73

Figura 79. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 73

Figura 80. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 73

Figura 81. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 74

Figura 82. Gráfica de valores de concentración modelo 2D – modelo 3D (pared)..... 75

Figura 83. Gráfica de valores de concentración modelo 3D (pared) – modelo 3D (centro). ... 75

Índice de tablas

Tabla 1. Parámetros de flujo y transporte. 18

Tabla 2. Valores de la conductividad hidráulica tras su calibración (con todos los puntos de observación). 28

Tabla 3. Análisis de la 1ª calibración de la conductividad hidráulica y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio (mg/L). 33

Tabla 4. Valores de la conductividad hidráulica tras su calibración (sin punto de observación 9). 34

Tabla 5. Análisis de la 2ª calibración de la conductividad hidráulica (sin punto de observación 9) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio (mg/L). 38

Tabla 6. Comparación de errores de la concentración simulada con los distintos campos de conductividad hidráulica (mg/L). 39

Tabla 7. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 42

Tabla 8. Análisis de la 1ª calibración de la dispersividad longitudinal (K homogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD (mg/L). 46

Tabla 9. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD. 46

Tabla 10. Análisis de la 2ª calibración de la dispersividad longitudinal (K heterogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD (mg/L). 50

Tabla 11. Comparación de errores de la concentración simulada con los distintos campos de dispersividad longitudinal. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD (mg/L). 51

Tabla 12. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 52

Tabla 13. Análisis de la 1ª calibración de la dispersividad longitudinal (K homogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L). 55

Tabla 14. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 56

Tabla 15. Análisis de la 2ª calibración de la dispersividad longitudinal (K heterogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L). 60

Tabla 16. Comparación de errores de la concentración simulada con los distintos campos de dispersividad longitudinal. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L). 61

Tabla 17. Valores de la conductividad hidráulica y la dispersividad longitudinal para la zona de la barrera tras su calibración (K y αL homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 62

Tabla 18. Análisis de la 1ª calibración de la filtración a través de la barrera (K y αL homogéneas) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L). 66

Tabla 19. Valores de la conductividad hidráulica y la dispersividad longitudinal para la zona de la barrera tras su calibración (K y αL heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC. 66

Tabla 20. Análisis de la 2ª calibración de la filtración a través de la barrera (K y αL heterogéneas) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L). 69

Tabla 21. Comparación de errores de la concentración simulada con las distintas suposiciones de cómo actúa la barrera. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L). 70

1. Introducción

1.1. Justificación y objetivos

Las aguas subterráneas suponen una componente del ciclo hidrológico fundamental desde el punto de vista ecológico, como fuente para el mantenimiento de ecosistemas acuáticos terrestres, y desde el punto de vista del abastecimiento, como recurso, ya que sobre todo en zonas de clima árido o semiárido, son esenciales para satisfacer las demandas de agua. Sin embargo, el hecho de encontrarse bajo la superficie del terreno y no ser visibles, hace que las aguas subterráneas sean vulnerables a la contaminación.

La contaminación de las aguas subterráneas puede generar graves problemas de salud y desastres medioambientales, por lo que cuanto mayor sea el conocimiento acerca del comportamiento del contaminante en el acuífero, más adecuadas serán las medidas a tomar. Por un lado, la identificación del lugar donde se encuentra la fuente de contaminación es necesaria para encontrar la causa, así como el responsable, y poder tomar las acciones legales pertinentes. Por otro lado, llegar a conocer la distribución y evolución del penacho del contaminante en el espacio y en el tiempo, y también durante cuánto tiempo ha sido liberado, permite tener la información para estimar cómo se propaga y así determinar las medidas de remediación óptimas.

Son muchas las investigaciones que han abordado esta temática mediante el uso de modelos inversos. Con estos, a partir de información que se posee acerca del penacho de contaminación en un momento dado tras su vertido, datos de valores de concentración obtenidos mediante observaciones, se pretende determinar cómo y desde donde se ha producido. La modelación inversa también se emplea como método de caracterización de las propiedades de los acuíferos, como recogen Zhou et al. (2014), donde analizan su evolución en las últimas décadas.

Debido a la dificultad en validar los modelos numéricos, la mayoría de estos estudios han sido realizados en tanques sintéticos de laboratorio, los cuales permiten reproducir eventos contaminantes en condiciones rigurosamente controladas (Cupola, 2016). A diferencia de lo que ocurre en campo, en laboratorio, las propiedades hidráulicas del medio poroso son conocidas de manera exhaustiva, así como las condiciones de contorno e iniciales. Además, se siguen normas muy estrictas para la toma de medidas y a la hora de ejecutar el experimento.

En la modelación inversa se pueden tomar dos enfoques, por un lado, se puede realizar una modelación inversa determinística, con la cual se obtiene un conjunto único de valores estimados. Por otro lado, se puede decidir utilizar un planteamiento estocástico, considerando que los parámetros son campos aleatorios que pueden ser caracterizados por sus propiedades estadísticas.

Dentro del primer grupo, cabe destacar la técnica de regresión no lineal y el método de máxima verosimilitud (*Maximum Likelihood Method*, MLM), desarrollado por Carrera y Neuman (1986) y empleado por Medina y Carrera (1996) para estimar conjuntamente parámetros de flujo y transporte incluyendo información sobre piezometría y concentraciones. Wagner (1992) también empleó la técnica MLM para hallar la fuente contaminante.

En el segundo grupo, se puede señalar el método de puntos piloto (*Pilot Points Method*, PiPM) desarrollado por De Marsily et al. (1984), en el cual se emplea la técnica de geoestadística de krigeado para la estimación de parámetros. Siguiendo con un planteamiento geoestadístico, Snodgrass y Kitanidis (1997) propusieron el análisis bayesiano como método de localización de la fuente contaminante. Posteriormente, Butera et al. (2013) se basaron en esta técnica para desarrollar el método de "función de vertido e identificación de la fuente simultáneamente" (*Simultaneous Release Function and Source location Identification*, SRSI). Por otro lado, Neupauer y Wilson (1999) demostraron que las funciones de densidad de probabilidad del tiempo de viaje y la localización de la concentración en un lugar previo están relacionadas entre sí. De manera que desarrollaron una técnica basada en el método de evaluación de los estados vecinos a la cual denominaron "modelo de localización anterior" (*Backward Probability location Model based on Adjoint State Method*, BPM-ASM). Como resultado, se obtiene la función de densidad de probabilidad de la ubicación del contaminante en un momento dado, pudiendo así identificar la fuente.

Recientemente, basándose en la metodología BPM-ASM, en el Departamento de Ingeniería Civil, Ambiental, Territorial y Arquitectura (actualmente, Departamento de Ingeniería y Arquitectura, aunque en este trabajo se seguirá denominando por su nombre antiguo) de la Universidad de Parma, (DICAteA), Italia, se ha llevado a cabo un estudio para identificar el lugar donde se produce la entrada de un soluto en un tanque de arena (Citarella et al., 2015b). Es precisamente este estudio el que motiva este trabajo.

El experimento consiste en un tanque de arena considerado homogéneo, en el cual se introdujo una barra de plástico vertical, a modo de tablestaca, en el centro del tanque con el

propósito de inducir cierta tortuosidad en las líneas de flujo. Se inyectó, de manera constante durante un cierto periodo de tiempo, una solución de fluoresceína de sodio con una cierta concentración desde un punto en el interior del tanque. Mediante fotografías se documentó la evolución del penacho. Posteriormente, mediante un modelo numérico en dos dimensiones, empleando el código MODFLOW 2005 (Harbaugh, 2005) para la resolución de la ecuación de flujo y el código MT3DMS (Zheng y Wang, 1999), para la ecuación de transporte, se intentó reproducir los resultados de laboratorio. Sin embargo, se apreciaron ciertas diferencias entre el penacho que el trazador genera en ambos casos, a pesar de que los parámetros, variables externas y condiciones de contorno eran perfectamente conocidas y, por lo tanto, el resultado obtenido mediante el modelo numérico no debería diferir del resultado obtenido en laboratorio. Intentar explicar estas diferencias es el hilo conductor de este trabajo de fin de máster.

Para ello, se decide utilizar un enfoque determinístico, haciendo uso del software PEST (Doherty, 2018), el cual emplea el algoritmo de Gauss-Levenberg-Marquardt para la resolución del problema inverso no lineal de mínimos cuadrados. Además se emplea la regularización de Tikhonov para así tener en consideración las calibraciones previamente realizadas por los autores de este experimento (Citarella et al., 2015a y 2015b) y por los autores que han hecho uso de la información relativa a este experimento para sus estudios (Chen et al., 2018).

A continuación, se muestran varias imágenes que corresponden a la evolución del penacho durante el ensayo en laboratorio e imágenes del penacho generado por el modelo numérico. Se analizan diferentes tiempos y puntos en el espacio para realizar la comparación.

Las figuras 1 y 2 muestran la curvatura que adopta el penacho debido a la tortuosidad inducida por la barrera en las líneas de flujo en el momento t = 440 s del experimento. Se puede observar cómo el modelo numérico reproduce un transporte más rápido, alcanzando una mayor profundidad para el mismo paso de tiempo, así como una forma menos curva en comparación con el penacho experimental, lo cual produce una menor aproximación lateral a la barrera.

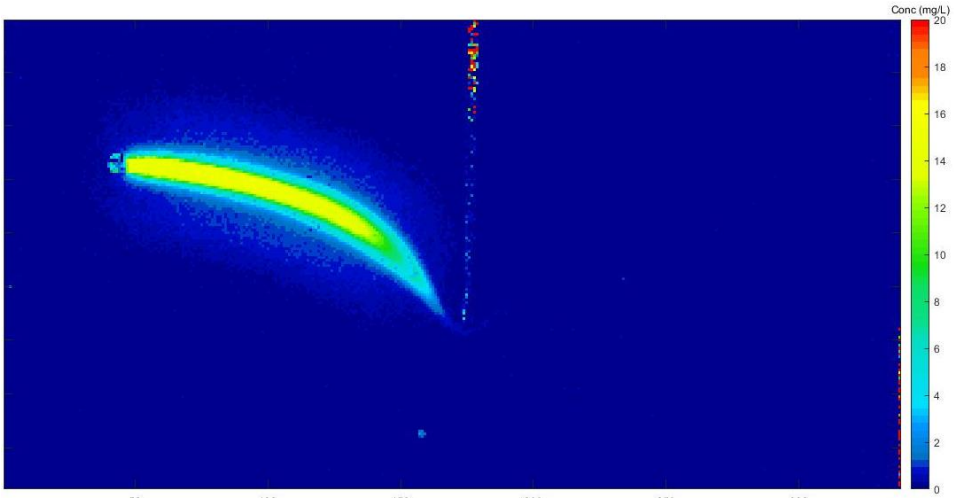

Figura 1. Penacho en el momento t = 440 s. (Ensayo de laboratorio).

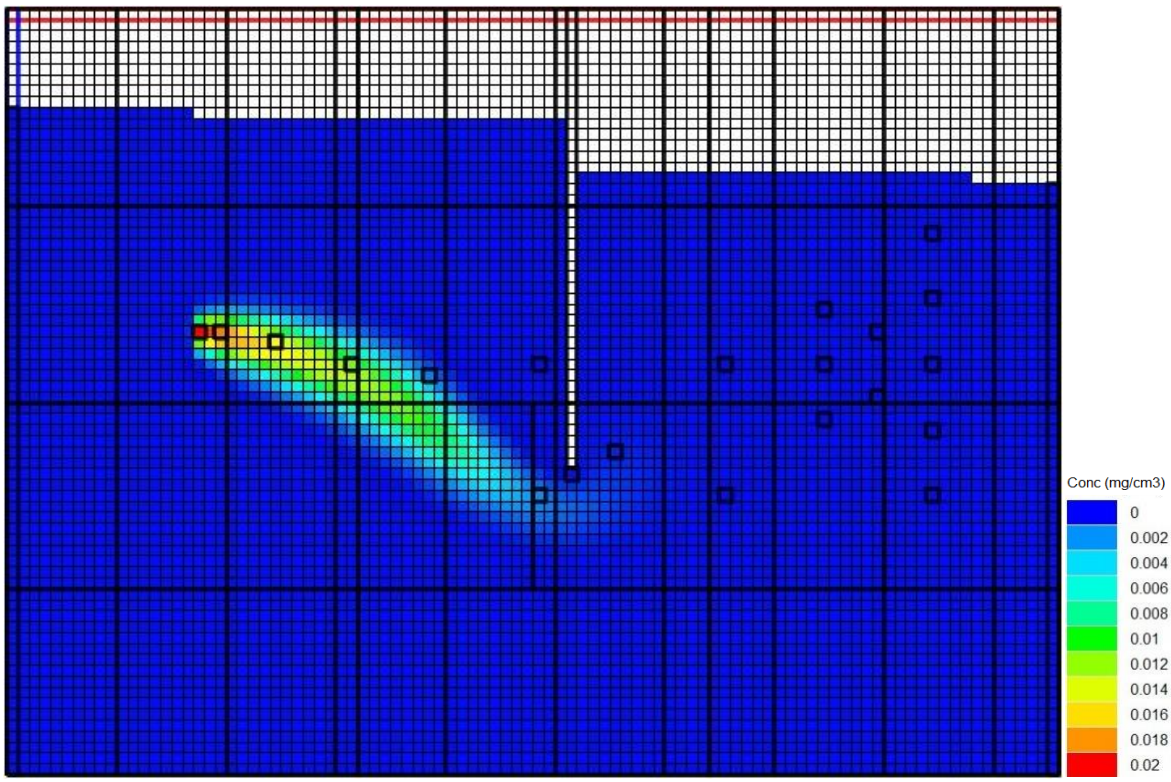

Figura 2. Penacho en el momento t = 440 s. (Modelo numérico inicial 2D).

En las figuras 3 y 4, se observa como el penacho sortea la barrera en el momento t = 540 s del experimento y se pueden indicar varias disimilitudes. Por un lado, mientras en laboratorio, el penacho pasa de manera muy cercana por debajo de la barrera, el modelo numérico no es capaz de reproducir esta situación, el penacho desciende a una distancia notable respecto a la barrera. Seguido, tras superar el obstáculo, el penacho experimental tiende hacia arriba con un mayor ángulo de inclinación que el simulado.

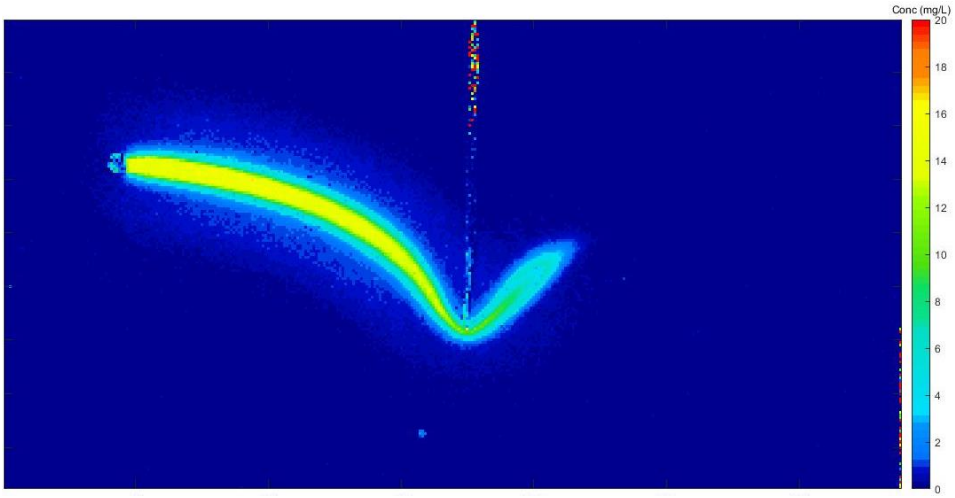

Figura 3. Penacho en el momento t = 540 s. (Ensayo de laboratorio).

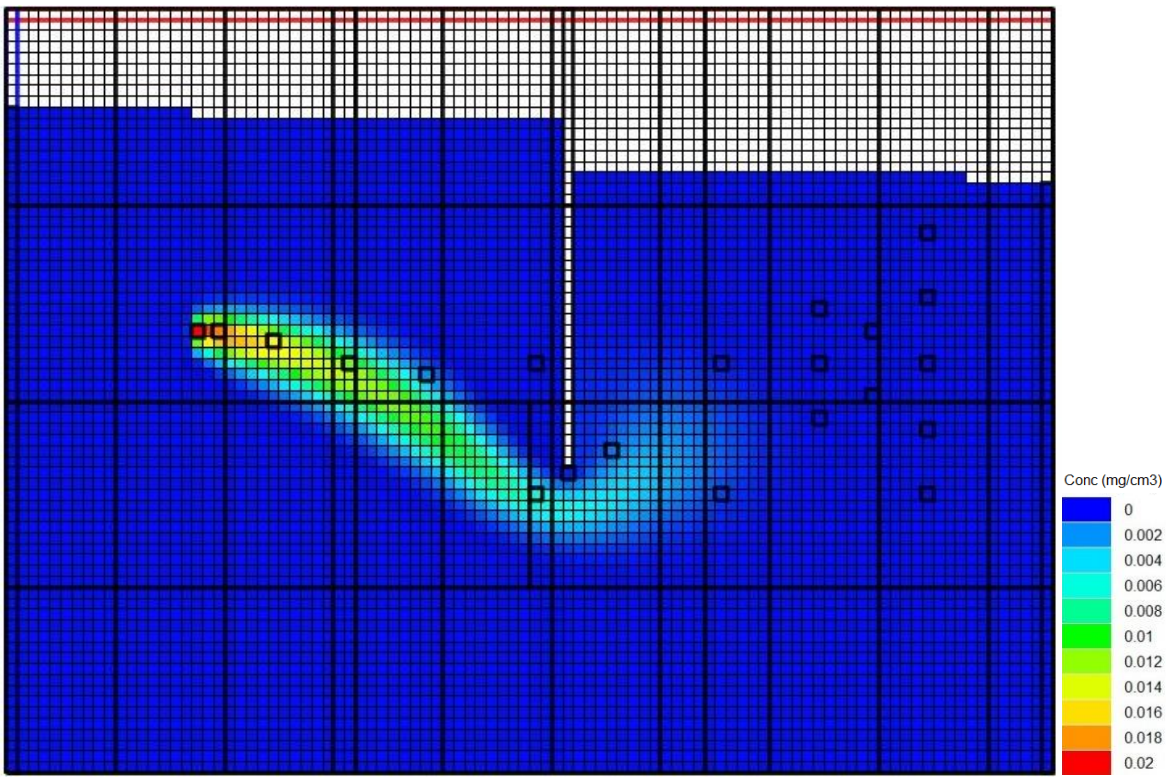

Figura 4. Penacho en el momento t = 540 s. (Modelo numérico inicial 2D).

Las figuras 5 y 6 muestran la forma que adquiere el penacho experimental y numérico, respectivamente, al pasar la barrera en el momento t = 700 **s** del experimento. De manera evidente, se observa una apariencia diferente entre ambos penachos, tanto en la curvatura como en las concentraciones, siendo las simuladas menores a las observadas.

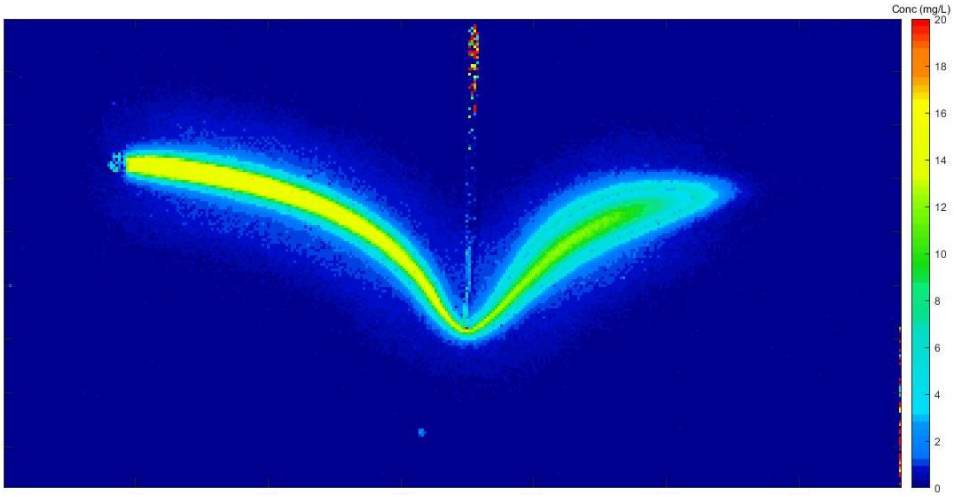

Figura 5. Penacho en el momento t = 700 s. (Ensayo de laboratorio).

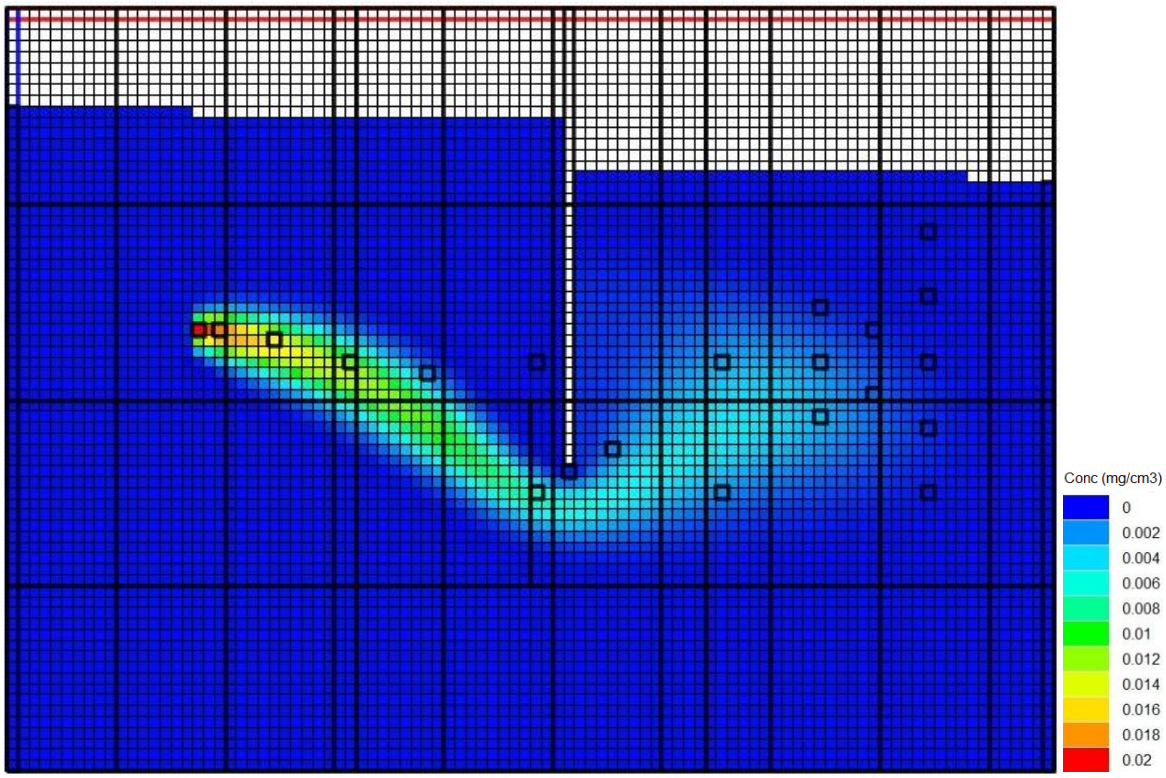

Figura 6. Penacho en el momento t = 700 s. (Modelo numérico inicial 2D).

Las figuras 7 y 8, muestran el penacho en el momento t = 900 **s** del experimento. Observando la segunda parte del penacho simulado, es decir, tras sobrepasar la barrera, se puede apreciar cómo el penacho afecta a una mayor extensión del tanque, generándose así una mayor área contaminada con respecto a la observada en laboratorio y obteniéndose un penacho muy poco definido.

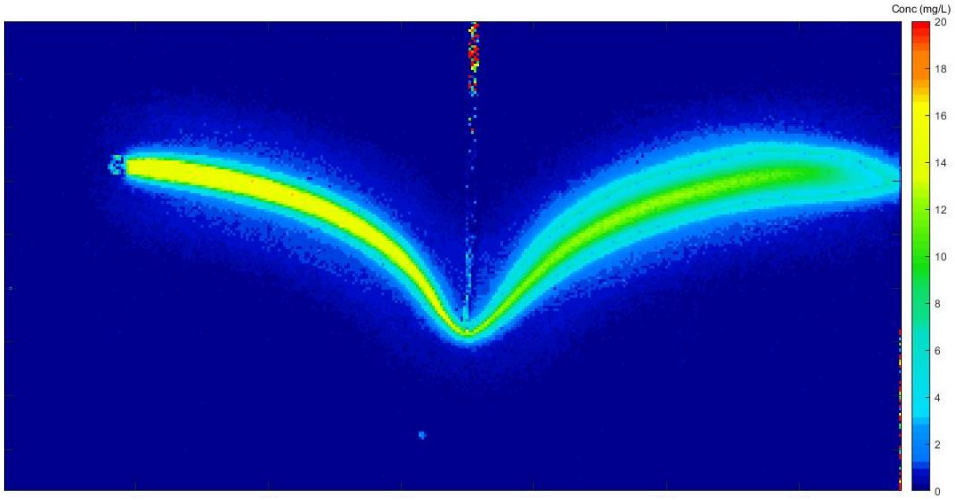

Figura 7. Penacho en el momento t = 900 s. (Ensayo de laboratorio).

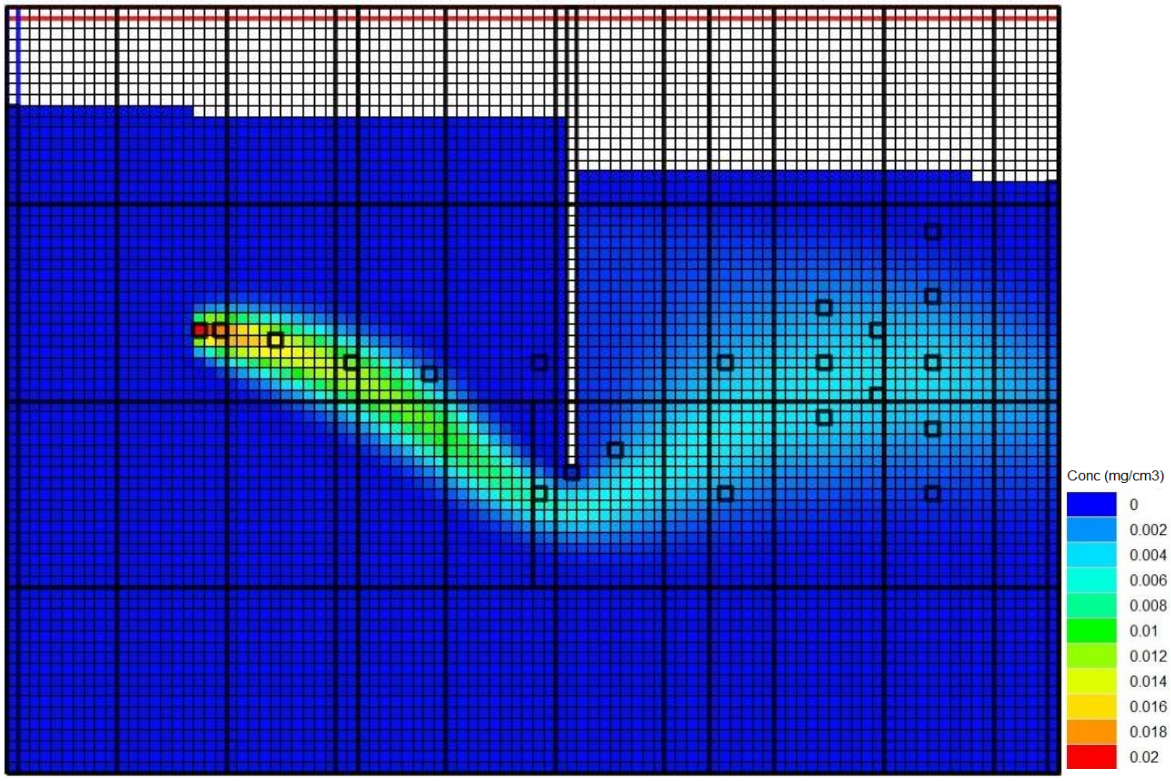

Figura 8. Penacho en el momento t = 900 s. (Modelo numérico inicial 2D).

En las Figuras 9 y 10, se observa el penacho en el momento t = 1.040 s del experimento, donde se aprecian todas las diferencias anteriormente mencionadas. El penacho generado por el modelo pasa a mayor distancia de la barrera, tanto lateralmente como por debajo de la misma. Tras superarla, el penacho simulado asciende con una menor inclinación y afecta a una mayor extensión del tanque.

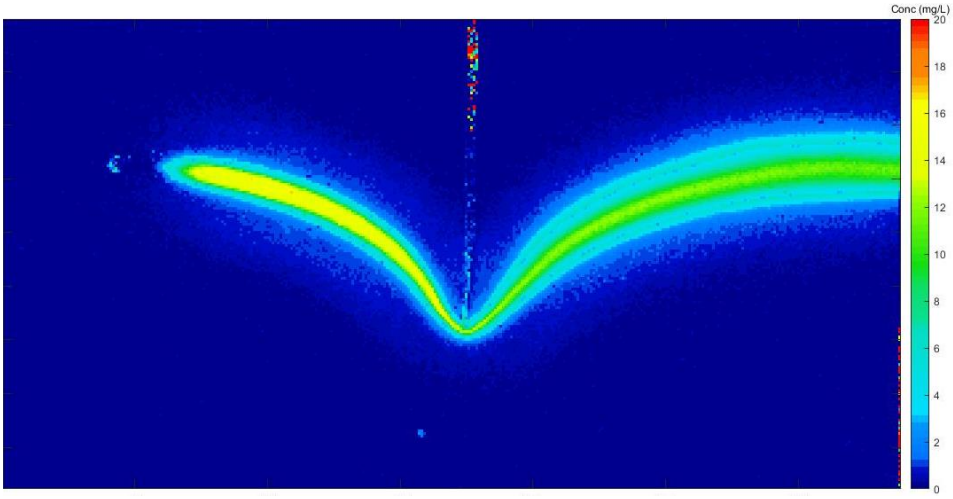

Figura 9. Penacho en el momento t = 1.040 s. (Ensayo de laboratorio).

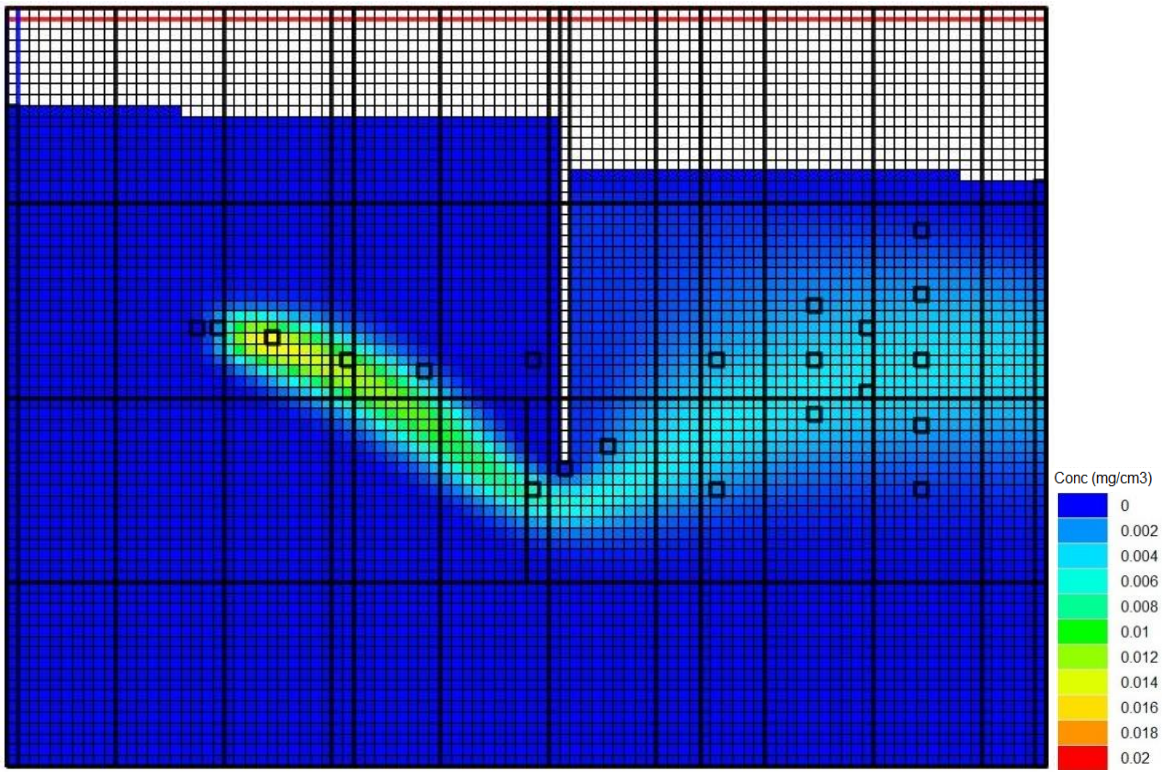

Figura 10. Penacho en el momento t = 1.040 s. (Modelo numérico inicial 2D).

Una vez finalizada la inyección del trazador en el tanque de arena, en las figuras 11 y 12 se muestra el penacho en el momento t = 1.400 s en el experimento. Debido a la dispersión del contaminante que se produce en la simulación, ambos penachos se muestran diferentes, tanto con respecto a su forma como a las concentraciones.

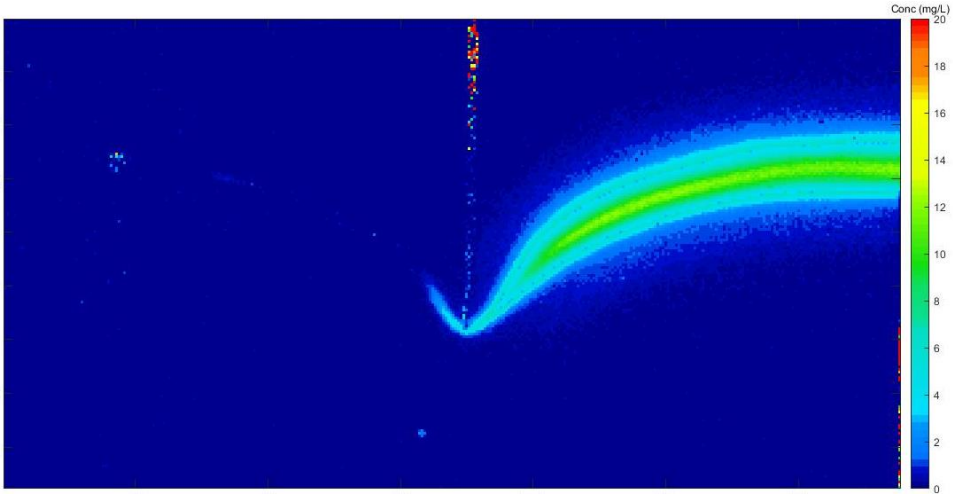

Figura 11. Penacho en el momento t = 1.400 s. (Ensayo de laboratorio).

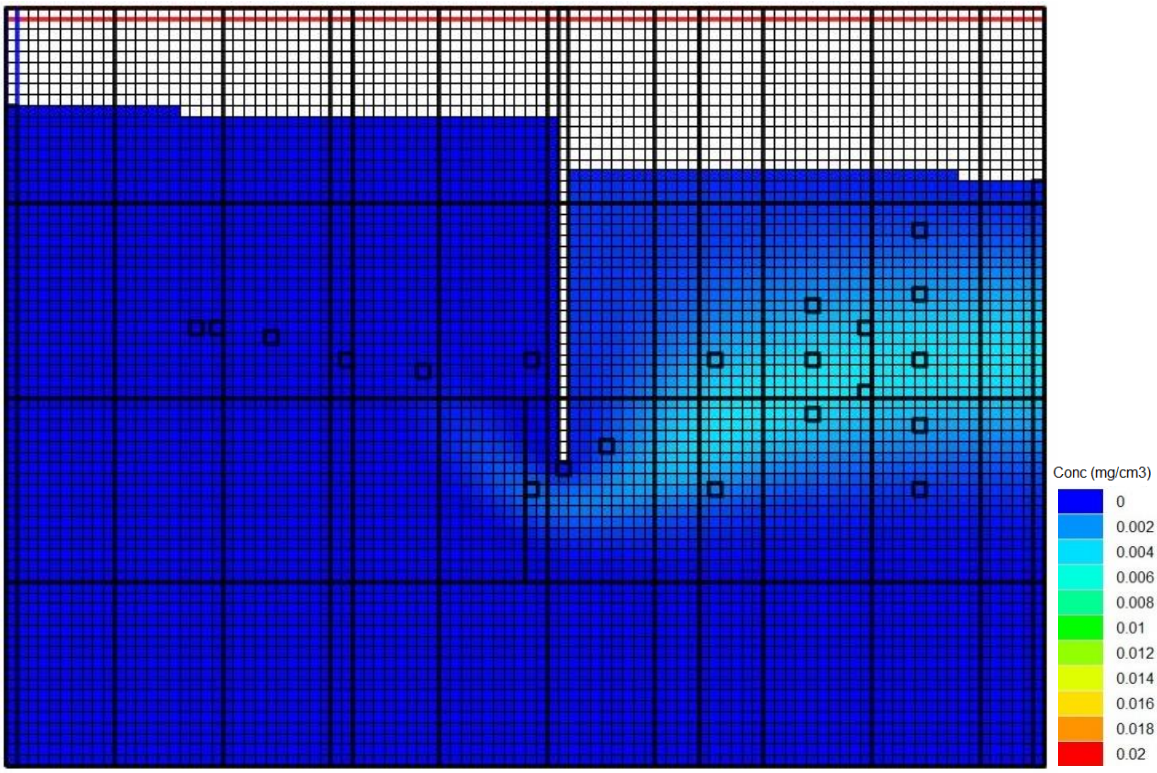

Figura 12. Penacho en el momento t = 1.400 s. (Modelo numérico inicial 2D).

En la figura 13 se muestran las gráficas de los valores observados versus valores simulados de la concentración del trazador en los 20 puntos de observación empleados en este estudio, los cuales quedan definidos en el tercer capítulo de este documento, para los tiempos analizados. Se puede observar que se da una buena aproximación entre los valores de los puntos cercanos a la fuente, como son los puntos 22 y 7, en los momentos t = 440 s, t = 540 s, t = 700 s y t = 900 s, así como en los puntos 30, 10 y 28 en los momentos t = 1.040 s y t =

1.400s. Sin embargo, en aquellos puntos incluidos con el propósito de definir correctamente la curvatura de la barrera, el paso por debajo de la barrera y la definición del penacho tras sortear el obstáculo el resultado no es el deseado.

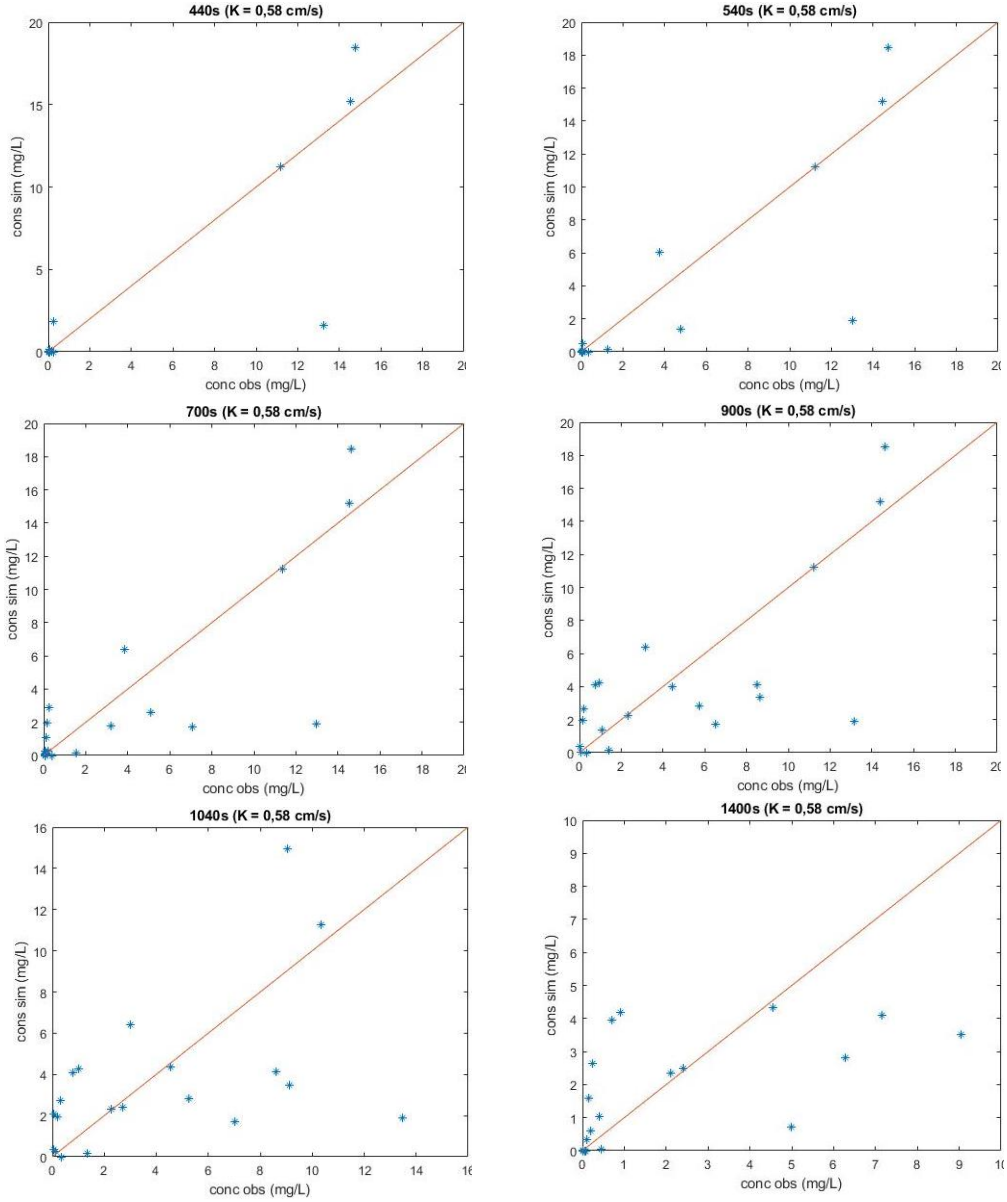

Figura 13. Gráficas concentración observada versus concentración simulada (mg/L) por el modelo inicial para los tiempo de estudio (t = 440 s, t = 540 s, t = 700 s, t = 900 s, t = 1.040 s y t = 1.400 s).

La discrepancia entre los resultados del modelo numérico y los valores observados en el laboratorio motivan este trabajo, siendo su objetivo demostrar la razón por la cual se produce. Para ello, se llevará a cabo la discusión de las siguientes hipótesis:

a) La conductividad hidráulica no es homogénea.

b) Las dispersividades no son homogéneas.

c) La tablestaca no está perfectamente sellada contra las paredes del tanque y se produce una filtración en las líneas de contacto entre la tablestaca y el tanque.

d) El transporte tiene una componente tridimensional que no quedó recogida en el modelo numérico bidimensional.

1.2. Organización del documento

La presente tesina de máster está organizada de la siguiente manera, en este primer capítulo se muestra la justificación y motivación para llevar a cabo este trabajo, mostrando la discrepancia entre el resultado del experimento en laboratorio realizado por el Departamento de Ingeniería Civil, Ambiental, Territorial y Arquitectura de la Universidad de Parma (DICAteA), Italia, y el resultado obtenido mediante su modelación matemática mediante un modelo bidimensional.

Después, el segundo capítulo recoge la descripción del equipo empleado para llevar a cabo el ensayo de laboratorio, así como una breve explicación de la técnica empleada para hallar la concentración del penacho experimental. En este capítulo también se describe el modelo numérico que se emplea en este trabajo.

En el tercer capítulo se exponen las hipótesis formuladas como causa de la pobre reproducción del penacho experimental, las cuales se basan en el estudio de la posible heterogeneidad del medio poroso del tanque de laboratorio y de otras circunstancias no consideradas en el modelo matemático inicial. Para el desarrollo de las hipótesis se decide llevar a cabo la calibración de los parámetros de flujo y transporte, conductividad hidráulica y dispersividad longitudinal, usando el software PEST, que también se describe brevemente.

Finalmente, en el cuarto capítulo se discuten las conclusiones que se han obtenido y se proponen futuros estudios a realizar.

2. Material de partida

2.1. Descripción del experimento

El estudio llevado a cabo por el Departamento de Ingeniería Civil, Ambiental, Territorial y Arquitectura de la Universidad de Parma (DICAteA), Italia, para la identificación de la posición de la fuente de un contaminante precisó de la realización de un experimento de laboratorio. Tal y como expone Citarella et al. (2015a), a la hora del estudio del transporte dispersivo de un contaminante en tanques de arena de laboratorio, el análisis mediante fotografías es una de las estrategias más empleadas. Para ello, es necesario el uso de un tanque de paredes transparentes.

Mediante el uso de cámaras de alta resolución, se obtienen imágenes en dos dimensiones del trazador sin provocar ninguna alteración en la evolución del penacho. Además, el uso del procesamiento de imágenes para el estudio del fenómeno del transporte dispersivo permite obtener la información deseada en cualquier posición dentro del plano fotografiado. Así, la información que se consigue corresponde a lo que ocurre en la cara visible del tanque. Si el experimento está bien diseñado y ejecutado, la concentración debería ser constante en la dirección ortogonal a la pared y, por lo tanto, coincide con la observada en la pared misma. Esta simplificación puede provocar errores en el estudio del transporte; sin embargo, Citarella et al. (2015a) realizaron el balance de masa, comparando la masa de trazador que se encuentra en el interior del tanque de arena calculada a partir del análisis de las fotografías con la masa introducida por la fuente en el sistema, llegando a la conclusión que la diferencia era insignificante y era válido suponer que la concentración del soluto era constante en la dirección ortogonal a la pared.

El tanque de arena empleado para el experimento se puede observar en la figura 14, este fue construido de metacrilato, con unas medidas exteriores de 1,20 m × 0,73 m × 0,14 m, siendo las medidas interiores de 0,96 m × 0,70 m × 0,10 m, con un relleno de cuentas de vidrio de diámetro 1 mm. En los laterales se colocaron dos pequeños tanques que mantienen el nivel del agua a una altura constante de 60,7 cm aguas arriba y de 53,6 cm aguas abajo (Chen et al., 2018). La barra de plástico, que ejerce el papel de tablestaca, se insertó de forma vertical en el interior del material poroso, su forma y disposición se pueden observar en la figura 15.

Figura 14. Equipo de laboratorio. (Citarella et al., 2015a).

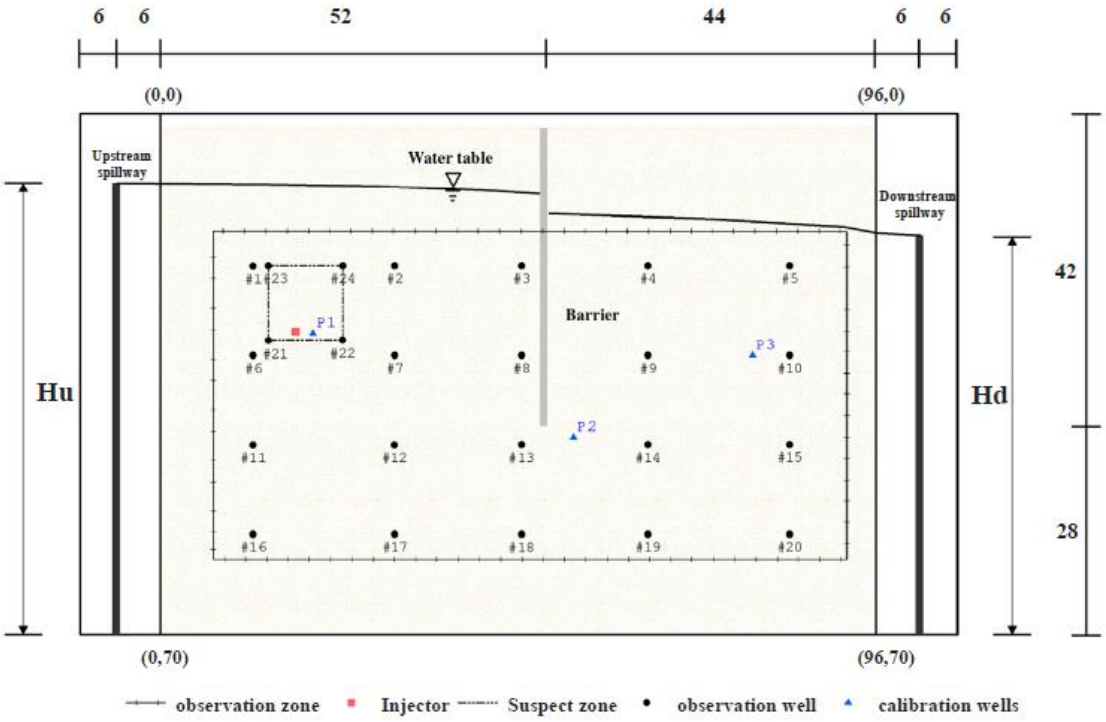

Figura 15. Esquema del experimento. El rectángulo interior corresponde al área fotografiada, donde se realiza el estudio de las concentraciones. Los puntos de calibración y observación indicados en esta imagen no son empleados en el presente trabajo. (Chen et al., 2018).

Como soluto se empleó una solución de fluoresceína de sal de sodio, ya que se trata de una substancia no tóxica y fácil de manejar, la cual al ser excitada por rayos ultravioleta o luz azul emite luz verde, cuya longitud de onda es mayor. Para introducir la solución del trazador se emplea un inyector situado tal y como muestra la figura 15 (Citarella et al., 2015a).

El equipo de laboratorio se dispuso en un cuarto oscuro, puesto que es muy importante evitar la entrada de luz exterior; para que los resultados del experimento sean óptimos, únicamente debe existir la luz de las lámparas de rayos ultravioleta. Mediante una cámara digital de alta resolución se capturó la evolución del penacho cada 5 segundos. Posteriormente, se decide emplear únicamente el área que queda dentro del rectángulo que se puede observar en la figura 15, denominado como zona de observación, pues se consideró que se trata del área más representativa del experimento y tiene unas medidas de 85 cm × 44 cm. De esta manera, se obtienen imágenes con una resolución de 3.380 × 1.750 píxeles.

El estudio del transporte mediante fotografías requiere un proceso de calibración mediante el cual se establece una relación entre la intensidad de la luminosidad del trazador con la concentración. Esta calibración se lleva a cabo realizando ocho ensayos en los que el medio poroso fue saturado con diferentes concentraciones conocidas (C= 0 mg/L; 0,5 mg/L; 5 mg/L; 10 mg/L; 20 mg/L; 25 mg/L; 30 mg/L y 35 mg/L). Después, en cada ensayo, se toman fotografías y estas son procesadas mediante un código de Matlab. Este proceso se realiza píxel a píxel, obteniéndose así una curva de calibración óptima para cada píxel, el procedimiento queda detalladamente explicado por Citarella et al., (2015a).

Finalmente, se lleva a cabo el experimento de transporte de masa, el cual se desarrolla inyectando una solución de fluoresceína de sodio con una concentración de 20 mg/L, a un caudal de 0,95 cm^3/s. El origen de la fuente de contaminación se asume conocido y se encuentra en las coordenadas x = 17,5 cm y z = 40,5 cm, tomando como origen de coordenadas la esquina inferior izquierda del tanque. En cuanto al sistema de inyección del trazador, este consiste en un cilindro de latón con 32 agujeros, que ocupa la totalidad del espesor del tanque de arena a lo largo del eje y, y la concentración se mantiene constante gracias al uso de un frasco de Mariotte. El experimento tiene una duración de 1.965 s, la introducción del trazador se realiza en el momento t = 120 s y finaliza en el momento t = 1.000 s (Chen et al., 2018). De esta manera, se obtienen 393 imágenes del penacho.

Se debe destacar que la única información recogida del experimento es el desarrollo del penacho a través de las fotografías y, por tanto, de las concentraciones del trazador; las alturas piezométricas son desconocidas.

2.2. Descripción del modelo numérico

Las principales hipótesis que se realizaron a la hora de construir el modelo numérico es que el medio poroso es homogéneo e isótropo, mientras que el flujo y el transporte se producen principalmente en el plano vertical xz (Citarella et al., 2015a; Cupola et al., 2015), de modo que se considera que las variaciones en la altura piezométrica y concentración en la dirección y son despreciables. Igualmente, en este estudio se va a considerar un modelo de sección transversal, aunque heterogéneo. Para ello, se emplea un modelo matemático bidimensional sobre el plano xz, empleando una malla de diferencias finitas con una discretización de 96 columnas (dirección x, sentido longitudinal del tanque) y 70 capas (dirección z, altura del tanque) empleando únicamente una fila por cada capa (dirección y, profundidad del tanque). Por lo tanto, el tamaño de cada celda es de $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 10, 1)$ cm.

Para la resolución de la ecuación de flujo se emplea el código MODFLOW 2005 (Harbaugh, 2005). Considerando el flujo en estado estacionario para el primer periodo de estrés, la ecuación que lo describe es

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_X \frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial h}{\partial z}\right) = 0 \,, \tag{1}$$

y para los siguientes dos periodos, donde el estado es transitorio, se utiliza

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_X \frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial h}{\partial z}\right) + W = S_S \frac{\partial h}{\partial t} \,, \tag{2}$$

siendo K_X y K_z las componentes de la conductividad hidráulica en las direcciones de los ejes x y z [L/T], h la altura piezométrica [L], W el flujo volumétrico por unidad de volumen que representa la fuente [1/T], S_S el almacenamiento específico [1/T] y t el tiempo [T].

Para la ecuación de transporte, se emplea el código MT3DMS (Zheng y Wang, 1999), utilizando los paquetes de advección y dispersión. Como el objeto de este estudio es el

análisis de la heterogeneidad del medio poroso, donde la velocidad media del flujo no será uniforme en la totalidad del tanque, la ecuación de transporte advectivo-dispersivo a resolver considerando un soluto conservativo es

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(D_X\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial C}{\partial z}\right)\right]-\left[\frac{\partial}{\partial x}(v_x C)+\frac{\partial}{\partial z}(v_z C)\right]=\frac{\partial C}{\partial t}, \qquad (3)$$

siendo D_X y D_z los coeficientes de dispersión hidrodinámica longitudinal [L^2/T], v_x la velocidad intergranular [L/T] y C la concentración [M/L^3].

Se definen tres periodos de estrés, el primero tiene una duración de 120 s, el segundo de 880 s y el tercero dura 960 s. Durante el primer periodo se persigue que el tanque funcione en estado estacionario del flujo sin entrada ni salida de soluto. El segundo periodo indica el comienzo y cese de la inyección del trazador. Y finalmente, el tercer periodo, muestra el transporte una vez se concluye la introducción de la solución de fluoresceína de sal de sodio.

Para definir correctamente el caso de estudio y obtener una solución única en la ecuación diferencial se deben establecer unas condiciones iniciales y de contorno que expresen el comportamiento del flujo y transporte en los límites del tanque. Como condición de contorno, tanto para la ecuación de flujo como para la ecuación de transporte, se emplea la denominada condición de Dirichlet, es decir, de altura piezométrica y concentración prescrita. En los extremos del tanque de arena, la altura piezométrica es conocida y constante (h = 60,7 cm sobre el límite izquierdo y h = 53,6 cm sobre el límite derecho), mientras que la concentración del trazador que es inyectada también es un dato conocido y constante por un periodo de tiempo determinado durante el experimento (C = 20 mg/L desde t = 120 s hasta t = 1000 s), en un punto específico de inyección. Además, es necesario describir una condición inicial antes de la simulación transitoria del flujo. Se considera que durante el primer periodo de estrés el flujo se encuentra en estado estacionario y las alturas piezométricas resultantes son las alturas iniciales a considerar durante el periodo transitorio siguiente. Asimismo, para la ecuación de transporte, la condición inicial se corresponde a concentración inicial igual a cero en la totalidad del tanque de arena.

Inicialmente y con anterioridad a la introducción de la tablestaca en el medio poroso, Citarella et al. (2015a) realizaron las calibraciones oportunas para definir los parámetros empleados en el modelo de flujo y transporte. La conductividad hidráulica, considerada homogénea, fue establecida previamente a la realización del experimento de transporte, mediante la calibración de la fórmula Dupuit-Forchheimer, obteniendo un valor de 0,6 cm/s.

Igualmente, Cupola et al., (2015) realizaron la calibración de la conductividad hidráulica mediante la comparación del flujo observado y el simulado, considerando que este es estacionario, resultando un valor de 0,652 cm/s. Sin embargo, una vez introducida la barrera, Citarella et al. (2015b) reestiman el valor de la conductividad hidráulica en aproximadamente 0,5 cm/s. Posteriormente, Chen et al. (2018) deciden considerar la conductividad hidráulica como incierta y siguiendo una distribución gaussiana, con un valor medio de 0,58 cm/s y una desviación estándar de 0,05 cm/s.

Citarella et al. (2015a) realizan la calibración de los parámetros de transporte empleando las curvas de llegada (tiempo versus concentración) y considerando una malla de diferencias finitas de 192 columnas, 140 capas y una única fila por cada capa, siendo el tamaño de celda $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (0{,}5;\ 10;\ 0{,}5)$ cm. Por cuestiones de tiempo computacional a la hora de realizar las calibraciones de los distintos parámetros, en este estudio se decide emplear una discretización más gruesa, lo cual afectará al valor de las dispersividades. Se trata de un parámetro que sufre el denominado efecto de escala, cuanto mayor es el tamaño de celda empleado en el modelo, mayor valor de la dispersividad es necesario para obtener un resultado que se ajuste a las mediciones (Fetter, 2008). De modo que como en este trabajo se utilizan celdas con un tamaño igual al doble que el tamaño original, se asume una dispersividad del doble del valor estimado por Citarella et al. (2015a). En la tabla 1 quedan recogidos los valores considerados en el este estudio como iniciales, a partir de los cuales se realiza su calibración.

Tabla 1. Parámetros de flujo y transporte.

Parámetro	**Valor (seleccionado para este estudio)**
Conductividad hidráulica, K	0,58 cm/s
Porosidad, ϕ	0,37
Dispersividad longitudinal, α_L	2,12 mm
Dispersividad transversal, α_T	0,82 mm

El elemento plástico insertado en el tanque que actúa como barrera ante el flujo y transporte se considera perfectamente impermeable. Este se coloca de manera vertical y transversal al flujo a una distancia de 51 cm desde el extremo izquierdo del tanque de arena, ocupando todo el espesor del mismo (10 cm), con una longitud de 42 cm.

Tanto para la resolución numérica de la ecuación flujo como para la resolución de la ecuación de transporte se emplean métodos eulerianos, que son aquellos que emplean una malla fija. Por un lado, MODFLOW 2005 está programado para resolver la ecuación de flujo mediante el método de diferencias finitas, mientras que MT3DMS permite al usuario elegir el método que desee para resolver la ecuación de transporte. En este caso, se ha decidido optar por el método TVD (*Total Variation Diminishing method* o método de variación total decreciente), que utiliza el algoritmo ULTIMATE (*Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equations*). Este método se ha utilizado en problemas donde el transporte está dominado por la advección (Zheng y Wang, 1999 y Zheng y Bennett, 2002).

Para determinar la contribución de la dispersión mecánica en el transporte del soluto se emplea el número de Peclet, el cual se define con la fórmula

$$Pe = \frac{v_x L}{D_x}\,, \tag{4}$$

siendo v_x la velocidad intergranular [L/T], L longitud característica de flujo (ancho de celda) [L] y D_x el coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal [L^2/T]. Para valores pequeños, por debajo de la la unidad, predomina la dispersión mecánica, mientras que para valores mayores, predomina la advección (Cupola, 2016 y Fetter, 2008). En este caso se obtiene un valor de 4,72 indicativo de una preponderancia de la componente advectiva sobre la dispersiva. Por tanto, este método es adecuado, y además, reduce los problemas por oscilación y dispersión numérica (Zheng & Bennett, 2002).

La figura 16 (los colores muestran el tiempo que tarda cada partícula en alcanzar una posición, los colores cálidos representan un mayor tiempo y, por tanto, los colores fríos, un menor tiempo) muestra el resultado obtenido al ejecutar MODPATH (Pollock, 2017), considerando un grupo de 10 partículas que se introducen en el sistema por la fuente, emulando así al trazador del experimento. MODPATH es un código que emplea las alturas piezométricas calculadas por MODFLOW 2005 para resolver el método de rastreo de partículas (*particle tracking method*). De modo que se obtienen las trayectorias que dichas partículas tomarán teniendo en cuenta la distribución de la velocidad media del flujo, resultando así el penacho generado únicamente por la componente advectiva del transporte (Pollock, 2016).

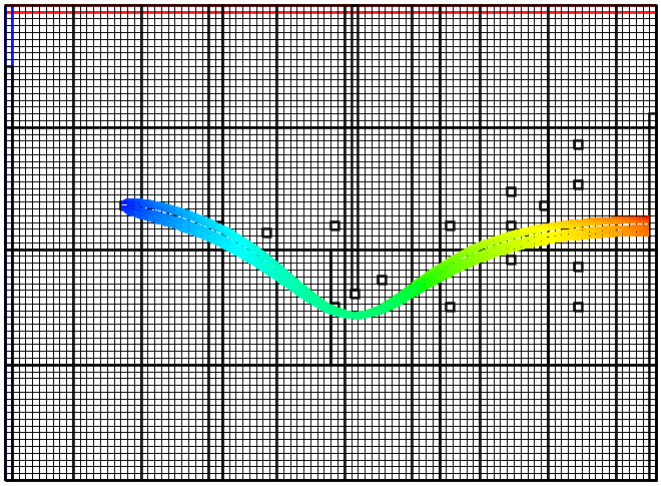

Figura 16. Penacho simulado considerando únicamente el transporte convectivo (modelo inicial).

3. Discusión de las hipótesis

Con la finalidad de encontrar la causa que provoca la discrepancia entre el penacho observado durante el experimento en el laboratorio del Departamento de Ingeniería Civil, Ambiental, Territorial y Arquitectura de la Universidad de Parma (DICAteA), Italia, y el penacho generado por medio de un modelo numérico se lleva a cabo el estudio de las siguientes hipótesis.

Considerando los diferentes artículos relacionados con dicho experimento, se hace notable la dificultad que existe a la hora de asignar un valor a la conductividad hidráulica. Inicialmente, y con anterioridad a la introducción de la tablestaca, Citarella, et al. (2015a), así como Cupola et al., (2015) emplearon el valor de 0,6 cm/s y 0,652 cm/s, respectivamente. Después, y ya con la tablestaca introducida en el tanque de arena, Citarella et al. (2015b) emplearon el valor de 0,5 cm/s, mientras que Chen et al. (2018) decidieron utilizar el valor de 0,58 cm/s. Debido a esta discordia, se decide calibrar el valor de la conductividad hidráulica, considerando, la posibilidad de que varíe espacialmente.

Por otro lado, se observó que el penacho generado matemáticamente, principalmente tras superar la barrera, muestra una mayor área afectada por el trazador, lo cual puede deberse a una incorrecta estimación del valor de la dispersividad. De modo que como segunda hipótesis, se estudia la posible heterogeneidad de las dispersividades.

Además, entre ambos penachos se observa otra considerable diferencia. El modelo numérico no es capaz de reproducir fielmente el paso del penacho por debajo de la tablestaca, lo cual se estima que puede deberse a que la tablestaca presente una estanqueidad deficiente. Esta se ha definido como perfectamente impermeable, lo cual implica que a través de ella no se produce flujo. No obstante, puede que los extremos de la misma no se ajusten completamente a las paredes del tanque de arena, produciéndose así un pequeño flujo, el cual alteraría el resultado del modelo numérico. De forma que en la tercera hipótesis se estudia la posible filtración del agua a través de la tablestaca y las paredes del tanque de arena.

Finalmente, se realiza un modelo tridimensional del experimento, para así analizar la hipótesis de que la existencia de la componente del transporte en el plano xy (a lo ancho del tanque de arena) tenga relevancia.

3.1. Software PEST

Para el estudio de las anteriores hipótesis se plantea realizar la calibración de los diferentes parámetros de flujo y transporte mediante el software de estimación de parámetros PEST (Doherty, 2018), el cual funciona de forma independiente pero acoplado a los modelos de flujo y transporte, interactuando con los archivos de entrada y salida de dichos modelos. Llevar a cabo este análisis supone realizar un cálculo inverso, pues se deben calibrar los distintos parámetros para obtener una mejor reproducción de la variable de estado conocida, que es la concentración del trazador. PEST calibra los valores de los parámetros mediante un procedimiento de optimización que persigue, como función objetivo, la reducción de la discrepancia entre los valores predichos por el modelo de transporte y los valores observados de la concentración de soluto en el experimento de laboratorio.

Es necesaria la elaboración de tres tipos de archivos para hacer uso del software PEST, los cuales se denominan como archivo plantilla (*template file*), archivo de instrucciones (*instruction file*) y archivo de control (*control file*).

Los archivos plantilla son aquellos que se emplean para leer y escribir sobre los archivos de entrada de los modelos de flujo y transporte que contienen los parámetros que se desean calibrar, en este caso, la conductividad hidráulica (archivo con extensión ".pval) y la dispersividad longitudinal (archivo con extensión ".dsp"). Los archivos plantilla tienen la extensión ".tpl" y su contenido debe ser igual al de los archivos de entrada del modelo, únicamente modificando la primera línea y los caracteres que determinan el valor de cada parámetro por el denominado "espacio del parámetro". En la primera línea se debe escribir "ptf" seguido del carácter escogido como "delimitador del parámetro". El espacio del parámetro incluye un par de delimitadores del parámetro, uno al comienzo y otro al final de dicho espacio, y dentro del mismo espacio se escribe una identificación o nombre para el parámetro que se va a calibrar.

Como se explica más delante en este capítulo, para el estudio de la heterogeneidad del medio poroso, se realiza una subdivisión del dominio del modelo de flujo y transporte de aguas subterráneas para así determinar zonas de diferente conductividad hidráulica y dispersividad. Cada una de las zonas definidas se considera homogénea, así se reduce el número de parámetros a estimar. Dicha división no se realiza basándose en ningún criterio más que el de emplear una zonificación más o menos regular, con una mayor discretización

en las zonas más conflictivas, entendiéndose estas como aquellas donde se produce mayor discrepancia entre el resultado del ensayo experimental y el modelo numérico. A cada una de ellas se le otorga una identificación única, así PEST puede reconocer la zonificación realizada en los modelos y estimar un valor del parámetro estudiado para cada una de ellas. Cuando se ejecuta PEST, este software escribe, basándose en el archivo de plantilla, sobre el archivo de entrada del modelo los valores del parámetro que ha estimado. Como ambos archivos tienen el mismo formato, los modelos de flujo y transporte son capaces de leer correctamente el archivo de entrada que ha sido generado por PEST (Doherty, 2018).

El archivo de instrucciones es aquel que permite a PEST leer el archivo de salida generado por el modelo para así poder comparar los resultados de la simulación con las mediciones de campo u observaciones de laboratorio, y postular nuevos valores de los parámetros con la finalidad de reducir la diferencia entre observaciones y predicciones. Es preciso redactar un archivo de instrucciones por cada archivo de salida del modelo que contenga el tipo de observaciones que se necesiten. En este caso, solo es necesario un archivo de instrucciones, pues tan solo se dispone de un tipo de mediciones, que son las concentraciones obtenidas mediante las fotografías en laboratorio. Este archivo de instrucciones debe permitir a PEST leer el archivo en el que se recogen las observaciones de la concentración del trazador generado por MT3DMS (archivo con extensión ".mto"), ya que debe comparar estos valores con las mediciones de laboratorio. El archivo de instrucciones tiene la extensión ".ins" y debe contener, tal y como su nombre indica, una serie de instrucciones que permitan a PEST leer la información precisa del archivo de salida del modelo de transporte. Se debe indicar en que fila del archivo se encuentra la información a recuperar y qué columnas ocupa cada una de las observaciones de la concentración. Además, a cada una de las observaciones se le debe otorgar una identificación única (Doherty, 2018).

Para realizar este estudio, se definieron 20 puntos de observación, distribuidos sobre el área afectada por el penacho y con mayor densidad tras la barrera, pues la discrepancia entre la realidad observada en laboratorio y la simulación numérica es mayor allí. La disposición de dichos puntos de observación se recoge en la figura 17, así como la numeración de los mismos. Por otro lado, la cantidad de observaciones que se indican en el archivo de instrucciones tiene que ser exactamente la misma cantidad de mediciones de laboratorio que se vaya a emplear. Aquí, se utilizaron 1.419 mediciones, realizadas en las coordenadas de los puntos de observación de la figura 17, cada 20 s, desde el momento t = 140 s hasta el momento t = 1.860 s.

Finalmente, se debe redactar el archivo de control de PEST. Dependiendo del tipo de modelo inverso que se desee construir, se pueden necesitar varios archivos plantilla o varios archivos de instrucciones, según los parámetros a estimar y las observaciones a contrastar, mientras que el archivo de control siempre será único. Su extensión es ".pst" y en él se recoge la información específica relativa a la calibración que PEST necesita para funcionar (Doherty, 2018).

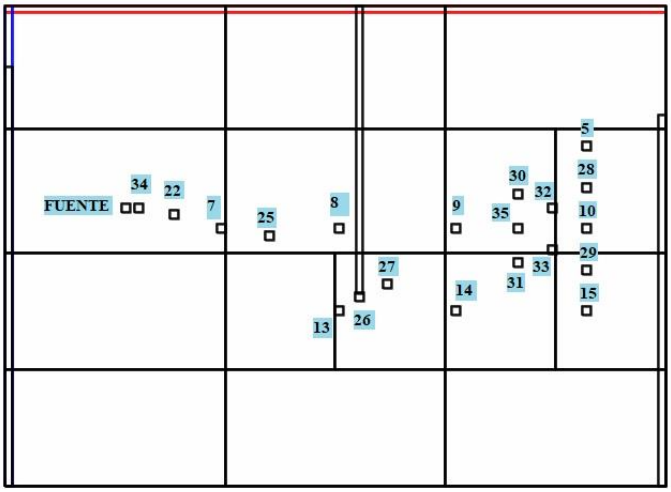

Figura 17. Distribución de los puntos de observación de la concentración del trazador en el tanque de arena.

En el archivo de control se especifica el modo en el que se desea que opere PEST, en este caso, se indica que la optimización utilizará la regularización de Tikhonov. El uso de este tipo de regularización matemática permite encontrar el valor de los parámetros con el que se reproduzca fielmente las mediciones de laboratorio evitando que se produzca el fenómeno de sobreajuste del modelo, ya que además de las mediciones en laboratorio, se incluyen las denominadas "observaciones de regularización", que es información sobre los propios parámetros a ajustar. Se trata del llamado "conocimiento experto", el cual en este caso son valores preferentes para los parámetros a calibrar y de los cuáles no debería de departir demasiado los parámetros calibrados finales.

El archivo PEST se divide en secciones, una de ellas es la sección de los parámetros donde se especifica el valor preferente de cada parámetro y sus límites superior e inferior, a respetar durante la calibración, PEST se limita a este margen establecido para la búsqueda del valor óptimo. Cada parámetro debe incluir la misma identificación que en el archivo de plantilla, para que PEST pueda reconocer cada zona del modelo. Durante la optimización para el cálculo de gradientes, se decide que se realice empleando, inicialmente, el método de diferencias finitas hacia delante y cuando "la reducción relativa de la función objetivo entre

iteraciones sea menor" a 0,1, se pase a utilizar el método de diferencias finitas de esquema centrado (Doherty, 2018, p.91). Así, se consigue ahorrar tiempo computacional, hasta el momento donde la precisión es fundamental para obtener una mayor mejora de la función objetivo. El incremento empleado para este cálculo se define como 0,01 veces el valor actual de cada parámetro.

Otra de las secciones del archivo de control es la de las observaciones, que se refiere a las mediciones de laboratorio. En esta, se escriben las 1.419 mediciones de la concentración del trazador. Cada una de estas mediciones debe incluir una identificación única, la cual debe ser igual a la identificación empleada en el archivo de instrucciones. De esta manera, PEST es capaz de reconocer para cada medición el valor que el modelo de transporte calcula y realizar la comparación entre ambas. A cada observación (medición de laboratorio) se le debe otorgar un peso, el cual se asigna considerando el error en la medición de cada uno. Se decide comenzar con el mismo peso para todas ellas, entendiendo que todas poseen el mismo grado de incertidumbre. Sin embargo, como se explica más adelante en este capítulo, se observa que ciertas observaciones distan bastante de los valores simulados y se considera que dicha desviación es debida a un error de medida alto, por lo que se decide otorgarles un menor peso. Aunque se dispone de información sobre las concentraciones en todo el tanque en intervalos de 20 s, se ha decidido utilizar solo un número selecto de puntos de observación por dos razones, la primera de tipo computacional, y la segunda, porque este esquema se asemejaría al que se usaría en una campaña de campo en un acuífero real.

Además, está la sección de información previa, la cual recoge el conocimiento experto sobre los parámetros. PEST intentará modificar los parámetros del modelo para ajustar las concentraciones observadas, pero penalizará la desviación de los parámetros ajustados con los valores establecidos por el experto como mejores estimadores 'a priori'. El tipo de información experta puede expresarse como valores puntuales o valores promedio de ciertas zonas, así como relaciones espaciales entre los parámetros. En este caso, se ha decidido establecer unos valores probables para cada zona que son los que se usan como valores iniciales en el proceso de optimización y que se recogen en la tabla 1. Aunque se puede ponderar la penalización por la desviación de los parámetros ajustados con respecto a los parámetros 'a priori', se decide usar el mismo peso para todos los parámetros.

Tal y como expone Doherty (2015), PEST realiza un proceso iterativo en la búsqueda de los valores óptimos para los parámetros a estudiar. La función objetivo de mínimos cuadrados

ponderados a minimizar tiene dos componentes, una que mide la desviación entre las predicciones del modelo y los valores observados,

$$\Phi_m = \sum_{i=1}^{n} (w_{m_i} r_{m_i})^2 \ , \tag{5}$$

siendo w_m el peso designado a cada medición de laboratorio (denominada como observación en los archivos de PEST), r_m el residual, diferencia entre la medición de laboratorio y la predicción del modelo numérico [M/L^3] y n es el número de observaciones; y la otra que mide la desviación entre los valores de los parámetros ajustados y los valores de los parámetros dados como valor propuesto 'a priori' en base a conocimiento experto

$$\Phi_r = \sum_{i=1}^{n} (w_{r_i} r_{r_i})^2 \ , \tag{6}$$

siendo w_r el peso asociado a cada ecuación de información previa, r_r el residual, diferencia entre el valor del parámetro optimizado y su valor preferente y n es el número de observaciones.

Ambas componentes deben de ser combinadas usando un factor de ponderación adicional que controlará si queremos que en la minimización prepondere la reproducción de las observaciones o la preservación de los valores 'a priori'.

Además, de los tres tipos de archivos de PEST, se precisa de un archivo batch, en el cual se indica la secuencia de comandos a ejecutar para realizar una predicción de las concentraciones con los programas MODFLOW 2005 y MT3DMS.

3.2. Heterogeneidad de la conductividad hidráulica

La conductividad hidráulica es el parámetro más relevante tanto para el flujo como para el transporte en el estudio de aguas subterráneas, ya que define tanto el medio poroso como el fluido que se mueve a través de él (Zheng & Bennett, 2002), por lo que se considera que su heterogeneidad podría ser la causa de las discrepancias observadas que motivan este trabajo.

El uso de un valor homogéneo para la conductividad hidráulica en todo el tanque simplifica el modelo; sin embargo, para reproducir fielmente el transporte puede resultar

insuficiente. Cuanto mayor conocimiento del campo de conductividad hidráulica se obtenga, más certero será el campo de velocidades y, por lo tanto, el penacho simulado, ya que el transporte advectivo o convectivo está condicionado por la velocidad real del flujo o velocidad intergranular

$$v_x = -\frac{K}{\phi_e}\frac{dh}{dx}\,, \tag{7}$$

siendo K la conductividad hidráulica [L/T], ϕ_e la porosidad efectiva [-] y $\frac{dh}{dx}$ el gradiente hidráulico [-]. El flujo advectivo, por unidad de área, es

$$F_x^{mec} = v_x \phi_e C\,, \tag{8}$$

siendo v_x la velocidad intergranular [L/T], ϕ_e la porosidad efectiva [-] y C la concentración del trazador [M/L^3].

Se plantea como hipótesis el hecho que se trate de un medio poroso heterogéneo por una posible distribución desigual de las cuentas de vidrio que conforman el relleno del tanque de arena de laboratorio, ya sea bien por la acción de llenado, durante el cual la parte inferior queda más compactada, o por la introducción de la barrera que modificaría la distribución de dichas cuentas, alterando la conductividad hidráulica. Para ello, se decide establecer una distribución en zonas, cada una de ellas caracterizada con un único valor de la conductividad hidráulica. Se divide la malla en 15 zonas, siendo esta discretización más densa en las zonas donde se dan las mayores discrepancias entre el penacho experimental y el simulado, tal y como se muestra en la figura 18.

Siguiendo las recomendaciones de Doherty (2015 y 2018) se decide que la calibración de la conductividad hidráulica se realice transformando logarítmicamente su valor antes de comenzar el proceso de estimación, ya que de esta manera se consigue reducir el rango de variabilidad del parámetro (que para la conductividad hidráulica puede ser de varios órdenes de magnitud). En ocasiones la relación de la función objetivo y el parámetro a calibrar es más próxima a ser una relación lineal cuando se usan logaritmos. La transformación logarítmica también asegura que el parámetro nunca tome valores negativos. Asimismo, se incluye límites, entre los cuales PEST realiza los cálculos iterativos hasta dar con la combinación óptima de la conductividad hidráulica, se consideran como un 50 % más y un 50 % menos que su valor inicial.

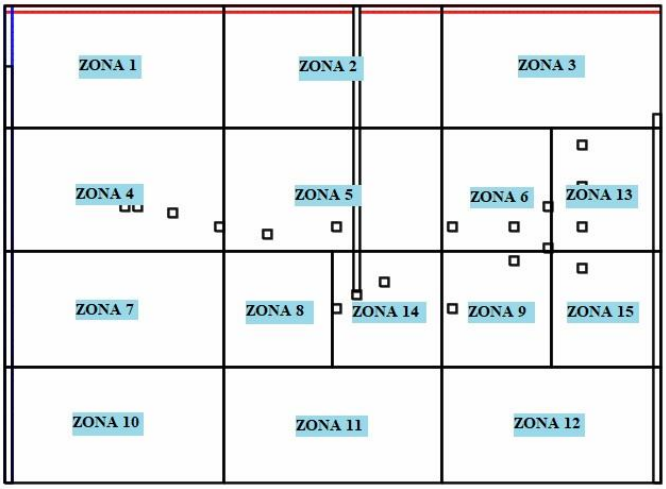

Figura 18. Discretización espacial de la distribución de las zonas de distinta conductividad hidráulica.

Tras realizar la calibración se obtienen los valores de la conductividad hidráulica que quedan recogidos en la tabla 2 y en la figura 19. Los valores calibrados de la conductividad hidráulica muestran una varianza de 0,007 $(cm/s)^2$, con un valor de 0,586 cm/s de media geométrica y un valor de 0,581 cm/s para la mediana. El valor mínimo de 0,461 cm/s se da en la zona 1, mientras que el valor máximo de 0,738 cm/s se da en la zona 5. Se podría inferir que la introducción de la tablestaca produce la modificación de la configuración de las cuentas que conforman el medio poroso, creando junto a ella zonas con diferente grado de compactación y por tanto, con diferente valor de la conductividad hidráulica. Por otro lado, cabe destacar que las zonas de la parte superior e inferior resultan difíciles de estimar de manera certera, ya que no se dispone de puntos de observación para la calibración de los parámetros en estas zonas.

Tabla 2. Valores de la conductividad hidráulica tras su calibración (con todos los puntos de observación).

Zona	**Conductividad hidráulica, *K* (cm/s)**	**Zona**	**Conductividad hidráulica, *K* (cm/s)**
1	0,461	9	0,567
2	0,581	10	0,695
3	0,589	11	0,509
4	0,478	12	0,512
5	0,738	13	0,626
6	0,627	14	0,617
7	0,722	15	0,568
8	0,501		

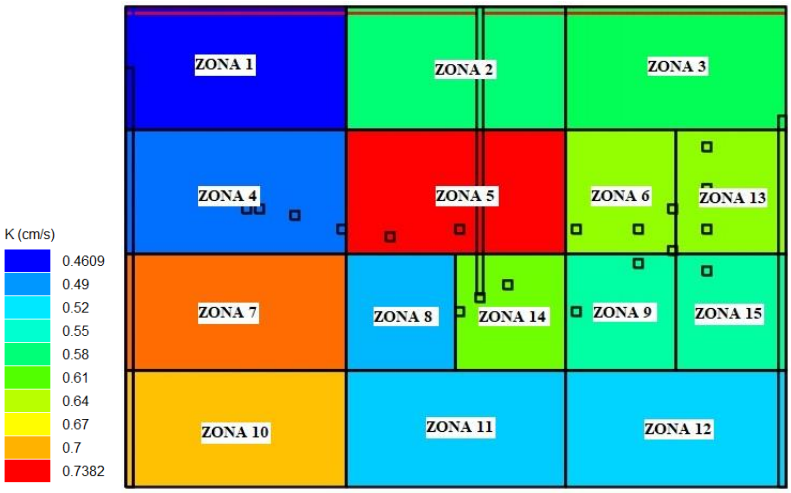

Figura 19. Distribución de la conductividad hidráulica tras su calibración (con todos los puntos de observación).

Las figuras 21 a 26 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para distintos pasos de tiempo. Se puede apreciar una notable mejora al comparar estos resultados con el penacho generado considerando un medio poroso homogéneo. Aun así, continúan los errores comentados anteriormente en el capítulo 1.

Se aprecia una gran diferencia entre las concentraciones simuladas y las observadas en las proximidades al punto de inyección del trazador, como ocurre con los puntos de observación 34, 22 y 7, donde la concentración simulada es aproximadamente de media un 29,9 %, 31 % y 28,57 % superior a las observaciones, respectivamente. Este hecho puede deberse a la formulación empleada para el cálculo de las concentraciones por medio del análisis de fotografías, pues como expone Cupola et al. (2015) se emplea la velocidad media del flujo específico

$$q = K\frac{dh}{dx}, \tag{9}$$

siendo K la conductividad hidráulica [L/T] y $\frac{dh}{dx}$ el gradiente hidráulico [-]. Sin embargo, la velocidad en esta zona del tanque de arena será mayor a dicho valor, ya que se verá influenciada por el flujo puntual de inyección de la solución de fluoresceína de sodio. Además, se asume la hipótesis de trazador inerte, que no afecta a las propiedades del agua que inicialmente se encuentra en el medio poroso. No obstante, la viscosidad y densidad de la solución de fluoresceína de sodio puede provocar la modificación del valor de la conductividad hidráulica, sobre todo en las proximidades de la fuente donde la concentración

es mayor. Por ello, se decide reasignar un menor peso a las observaciones correspondientes a estos puntos de observación.

Por otro lado, se mejora la curvatura inicial que adopta el penacho. El punto de observación 25 mejora su valor simulado con respecto al modelo homogéneo, aunque la concentración simulada sigue siendo muy baja, aproximadamente un 44,69 % inferior en el primer tiempo estudiado (figura 21). Más avanzado el experimento, mejora en gran medida, aumentado la concentración simulada, aunque aún queda por debajo de la medición en un 20,31 % de media.

Además, la figura 20 muestra la componente convectiva del transporte para este conjunto de conductividades, con la cual se verifica lo anteriormente expuesto. Se mejora la curvatura inicial y la forma del penacho se asemeja a la experimental, pues las trayectorias pasan por el punto 25.

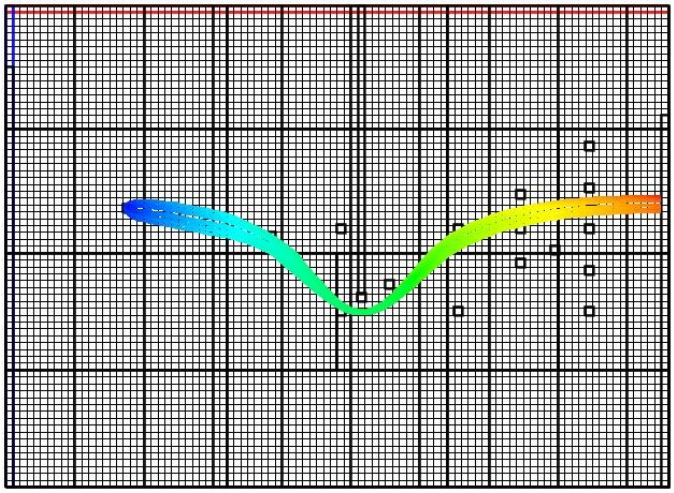

Figura 20. Penacho simulado considerando únicamente el transporte convectivo (1ª calibración de K, con todos los puntos de observación).

De forma general, el paso por la barrera muestra una mejora, aunque sigue produciéndose a una mayor profundidad y el giro al sortear la tablestaca no es tan marcado, pues en el penacho experimental se observa que pasa por el punto 27, lo cual no se ha logrado mediante la simulación. En el paso de tiempo t = 540 s, figura 23, el punto 13 muestra un ajuste perfecto, mientras que en los momentos posteriores indica una concentración un 76,8 % superior de media, siendo muy notable en el momento t = 1.400 s, figura 26. Los puntos 26 y 27, por otro lado, indican una concentración simulada inferior a la observada, un 40,21 % y un 39,36 % de media.

El giro tras la tablestaca simulado no es tan pronunciado como el observado, de modo que el penacho simulado no alcanza la posición adecuada y se sigue dando una concentración alta en el punto 14 y baja en el punto 9. Asimismo, se aprecia una gran dispersión en la zona tras la barrera, el penacho sigue afectando una gran área, como se observa en las figuras 25, 26 y 27.

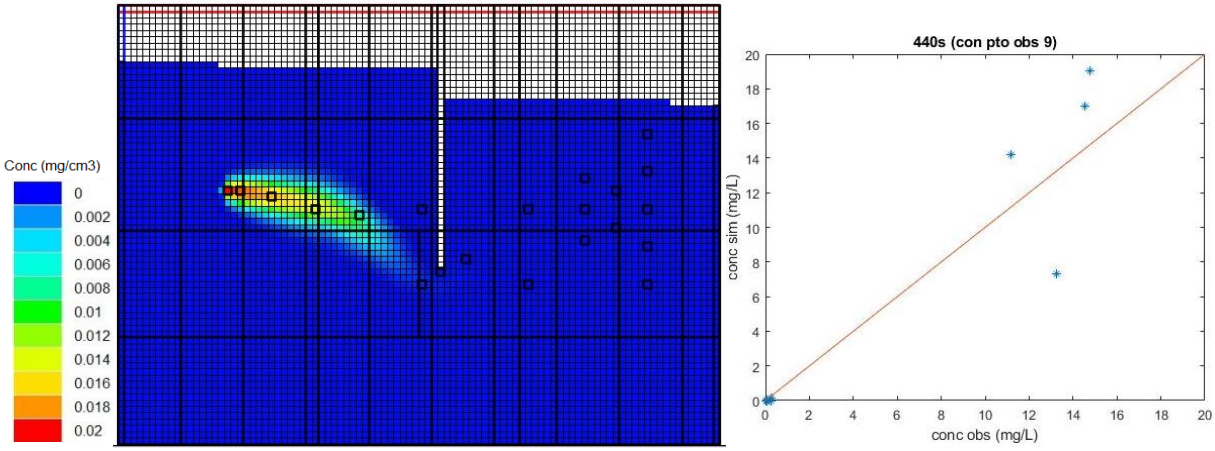

Figura 21. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de *K*). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

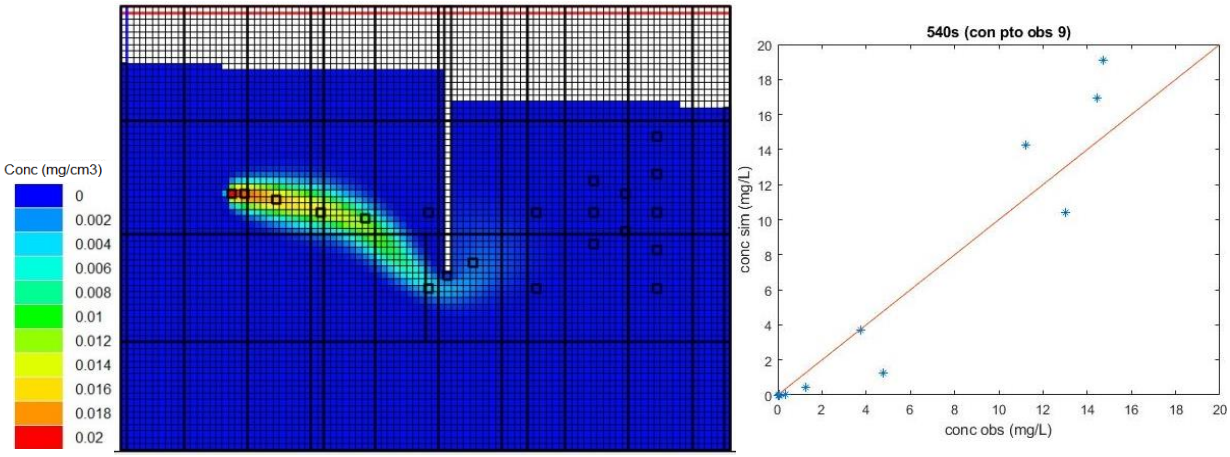

Figura 22. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de *K*). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

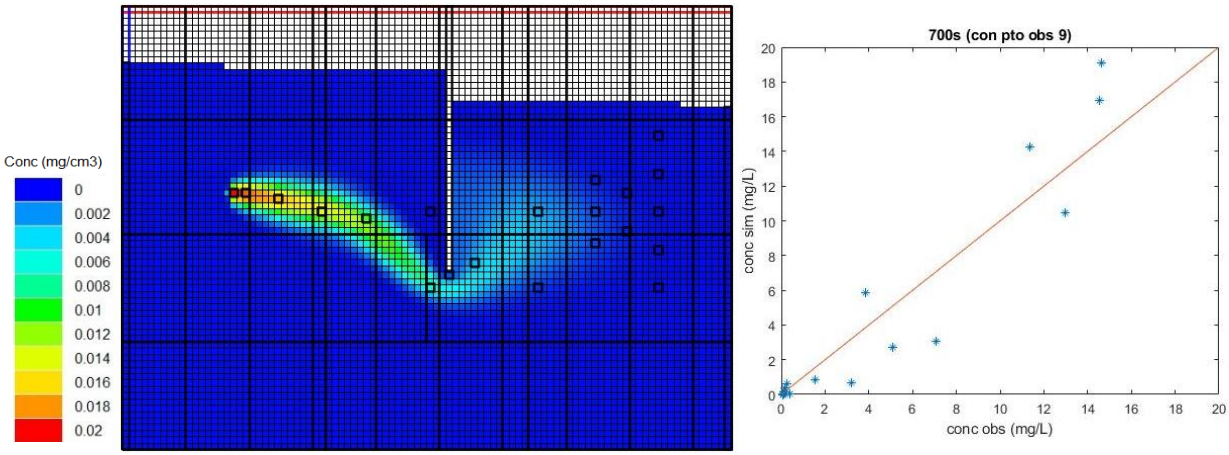

Figura 23. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

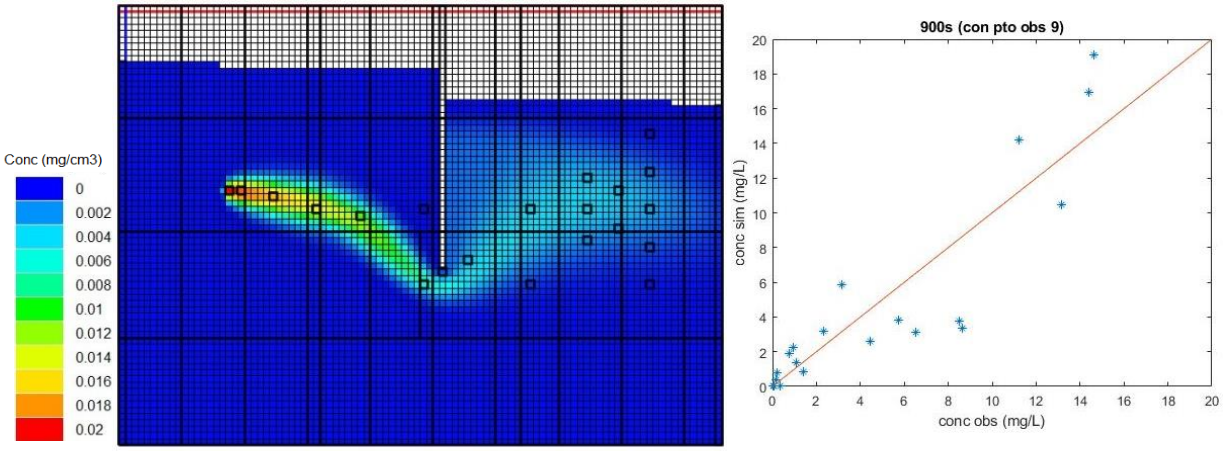

Figura 24. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

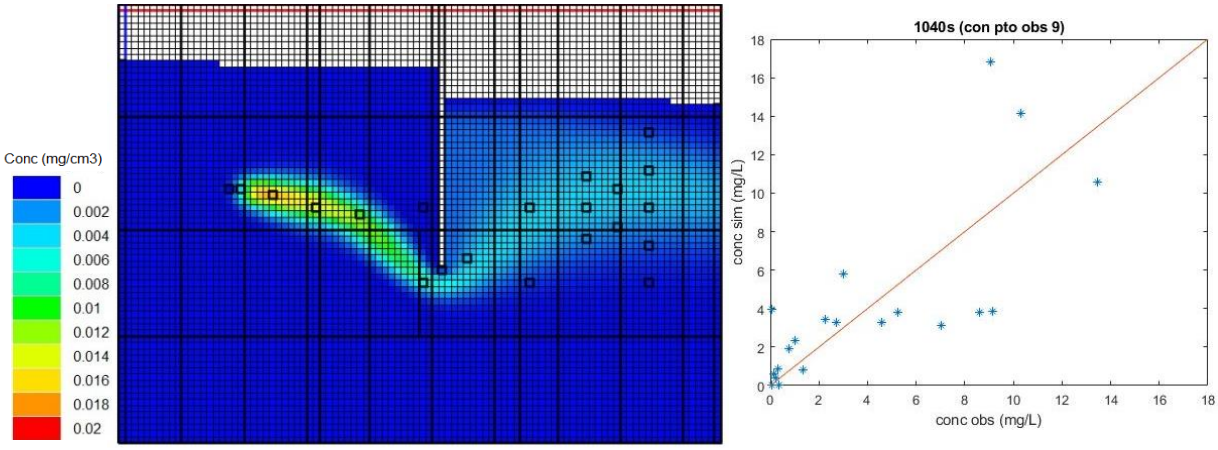

Figura 25. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de K). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

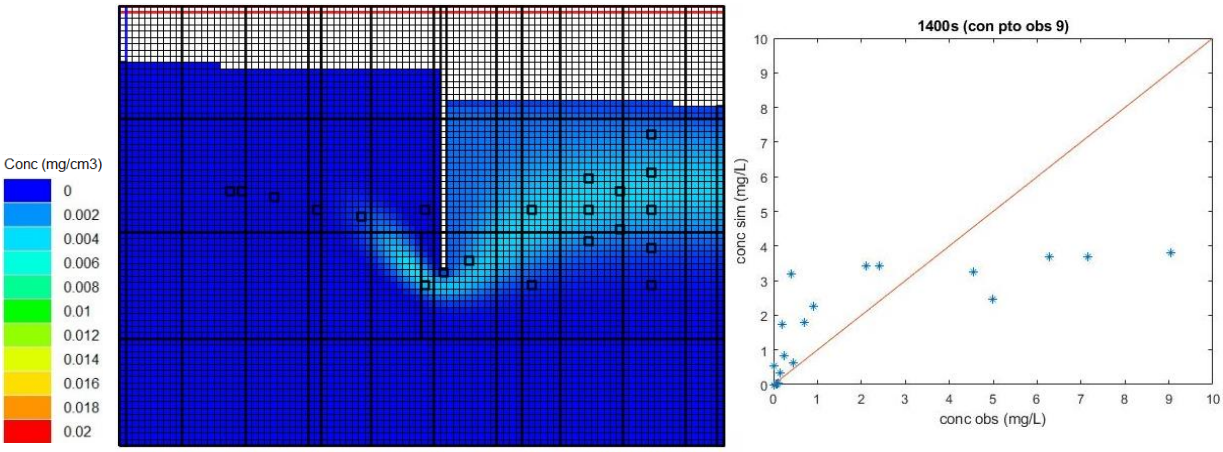

Figura 26. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de *K*). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

La tabla 3 recoge los siguientes indicadores que comparan las concentraciones observadas con las simuladas: error medio (ME), error medio absoluto (MAE), raíz del error cuadrático medio (RMSE) y coeficiente de determinación (R^2) (Anderson y Woessner, 1992), tanto para el modelo homogéneo inicial como para el modelo con los valores obtenidos en la primera calibración de la conductividad hidráulica. Se reafirma la relevancia de una correcta caracterización del campo de conductividad hidráulica para una reproducción fiel de la realidad, ya que modificando dicho parámetro se logra un resultado muy favorable, incluso para los tiempos t = 1.040 s y t =1.400 s, en los se logra pasar de un ajuste muy deficiente a un ajuste aceptable.

Tabla 3. Análisis de la 1ª calibración de la conductividad hidráulica y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	1ª calibración de *K*	0,913	-0,143	0,831	1,854
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,197	2,804
	1ª calibración de *K*	0,942	-0,096	1,243	1,652
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	1ª calibración de *K*	0,910	0,028	1,265	1,913
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	1ª calibración de *K*	0,806	0,187	1,899	2,492

1.040 s	**Inicial**	0,248	0,409	2,745	3,895
	1ª calibración de *K*	0,568	-0,159	2,214	3,023
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	1ª calibración de *K*	0,593	0,238	1,297	1,881

Por otro lado, en el estudio realizado por Chen et al. (2018), se percataron que el pozo nº 9 no reproducía resultados satisfactorios, por lo que estimaron que debía deberse a algún error en los parámetros del modelo o a una observación deficiente. Por consiguiente, decidieron eliminar dicho pozo y volver a ejecutar el modelo, obteniéndose así un resultado más favorable.

Teniendo en consideración lo expuesto por Chen et al. (2018) se decide prescindir del pozo nº 9 y volver a realizar la calibración de la conductividad hidráulica, el resultado obtenido queda recogido en la tabla 4 y en la figura 27. De esta manera, se obtiene un campo de conductividad hidráulica mucho más homogéneo, dando como valor máximo 0,589 en la zona 4 y 0,549 en la zona 14. En este caso la varianza en 0,0001 $(cm/s)^2$, la media geométrica es 0,579 cm/s y la mediana 0,58 cm/s.

Tabla 4. Valores de la conductividad hidráulica tras su calibración (sin punto de observación 9).

Zona	**Conductividad hidráulica, *K* (cm/s)**	**Zona**	**Conductividad hidráulica, *K* (cm/s)**
1	0,581	9	0,577
2	0,580	10	0,580
3	0,580	11	0,573
4	0,589	12	0,573
5	0,588	13	0,587
6	0,587	14	0,549
7	0,581	15	0,586
8	0,574		

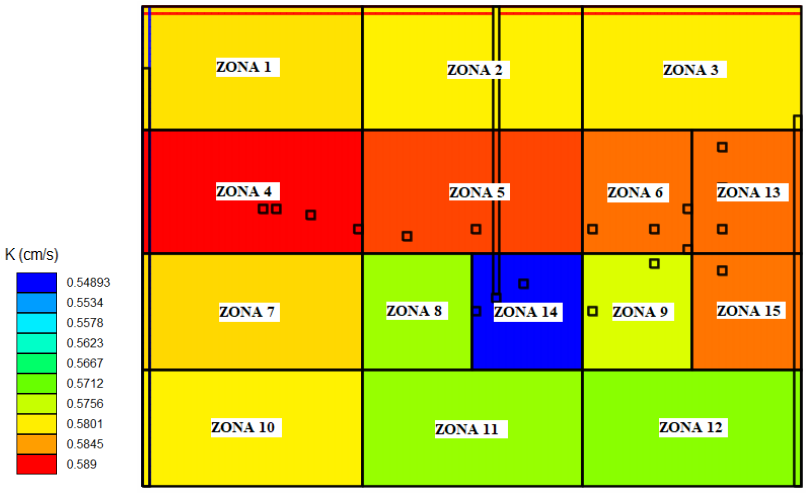

Figura 27. Distribución de la conductividad hidráulica tras su calibración (sin punto de observación 9).

Las figuras 29 a 34 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. El resultado no varía demasiado con respecto al modelo homogéneo inicial. Empleando estos valores de conductividad hidráulica se consigue una óptima aproximación de los valores de los puntos de observación cercanos a la fuente (puntos de observación 34, 22 y 7).

Además, en la figura 28 se muestra la trayectoria de las partículas basada en la componente convectiva del transporte, en la cual se observa que los valores de conductividad hidráulica de la tabla 4 y figura 27 no son capaces de reproducir la curvatura inicial que toma el penacho experimental. El punto 25 muestra una concentración un 86 % inferior a la medida. Asimismo, el paso por la tablestaca se produce a una profundidad exagerada con respecto a la observada y el giro tras la barrera no es tan marcado, y por lo tanto, las partículas no alcanzan la posición deseada. De media, el punto 13 indica el doble de la concentración observada, mientras que los puntos 26 y 27 muestran una concentración menor, en un 91,78 % y un 76,88 % respectivamente. Como excepción, el punto 26 indica una concentración superior a la observada en un 93,60 % en el momento t = 440 s, lo cual sugiere que el transporte se está produciendo demasiado rápido. En las imágenes 33, 34 y 35 se observa un ajuste muy bueno de los puntos 30, 28 y 10; sin embargo, el del resto de puntos no mejora.

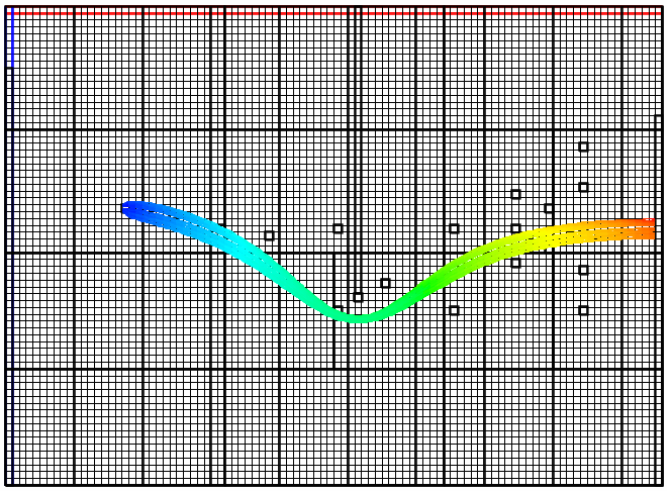

Figura 28. Penacho simulado considerando únicamente el transporte convectivo (2ª calibración de K, sin punto de observación 9).

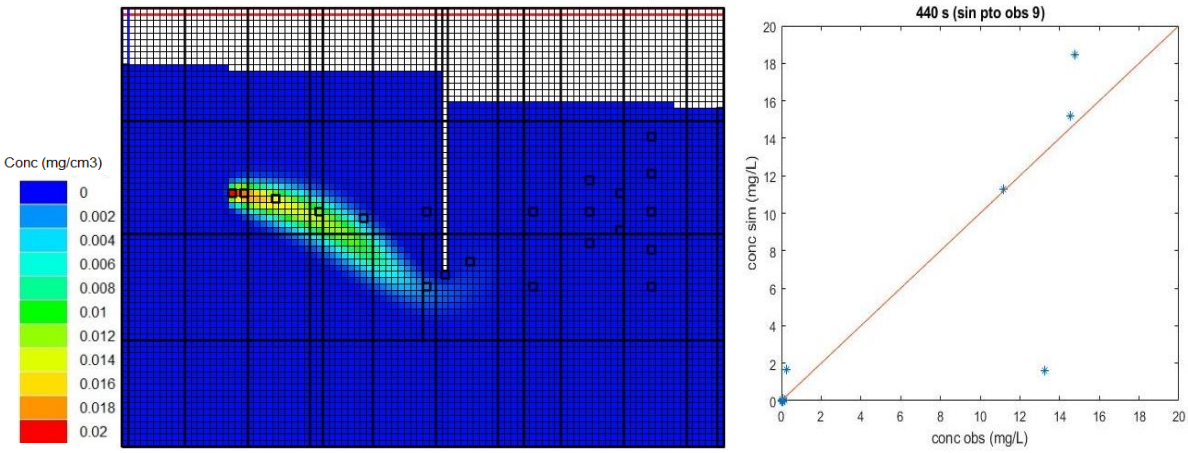

Figura 29. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (2º calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

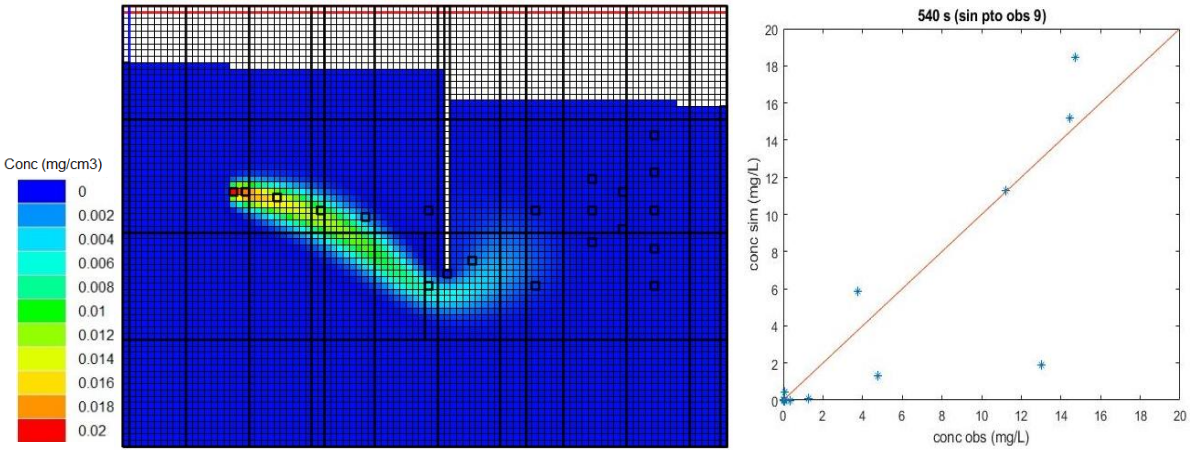

Figura 30. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

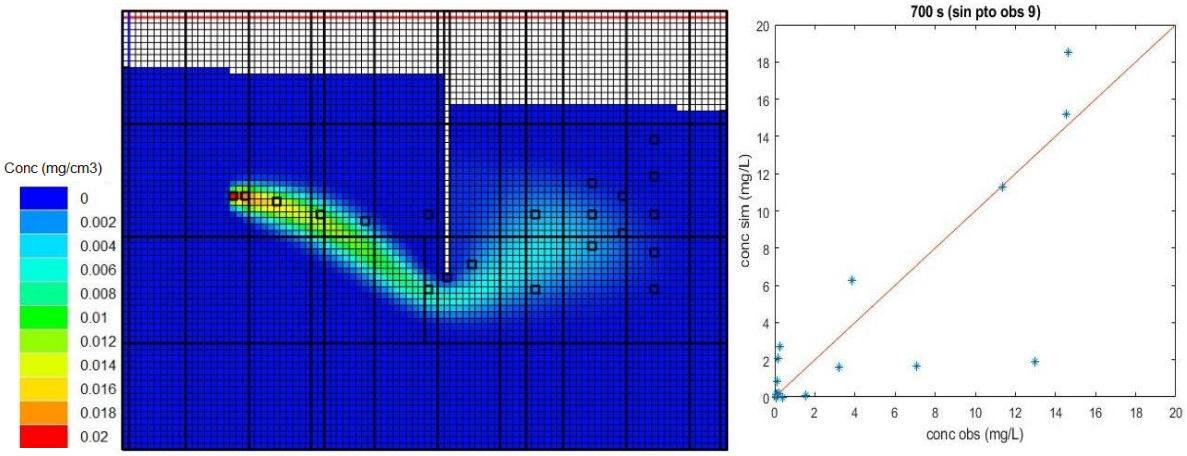

Figura 31. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

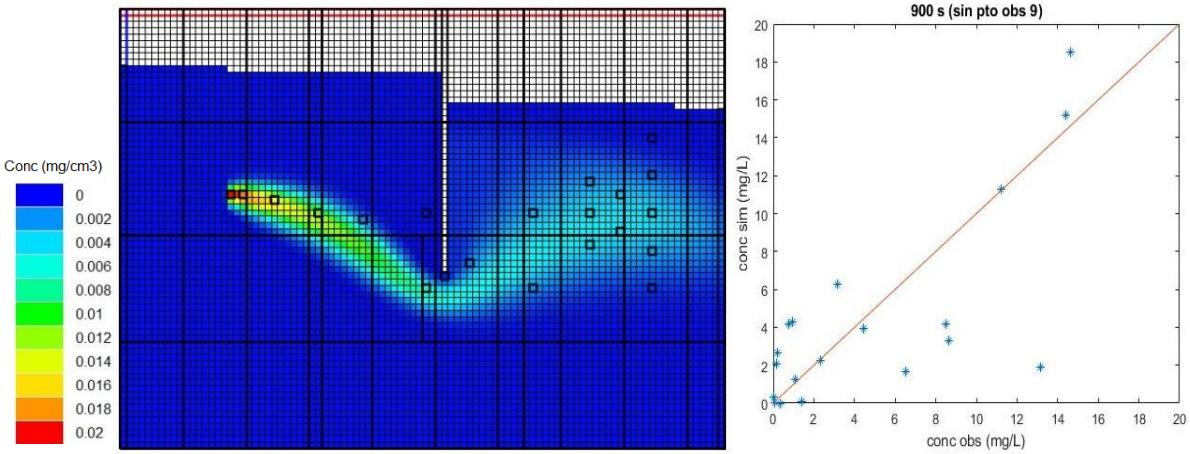

Figura 32. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

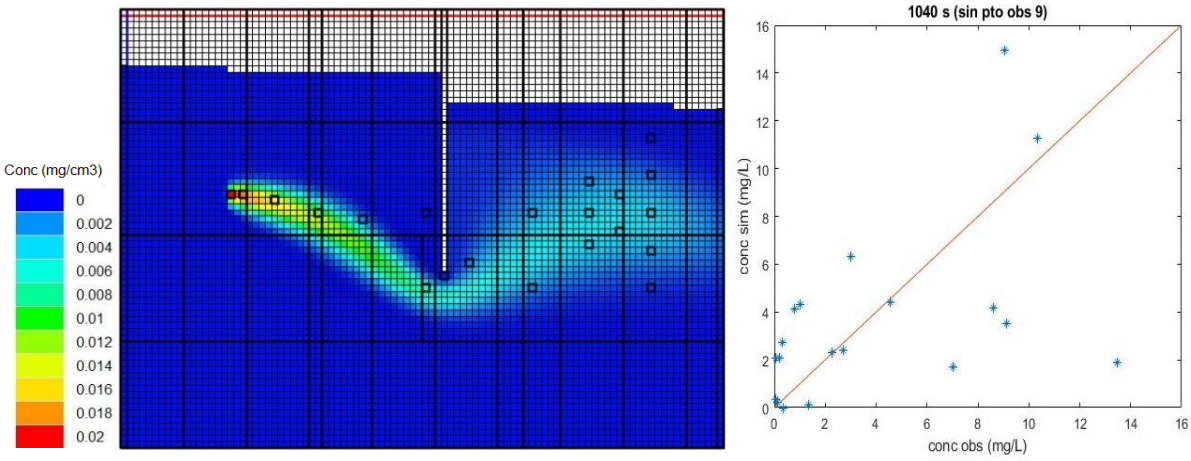

Figura 33. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de K, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

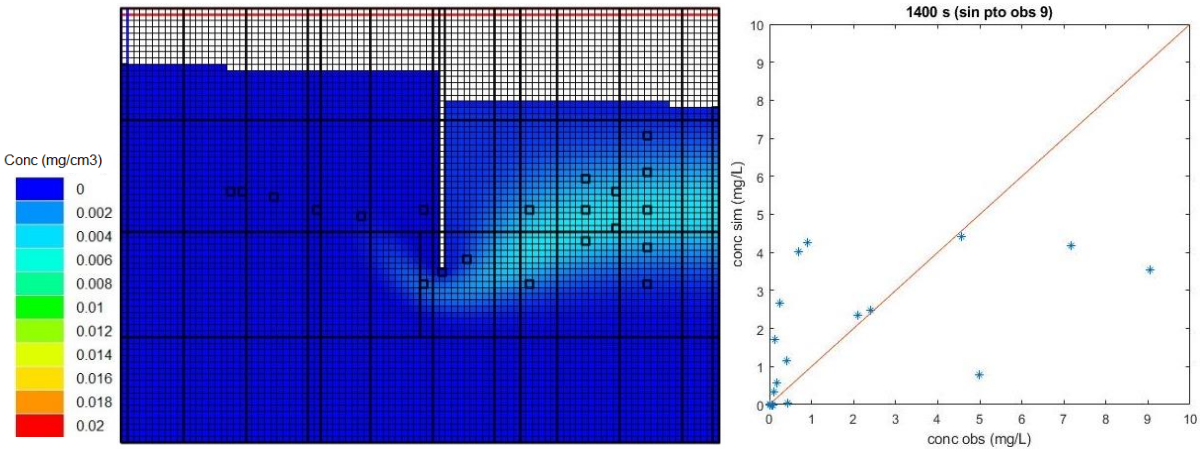

Figura 34. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de *K*, sin punto de observación 9). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Tal y como indica la tabla 5, donde se comparan los valores de la concentración simulados con los observados, a pesar de que algunos puntos muestran un buen ajuste, no ocurre los mismo con los restantes, provocando que se den indicadores desfavorables para el campo de conductividad hidráulica obtenido mediante la segunda calibración. Asimismo, en este caso, no se produce un gran cambio con respecto al modelo inicial.

Tabla 5. Análisis de la 2ª calibración de la conductividad hidráulica (sin punto de observación 9) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	2ª calibración de *K*	0,757	0,343	0,966	2,826
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	2ª calibración de *K*	0,749	0,506	1,243	2,871
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	2ª calibración de *K*	0,690	0,423	1,703	3,149
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	2ª calibración de *K*	0,550	0,452	2,493	3,680
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	2ª calibración de *K*	0,252	0,284	2,766	3,958
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,545	2,240
	2ª calibración de *K*	0,332	0,054	1,354	2,155

Si se realiza la comparación entre los errores calculados para la primera y la segunda calibración (tablas 3 y 5, respectivamente), así como con el modelo homogéneo inicial, se valora que la reproducción más fiel del penacho experimental se logra con los valores obtenidos en la primera calibración, en la que resulta un medio poroso con mayor heterogeneidad. Igualmente, la tabla 6, que recoge las medidas de los errores obtenidos para la totalidad de la información empleada en el proceso de calibración del parámetro (1.419 observaciones), reafirma que la primera calibración da como resultado un mejor ajuste. El punto de observación 9 resulta determinante para la fiel reproducción del penacho, tanto en forma como en valor de las concentraciones, ya que el penacho experimental pasa precisamente sobre él.

Tabla 6. Comparación de errores de la concentración simulada con los distintos campos de conductividad hidráulica (mg/L).

	R^2	ME	MAE	RMSE
Inicial	0,610	0,321	1,658	2,912
1ª calibración de *K* (con todos los ptos de obs)	0,793	-0,019	1,381	2,210
2ª calibración de *K* (sin pto de obs 9)	0,616	0,222	1,641	2,934

La segunda parte del penacho (momentos t = 1.040 s y t =1.400 s) sigue siendo problemática, a pesar de haber obtenido un ajuste aceptable, este es muy mejorable. Siguen dándose valores muy bajos de concentración, lo cual se debe a la gran área que se ve afectada, el penacho se propaga excesivamente tras sortear la tablestaca. Por ello, a continuación, se estudia el parámetro de transporte, dispersividad longitudinal.

3.3. Heterogeneidad de la dispersividad

El transporte dispersivo engloba aquellas causas que provocan el desplazamiento de los solutos a una velocidad distinta que la velocidad intergranular o real del flujo y que se propaguen por un recorrido distinto al que correspondería teniendo en cuenta únicamente el fenómeno de transporte por advección. En el transporte dispersivo se dan dos fenómenos. Por un lado, la difusión molecular, definida por los gradientes de concentración, induce el movimiento de los solutos de zonas con mayor concentración a zonas de menor concentración, incluso cuando no existe flujo. Por otro lado, la dispersión mecánica, la cual se

refiere a la propagación de los solutos por distintas trayectorias debido a la heterogeneidad del medio poroso. Ambos fenómenos constituyen la dispersión hidrodinámica.

En este experimento, se desprecia la difusión molecular (Citarella et al., 2015a). Sería necesario tener en consideración la difusión molecular en medios porosos muy impermeables (Fetter, 2008), donde la velocidad intergranular fuera muy pequeña, lo cual no se corresponde a este caso en particular. El número de Peclet también se emplea para estudiar la efectividad del transporte difusivo frente al dispersivo expresada como

$$Pe = \frac{v_x d}{D_d} \tag{10}$$

siendo v_x la velocidad intergranular [L/T], d el diámetro medio de las partículas [L] y D_d el coeficiente de difusión [L^2/T]. Para valores pequeños, por debajo de la la unidad, predomina la difusión molecular, mientras que para valores mayores, predomina la dispersión mecánica (Fetter, 2008). El valor del coeficiente de difusión de la flouresceína de sodio en agua es de 0,42E-05 cm2/s (Casalini et al., 2011), por lo que el número de Peclet resulta muy elevado. Así, se reconoce que la difusión no tiene un papel determinante en el transporte del soluto y, por lo tanto, tal y como lo consideraron Citarella et al. (2015a), se puede prescindir de ella.

Para calcular el transporte por dispersión mecánica es necesario conocer el valor del parámetro de la dispersividad, tanto longitudinal, α_L, como transversal, α_T. La dispersividad longitudinal, en la dirección del flujo, siempre es mayor que la transversal, en la dirección normal al flujo, y para el cálculo de la dispersividad transversal se suele asumir una fracción de la longitudinal. En este apartado se considera, por lo tanto, el flujo másico dispersivo sobre el eje x, por unidad de área, como

$$F_x^{disp} = \phi_e D_x \frac{\partial C}{\partial x} = \phi_e v_x \alpha_L \frac{\partial C}{\partial x}\,, \tag{11}$$

siendo ϕ_e la porosidad efectiva [-], D_x el coeficiente de dispersión hidrodinámica sobre el eje x [L^2/T], v_x la velocidad intergranular [L/T], α_L la dispersividad longitudinal [L] y C la concentración del trazador [M/L^3] y sobre el eje z

$$F_z^{disp} = \phi_e D_z \frac{\partial C}{\partial z} = \phi_e v_x \alpha_{TV} \frac{\partial C}{\partial z}\,, \tag{12}$$

siendo ϕ_e la porosidad efectiva [-], D_z el coeficiente de dispersión hidrodinámica sobre el eje z [L^2/T], v_x la velocidad intergranular [L/T], α_{TV} la dispersividad trasversal vertical [L] y C la concentración del trazador [M/L^3].

La calibración del parámetro de dispersividad longitudinal se lleva a cabo, manteniendo constante la tasa de la dispersividad transversal respecto a la longitudinal e igual a 0,3868 y considerando inicialmente el medio poroso como homogéneo ($K = 0{,}58\ cm/s$). Después, se emplea el campo de conductividades hidráulicas obtenido en el apartado anterior (primera calibración de la conductividad hidráulica). Además, en este caso, se decide realizar una mayor subdivisión de zonas en la parte donde la reproducción del penacho es más complicada, tal y como se observa en la figura 35.

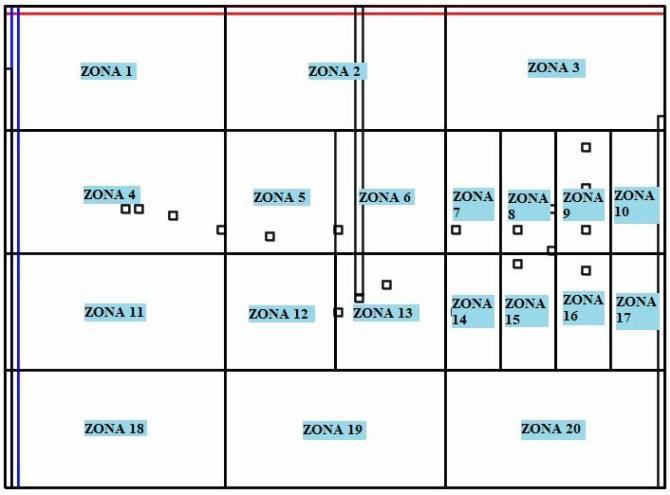

Figura 35. Discretización espacial de la distribución de las zonas de distinta dispersividad longitudinal.

Los límites, superior e inferior, entre los cuales se indica al software PEST que realice los cálculos iterativos hasta encontrar los valores óptimos de la dispersividad longitudinal, son 1 cm y 0 cm, respectivamente. La dispersividad es un parámetro que define las heterogeneidades del medio poroso, pero se encuentra fuertemente influenciada por la discretización del modelo empleado. Cuanto más fina sea la malla, será posible describir el medio poroso con mayor precisión, pero el valor de la dispersividad nunca puede superar el tamaño de celda empleado en la malla que conforma el modelo numérico.

De esta manera el resultado de la primera calibración para esta hipótesis queda recogido en la tabla 7 y en la figura 36. De la misma manera que en el apartado anterior de este capítulo, las observaciones son insensibles a los valores de dispersividad en las zonas situadas en la parte superior e inferior y resultan en un valor de dispersividad longitudinal muy similar

al inicial ($\alpha_L = 0{,}212\ cm$), mientras que la zona de mayor valor es la zona 4, siendo de 0,9914 cm, y la de menor valor, es la zona 13, siendo de un valor prácticamente igual a cero, 6,7E-07 cm. Se obtiene una mediana de 0,212 cm, un valor esperado de 0,283 cm y una varianza de 0,051 cm^2.

Tabla 7. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Zona	Dispersividad longitudinal, α_L (cm)	Zona	Dispersividad longitudinal, α_L (cm)
1	0,2120	11	0,3015
2	0,2122	12	0,8654
3	0,2139	13	0,0000
4	0,9914	14	0,2082
5	0,3713	15	0,2121
6	0,1949	16	0,2162
7	0,1914	17	0,2119
8	0,1980	18	0,2120
9	0,2053	19	0,2110
10	0,2119	20	0,2119

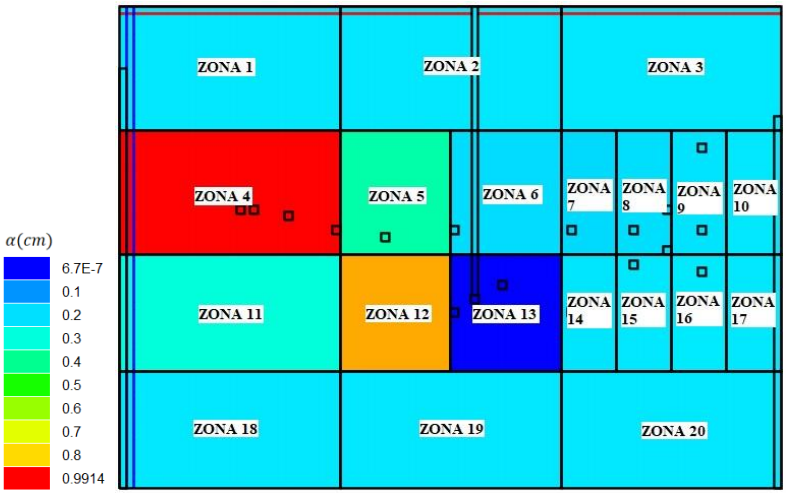

Figura 36. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Las figuras 37 a 42 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. Como valoración general, se aprecia que las concentraciones simuladas son más bajas que las observadas.

En los primeros pasos de tiempo, t = 440 s y t = 540 s (figuras 37 y 38), hay un buen ajuste para los puntos cercanos a la fuente, excepto para el punto 25, donde la concentración simulada es aproximadamente un 72,1 % inferior y es que no se reproduce la curvatura original. Tampoco se reproduce verazmente el paso por debajo de la tablestaca, como se aprecia en los pasos de tiempo siguientes, figuras 39 y 40. El valor de la concentración en el punto 13 es muy superior en los momentos t = 440 s y t = 1.400 s, mayor al doble de las observaciones, y en el resto de los pasos de tiempo, de media, es un 37 % superior. Mientras que los puntos 26 y 27 indican, de media, una concentración menor en un 71,39 % y en un 79,19 %, respectivamente.

Por otro lado, se puede decir que el penacho simulado no alcanza la posición correcta observada en laboratorio tras superar la barrera, si no que queda por debajo, pues en las figuras 41 y 42, mientras los puntos 33, 31, 29 y 14 muestran valores demasiado altos, los puntos 32, 35, 27 y 26 muestran valores bajos. Cabe mencionar que la escala de colores en las figuras 41 y 42 es diferente a la empleada en el resto de figuras.

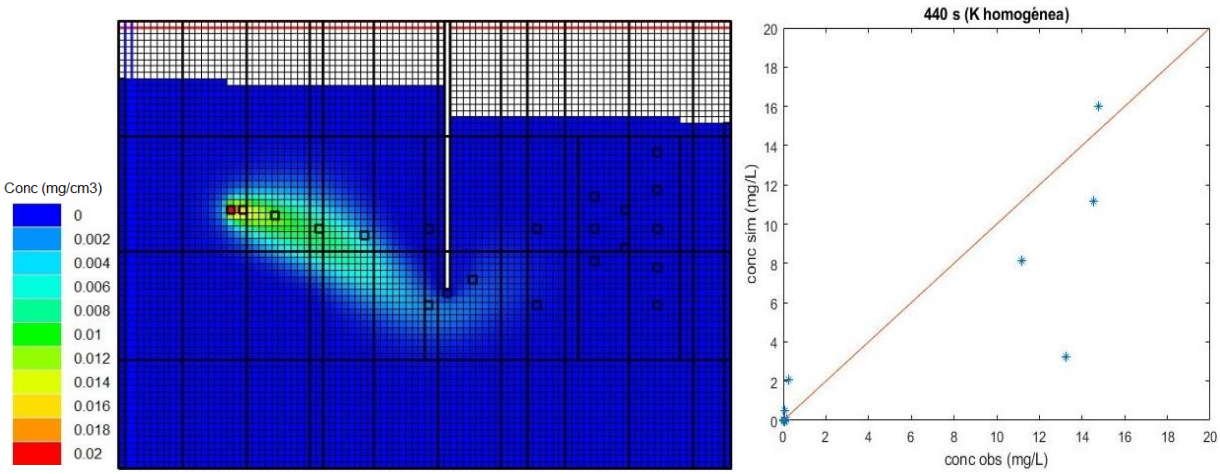

Figura 37. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

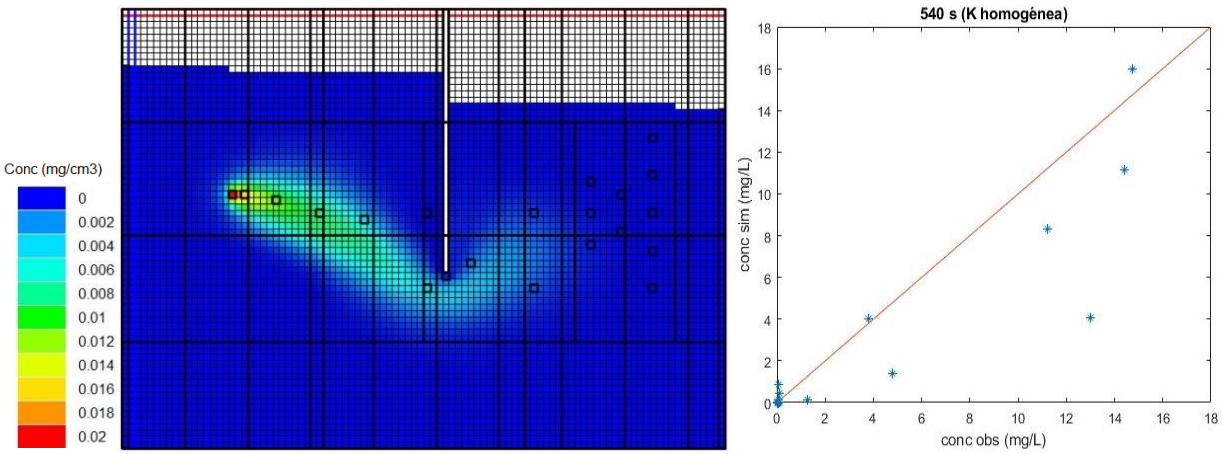

Figura 38. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

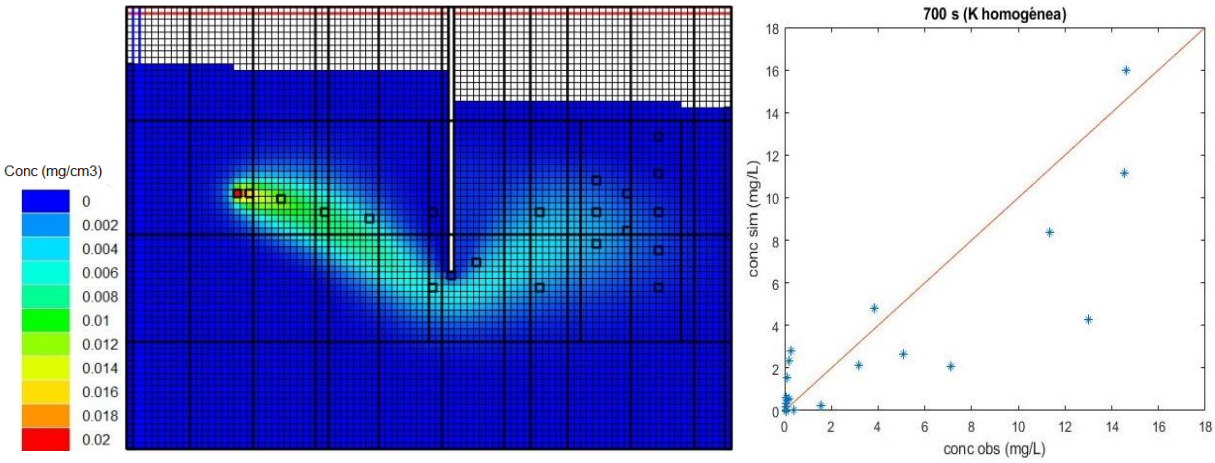

Figura 39. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de $\boldsymbol{\alpha_L}$, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

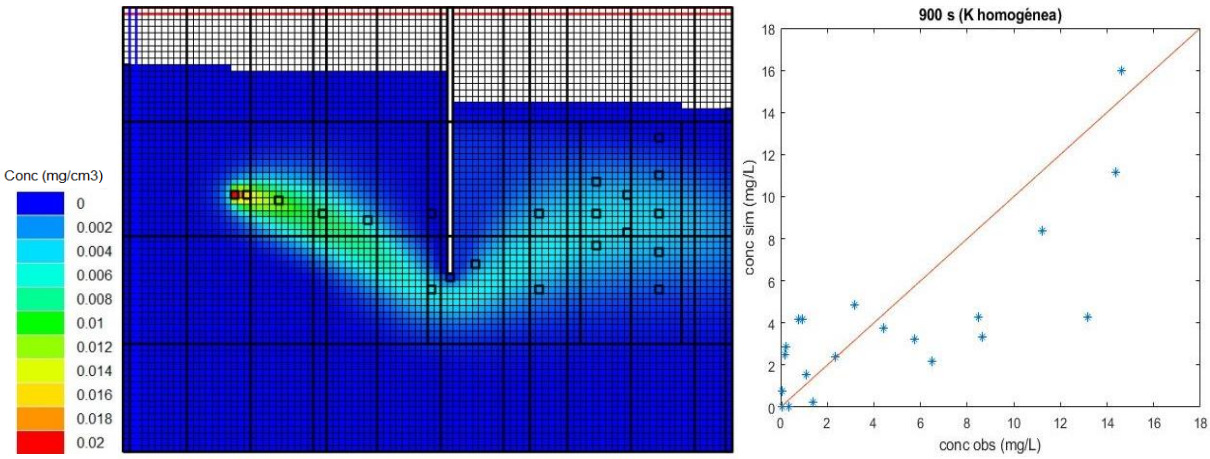

Figura 40. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de $\boldsymbol{\alpha_L}$, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

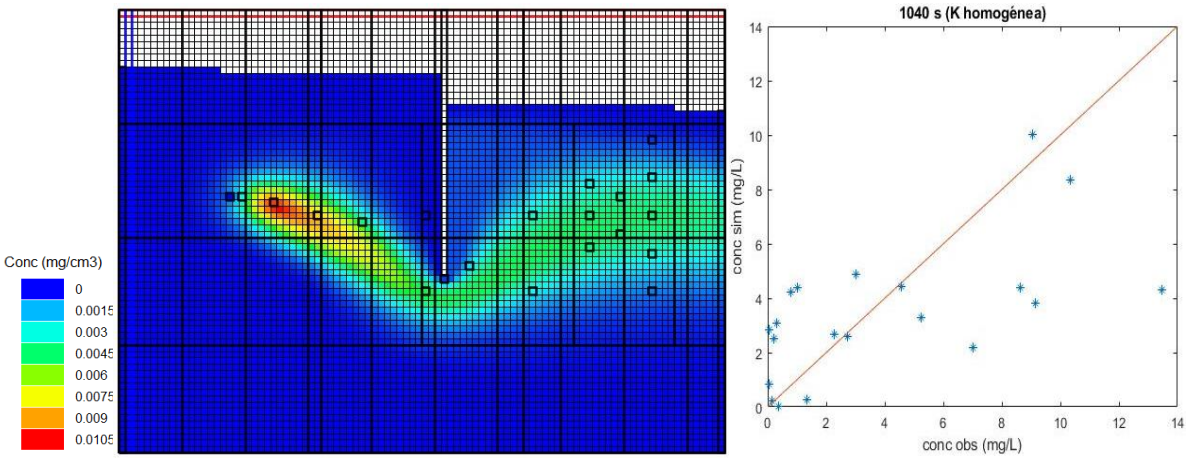

Figura 41. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de $\boldsymbol{\alpha_L}$, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

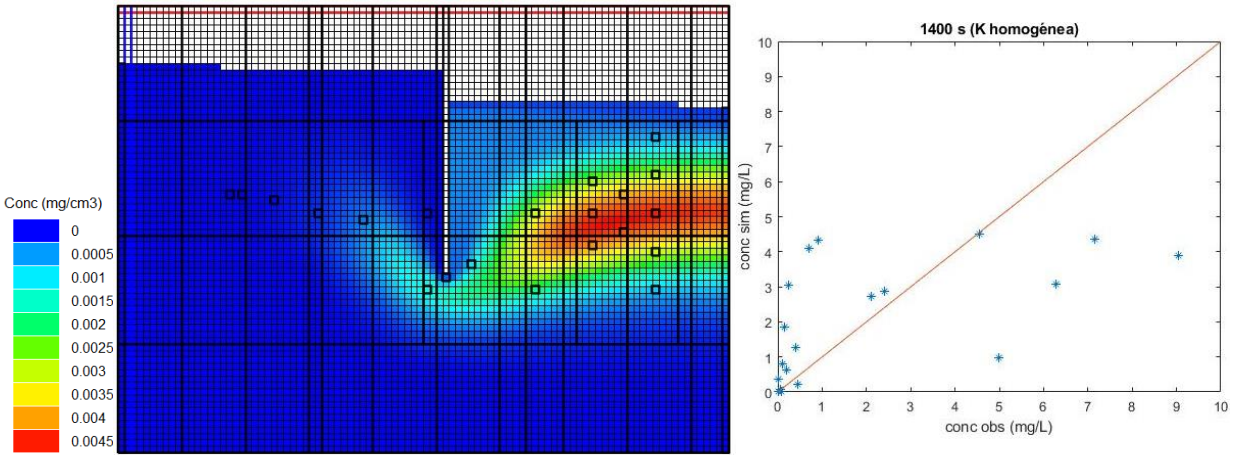

Figura 42. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de $\boldsymbol{\alpha_L}$, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Los indicadores que comparan los valores de la concentración simulados con los observados quedan recogidos en la tabla 8. Modificando el campo de dispersividades y manteniendo constante el valor de la conductividad hidráulica se aprecia una ligera mejora. Sin embargo, si se comparan con los valores obtenidos para los mismos indicadores con el campo de conductividad hidráulica obtenido tras su calibración en el apartado anterior (tabla 3), el ajuste es mejor modificando únicamente la conductividad hidráulica que modificando la dispersividad, quedando así de manifiesto que el campo de velocidades del flujo considerando el medio poroso como heterogéneo se adecua más fielmente a la realidad observada en laboratorio. Además, esto mismo puede comprobarse comparando la figura 20, que muestra el penacho que surge por transporte convectivo con el campo de conductividad hidráulica heterogéneo, ya que este es más similar a las fotografías de laboratorio que el penacho en un medio homogéneo, como es el del modelo inicial (figura 16).

Tabla 8. Análisis de la 1ª calibración de la dispersividad longitudinal (***K*** homogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	1º calibración de α_L	0,807	0,690	1,038	2,515
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	1º calibración de α_L	0,829	0,880	1,154	2,387
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	1º calibración de α_L	0,755	0,761	1,777	2,709
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	1º calibración de α_L	0,615	0,878	2,473	3,243
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	1º calibración de α_L	0,380	0,521	2,399	3,256
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	1º calibración de α_L	0,356	0,038	1,517	2,204

A continuación, se realiza la segunda calibración de la dispersividad hidráulica, esta vez, empleando el campo de conductividades hidráulica calculada anteriormente (tabla 2), obteniéndose así el campo de dispersividades longitudinales que recoge la tabla 9 y figura 43.

Tabla 9. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (*K* heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Zona	Dispersividad longitudinal, α_L (cm)	Zona	Dispersividad longitudinal, α_L (cm)
1	0,2120	11	0,2109
2	0,2120	12	0,1456
3	0,2121	13	0,0000
4	0,4646	14	0,2042
5	0,2097	15	0,2106
6	0,2030	16	0,2116
7	0,2047	17	0,2120
8	0,2099	18	0,2120
9	0,2100	19	0,2119
10	0,2119	20	0,2120

Se obtiene una mediana de 0,211 cm, un valor esperado de 0,209 cm y una varianza de 0,006 cm^2. De igual manera que en el caso anterior, la zona de mayor valor es la zona 4, siendo de 0,4646 cm, y la zona de menor valor es la zona 13, siendo de un valor igual a 2,3E-06 cm. Con las fotografías del experimento de laboratorio se aprecia como el penacho pasa de forma muy cercana a la tablestaca, y tras sortearla, realiza un acentuado giro hacia arriba. El valor prácticamente nulo de la dispersividad en la zona 13, puede deberse a la forma del penacho en estos instantes, pues el modelo inicial fallaba a la hora de representarlo.

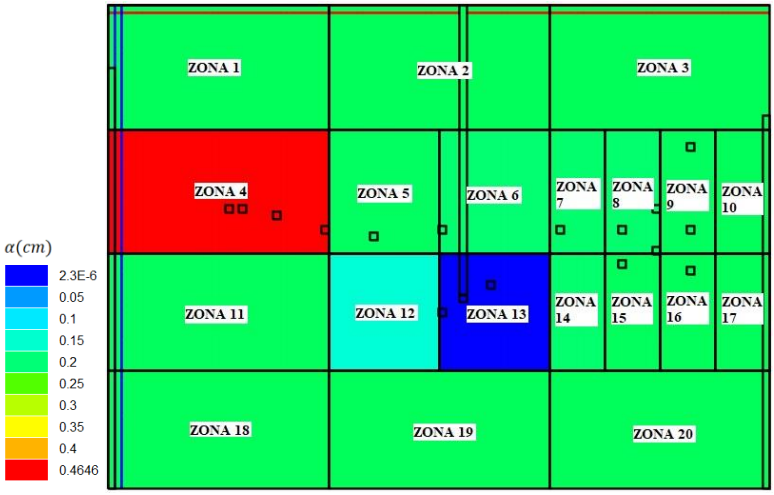

Figura 43. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (*K* heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Las figuras 44 a 49 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. En la fase inicial del penacho, t = 440 s y t = 540 s (figuras 44 y 45), el ajuste de los puntos 22, 7 y 13 es muy bueno, mientras que el punto 34 sigue indicando concentraciones superiores, un 23,68 % en los primeros tres pasos de tiempo, en los siguientes el valor resulta muy superior. Esto puede deberse a las consideraciones realizadas a la hora de calcular las concentraciones observadas, tal y como se ha explicado anteriormente. La curvatura que adopta el penacho mejora, aun así, sigue sin reproducirse totalmente, dando valores muy bajos en el punto 25, en un 32,5 %.

Después, en las figuras 46 y 47, se aprecia como mejora el giro posterior al paso por debajo de la barrera, el punto 27 muestra una concentración mayor que en el modelo inicial, aunque aún baja con respecto a las mediciones, de media, un 42,12 %. El punto 26 indica concentraciones muy bajas, con un valor menor a la mitad del valor observado, con lo cual el paso se sigue produciendo a una mayor profundidad.

Por otro lado, en los momentos t = 1.040 s y t = 1.440 s (figuras 48 y 49), el penacho es mucho más similar al observado, el ajuste de los puntos 9 y 10 es muy bueno, alcanza una posición más acertada y es más definido, afectando a una menor área. No obstante, aún existen diferencias, los puntos 28, 30 y 13 dan valores superiores, mientras los puntos 32, 35 y 27, indican valores inferiores.

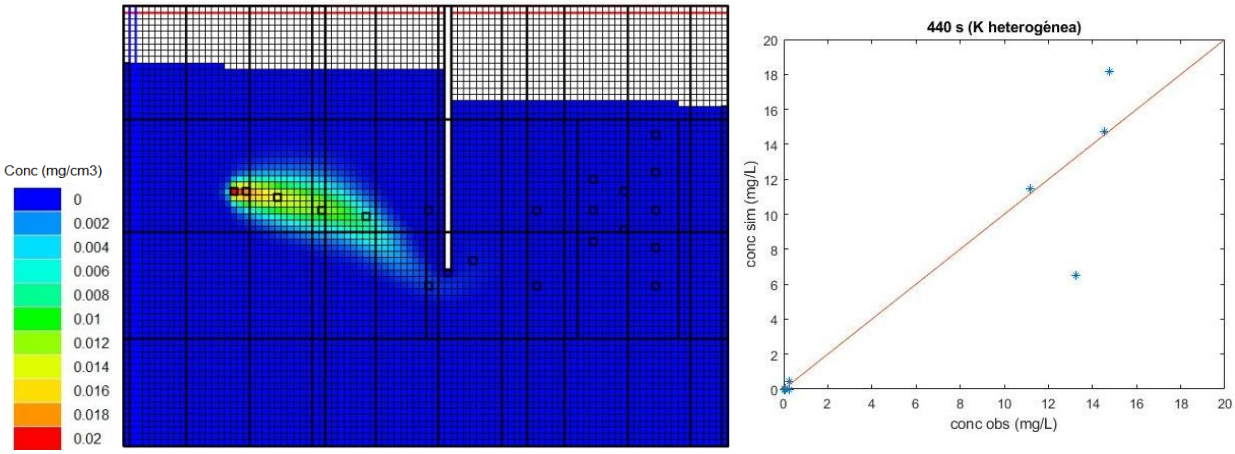

Figura 44. Penacho y gráfica de valores de concentración observada – simulada en el momento t = 440 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

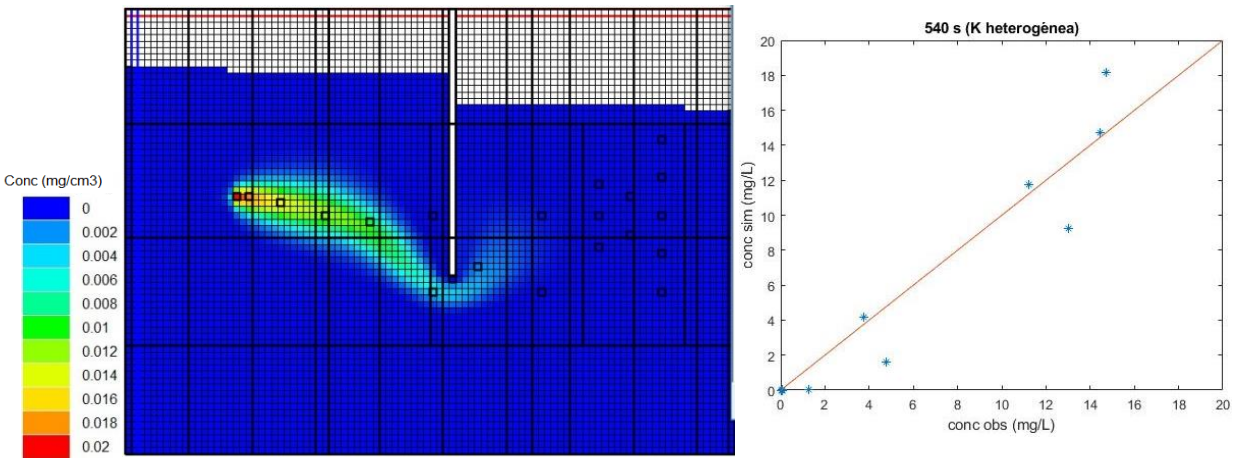

Figura 45. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

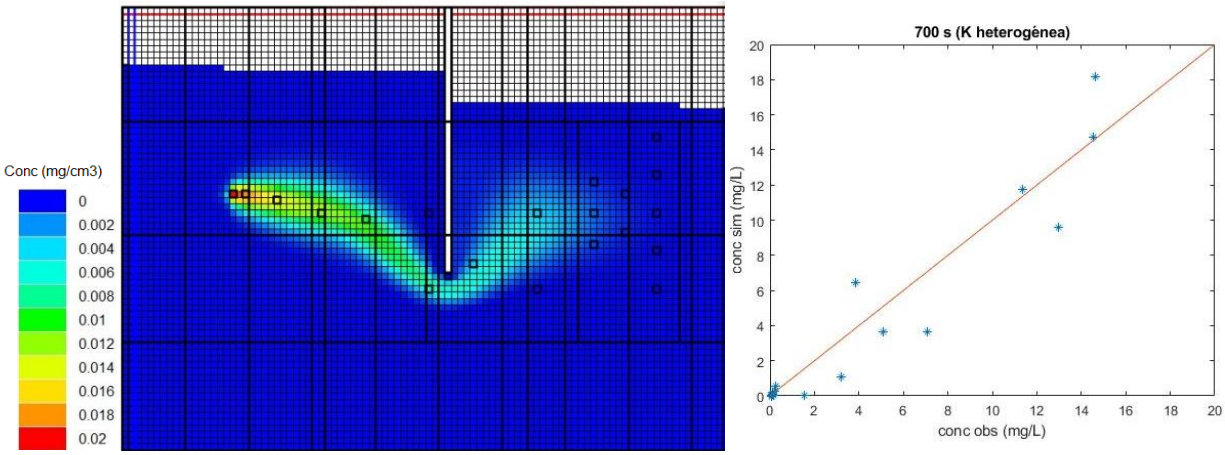

Figura 46. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

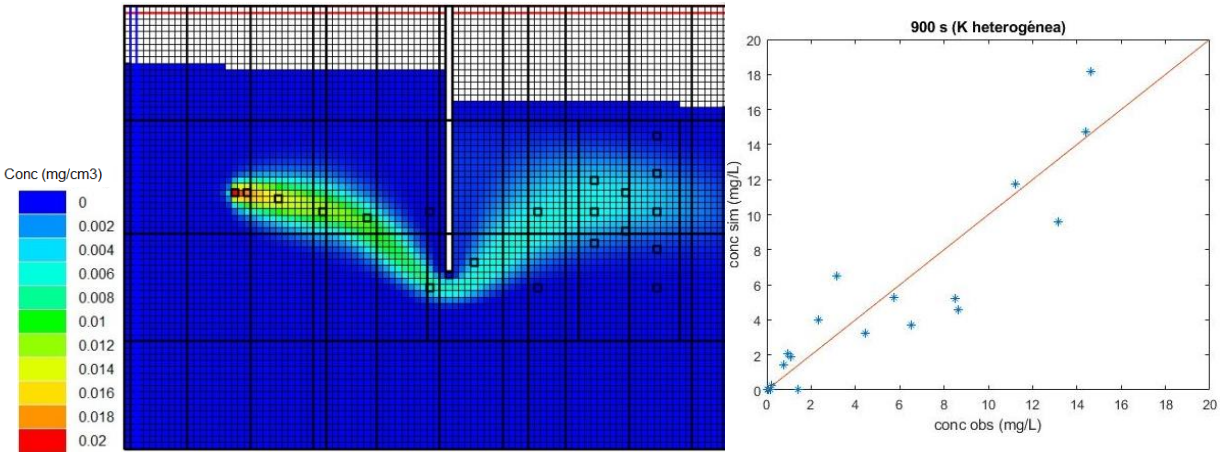

Figura 47. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

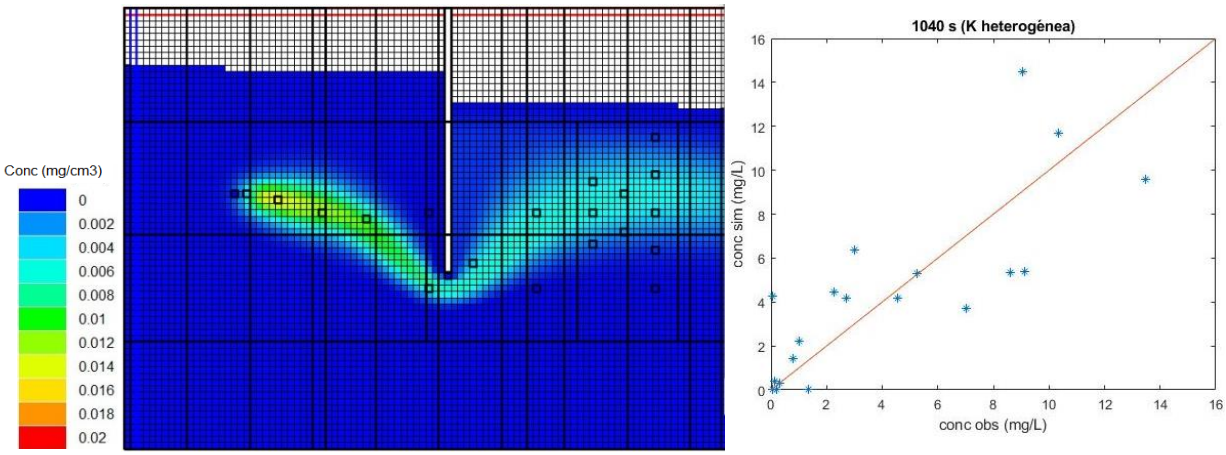

Figura 48. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

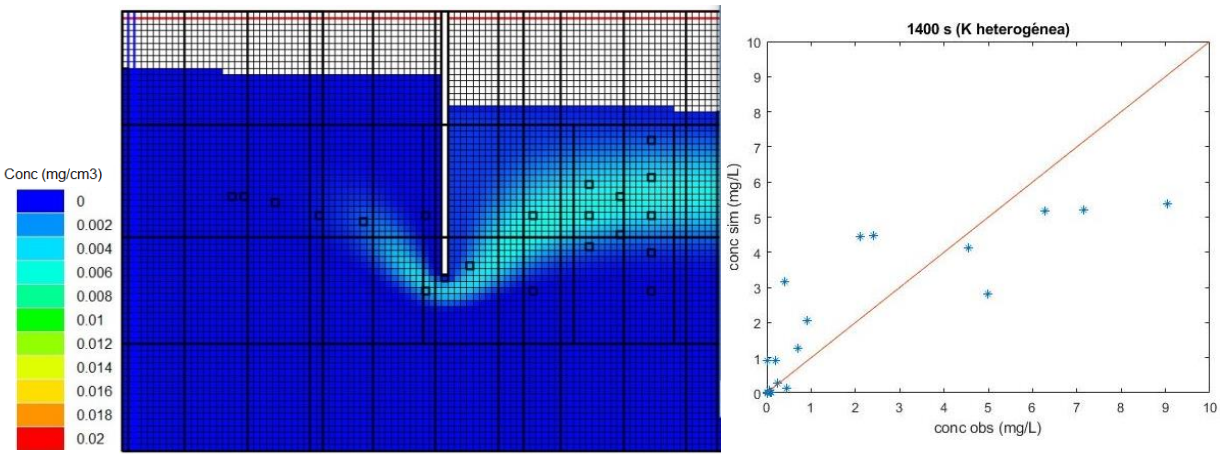

Figura 49. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

Si se realiza la comparación del penacho simulado en el apartado anterior (campo de conductividad hidráulica heterogéneo y valor inicial de la dispersividad) y el penacho simulado en esta ocasión (campo de conductividad hidráulica y campo de dispersividad heterogéneos), el ajuste a las observaciones es mejor en el segundo caso (tablas 6 y 11). Además, se mejora en gran medida el penacho, principalmente en los momentos t = 1.040 s y t = 1.400 s, tal y como muestra la tabla 10.

Tabla 10. Análisis de la 2ª calibración de la dispersividad longitudinal (K heterogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	2º calibración de α_L	0,905	0,177	0,585	1,697
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	2º calibración de α_L	0,939	0,225	0,694	1,389
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	2º calibración de α_L	0,916	0,280	0,998	1,616
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	2º calibración de α_L	0,850	0,265	1,477	2,019
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	2º calibración de α_L	0,659	-0,184	1,838	2,476
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	2º calibración de α_L	0,720	-0,029	1,029	1,481

La tabla 11 recoge las medidas de los errores obtenidos para la totalidad de la información empleada en la calibración del parámetro, 1.419 observaciones. Con estos indicadores, se puede decir que el mejor ajuste se produce con los valores obtenidos en la segunda calibración de la dispersividad longitudinal.

Tabla 11. Comparación de errores de la concentración simulada con los distintos campos de dispersividad longitudinal. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD (mg/L).

	R2	**ME**	**MAE**	**RMSE**
Inicial	0,610	0,321	1,658	2,912
1º calibración de α_L, (K homogénea)	0,673	0,454	1,641	2,598
2º calibración de α_L, (K heterogénea)	0,839	0,015	1,115	1,823

Al observar las imágenes del desarrollo del penacho en los casos estudiados en este apartado, prestando especial atención a la primera parte del penacho, se puede apreciar un cierto grado de dispersión numérica, la cual provoca que una mayor área se encuentre afectada por el trazador, incluyendo celdas que se encuentran por detrás de la fuente. Se considera que la dispersión numérica no es grave, como para estimar erróneos los campos de dispersividad longitudinal resultantes de las optimizaciones. No obstante, se decide cambiar el método de resolución de la ecuación de transporte al método de las características (MOC), ya que se trata de un procedimiento que evita este tipo de problema numérico.

De modo que se vuelven a realizar las mismas calibraciones; primero, empleando un campo homogéneo de la conductividad hidráulica ($K = 0{,}58\ cm/s$) y después, utilizando el campo de conductividad hidráulica obtenido en el apartado anterior (primera calibración de la conductividad hidráulica).

La tabla 12, así como la figura 50, muestran el resultado obtenido tras la calibración de la dispersividad longitudinal considerando un campo homogéneo de la conductividad hidráulica. Se observa un rango de valores menor, siendo la varianza de 0,016 cm, la mediana es de 0,218 cm y el valor esperado es de 0,247 cm. El valor más alto se da en la zona 4 (0,5962 cm), mientras que el más bajo se de en la zona 18, siendo prácticamente igual a cero. Al igual que en el caso de resolver la ecuación de transporte mediante el método TVD, como el método MOC, los valores más elevados de la dispersividad longitudinal se dan en las zonas cercanas a la fuente, mientras que los valores menores se dan en la parte derecha del tanque de arena.

Tabla 12. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

Zona	Dispersividad longitudinal, α_L (cm)	Zona	Dispersividad longitudinal, α_L (cm)
1	0,4965	11	0,2259
2	0,2998	12	0,2994
3	0,1784	13	0,2827
4	0,5962	14	0,2447
5	0,3825	15	0,1731
6	0,1590	16	0,2098
7	0,2891	17	0,1640
8	0,2513	18	3,7E-05
9	0,1847	19	0,1906
10	0,1198	20	0,2023

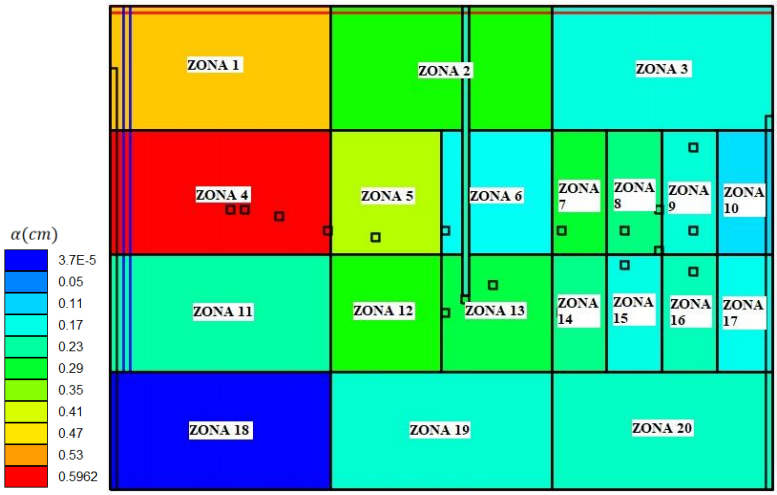

Figura 50. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

Las figuras 51 a 56 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. De igual manera que ocurre con la configuración del campo de dispersividad longitudinal obtenido mediante el método TVD para la resolución de la ecuación de transporte, las concentraciones simuladas son más bajas que las observadas y analizando la forma del penacho, se puede apreciar que es más compacto, quedando así mejor resuelto el problema de dispersión numérica. Sin embargo, se siguen produciendo los errores anteriormente vistos en las figuras 39 a 42 e incluso, el resultado es un poco más desfavorable, como muestra la tabla 13, si se realiza la comparación con la tabla 8.

En los primeros pasos de tiempo, t = 440 s y t = 540 s (figuras 51 y 52), se da un buen ajuste de los puntos 34, 22 y 7, a excepción del punto 25, el cual muestra una concentración menor en un 79,1 % y 73,5 %, lo cual indica una pobre reproducción de la curvatura inicial del penacho. Asimismo, se aprecia que el penacho viaja demasiado rápido, dándose una concentración muy elevada en el punto 13, en el momento t = 540 s, siendo un 36,8 % mayor.

En las figuras siguientes, 53 y 54, que muestran los pasos de tiempo t = 700 s y t = 900 s, se observa que tampoco se reproduce fielmente el paso por debajo de la tablestaca. En estos pasos de tiempo, el punto 13 indica una concentración mayor del doble de la observada en laboratorio, mientras que los puntos 26 y 27 muestran valores mucho menores, siendo de más de un 70 % menor la concentración en el punto 27 y un 56,67 % para el punto 26.

En los últimos pasos de tiempo, figuras 55 y 56 se observa que los puntos 10, 28 y 30 muestran un buen ajuste, pero los puntos 27, 9, 35 y 32 indican una concentración muy menor, mientras que los puntos 31, 33 y 29 indican una concentración muy mayor. Con estas observaciones, se puede decir que el penacho en estos momentos sigue afectando a un área demasiado extensa y no alcanza la posición que se da en laboratorio.

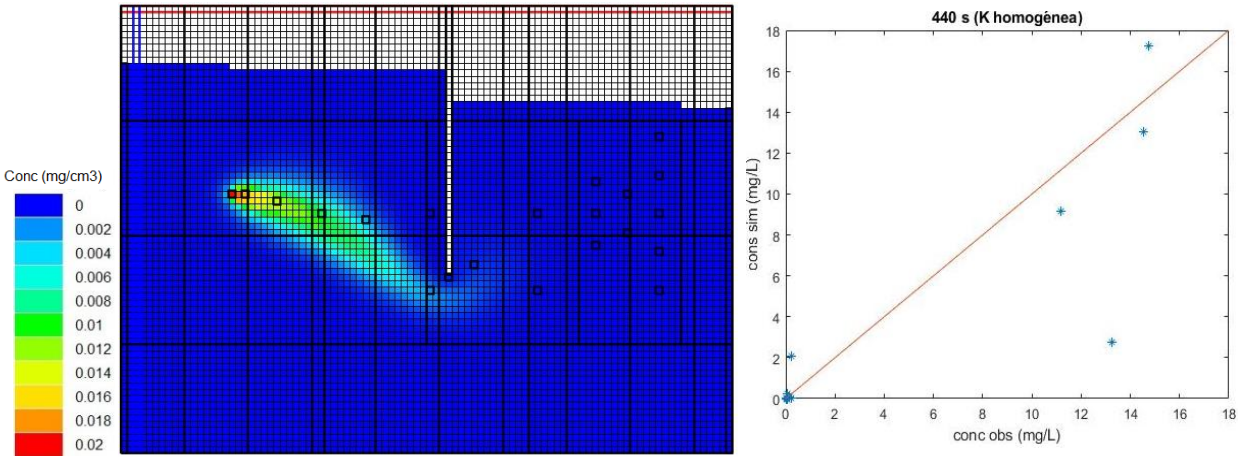

Figura 51. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

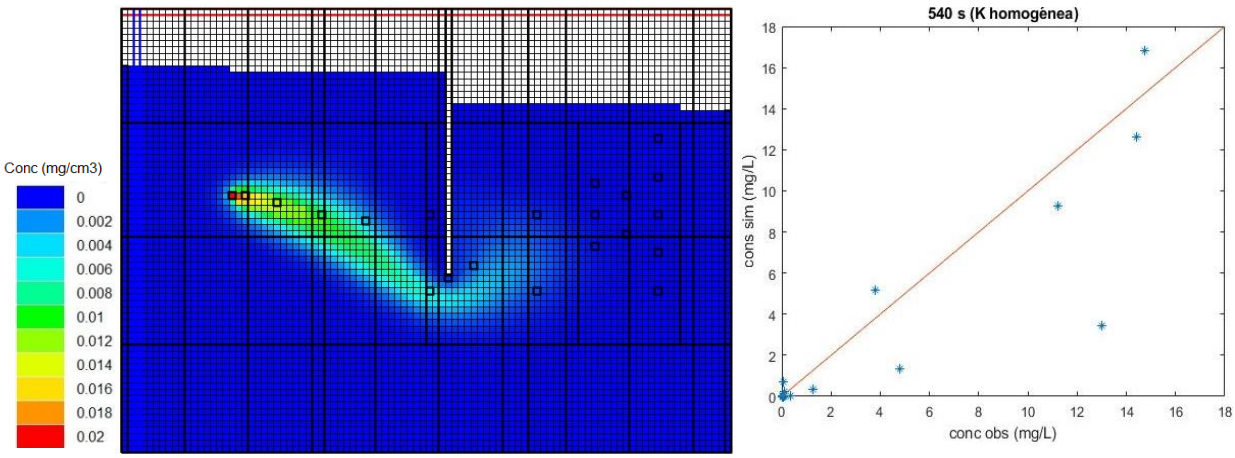

Figura 52. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

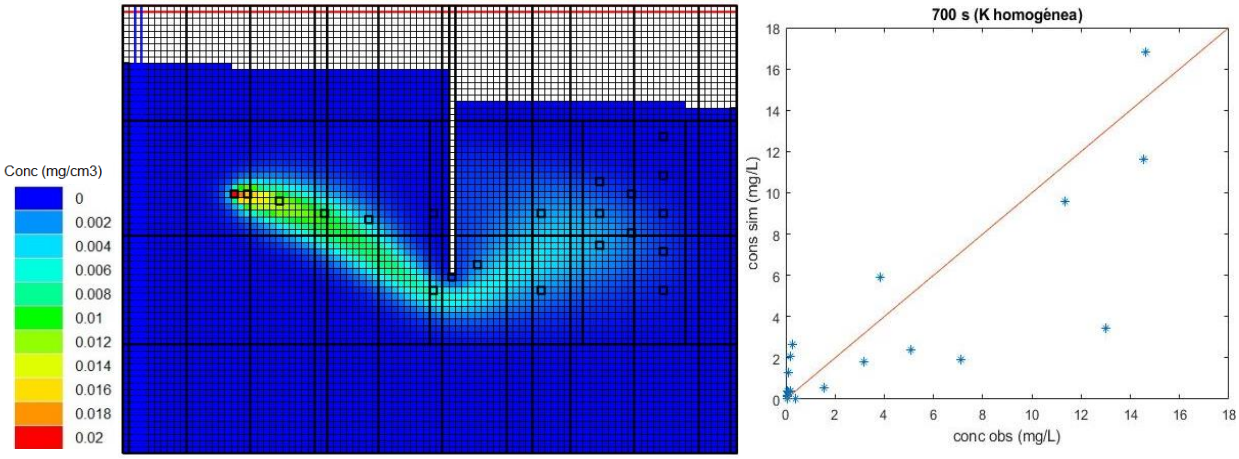

Figura 53. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

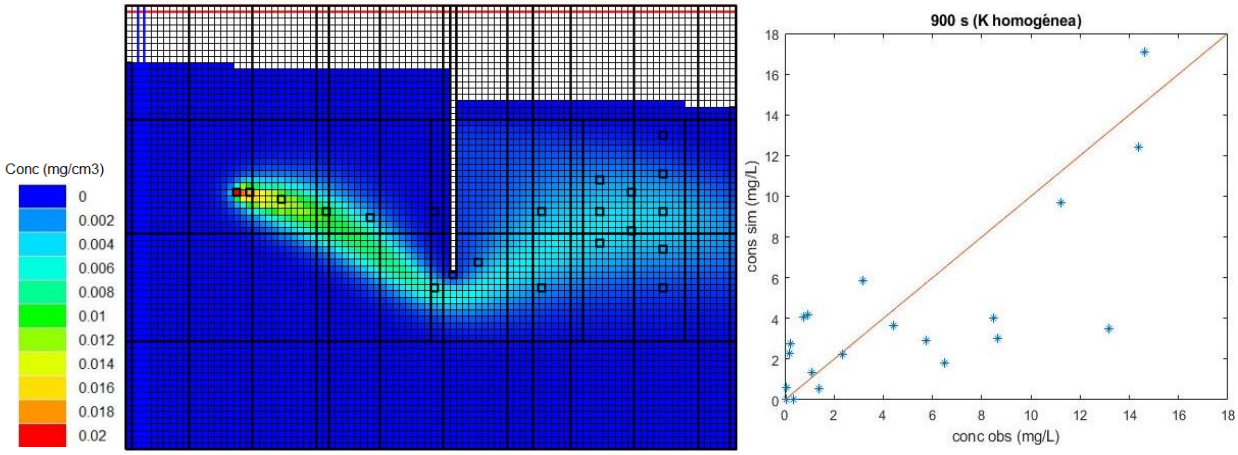

Figura 54. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

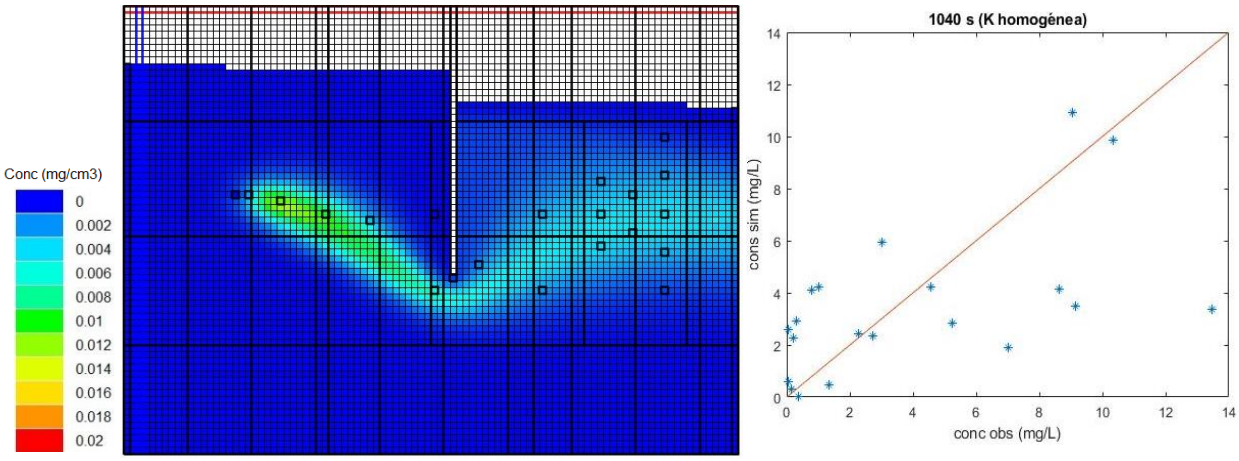

Figura 55. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

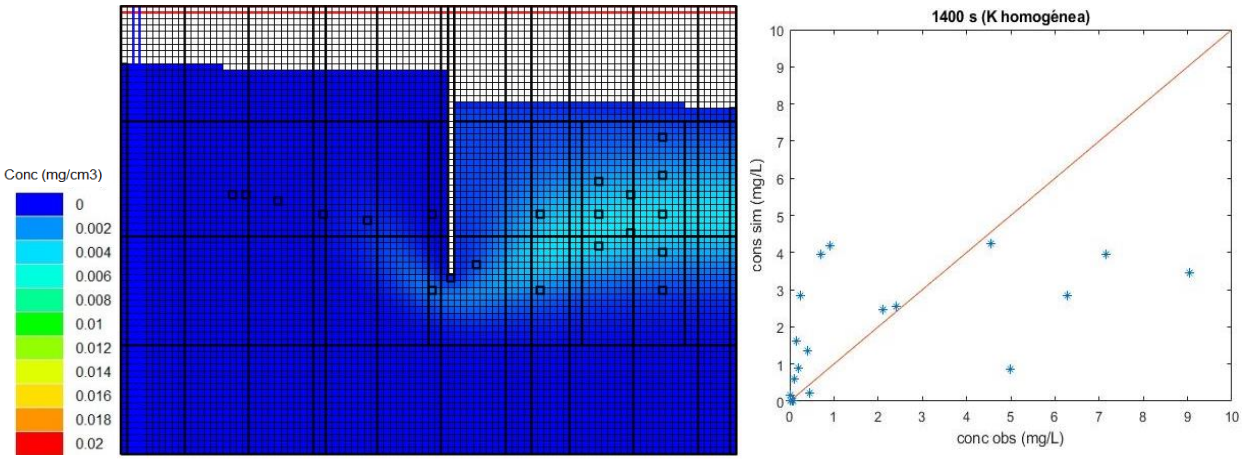

Figura 56. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de α_L, K homogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

En la tabla 13 se recogen los indicadores que comparan las concentraciones observadas con las simuladas. Se aprecia una mejora con respecto al modelo inicial en la mayoría de los pasos de tiempo, pero esta es muy pobre.

Tabla 13. Análisis de la 1ª calibración de la dispersividad longitudinal (K homogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	1º calibración de α_L	0,792	0,515	0,963	2,510
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	1º calibración de α_L	0,804	0,712	1,138	2,434

700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	1º calibración de α_L	0,722	0,716	1,782	2,828
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	1º calibración de α_L	0,577	0,789	2,500	3,384
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	1º calibración de α_L	0,314	0,536	2,475	3,453
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	1º calibración de α_L	0,324	0,183	1,524	2,265

A continuación, se realiza la segunda calibración de la dispersividad hidráulica, esta vez, empleando el campo de conductividad hidráulica calculada anteriormente (tabla 2), obteniéndose así el campo de dispersividades longitudinales que recoge la tabla 14 y figura 57. De esta manera, se obtiene una mediana de 0,193 cm, un valor esperado de 0,206 cm y una varianza de 0,011 cm^2. El máximo valor se da en la zona 4, siendo de 0,4611 cm y el menor, de 0,0291 cm, se da en la zona 17.

Tabla 14. Valores de la dispersividad longitudinal tras su calibración (*K* heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

Zona	**Dispersividad longitudinal, α_L (cm)**	**Zona**	**Dispersividad longitudinal, α_L (cm)**
1	0,3301	11	0,2195
2	0,1625	12	0,1841
3	0,4173	13	0,0815
4	0,4611	14	0,1794
5	0,1233	15	0,2750
6	0,1456	16	0,1515
7	0,1998	17	0,0291
8	0,1866	18	0,2671
9	0,2107	19	0,2216
10	0,2044	20	0,0729

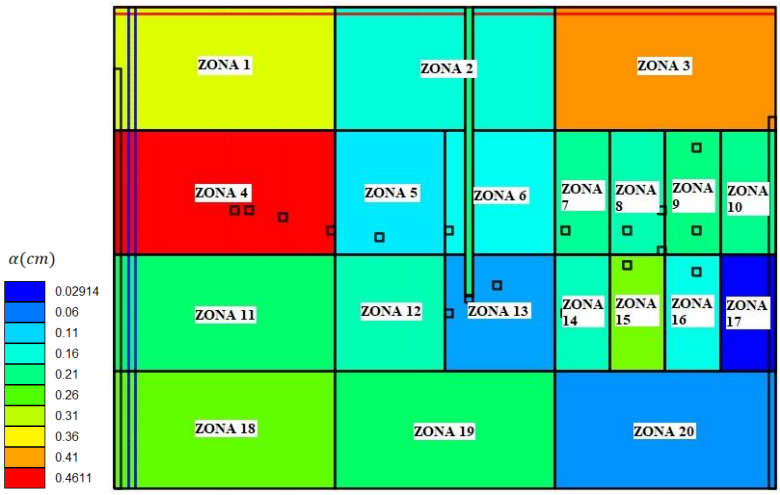

Figura 57. Distribución de la dispersividad longitudinal tras su calibración (K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

En todas las calibraciones realizadas de la dispersividad longitudinal, el máximo valor de la dispersividad longitudinal corresponde a la zona 4, lo cual provoca una mayor dispersión de la concentración del trazador y se consigue un mejor ajuste en los siguientes puntos de observación. Además, de forma general, el valor de la dispersividad longitudinal en las zonas situadas tras la barrera disminuye, simulando así una forma más compacta.

Las figuras 58 a 63 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. En los primeros pasos de tiempo, figuras 59 y 60, se aprecia una gran mejora de la curvatura inicial, ya que el punto 25 indica una concentración más similar a la observada aunque aún queda por debajo de las mediciones, de media, un 29,22 %. En cuanto a los puntos 22, 7 y 13, el ajuste es muy bueno, resultando una concentración ligeramente superior. Lo mismo ocurre con el punto 34, el cual indica una concentración mayor en un 26,62 %, a excepción de los últimos dos pasos de tiempo, en los cuales asciende mucho.

En las figuras 61 y 62 se puede analizar el paso por la barrera, el cual sigue sin reproducirse fielmente, el punto 26 indica una concentración un 71 % y un 75,88 % menor a la observada, mientras que el punto 27 muestra una concentración una concentración un 62,77 % y un 53,44 % menor, para los momentos t = 700 s y t = 900 s, respectivamente. Aun así, observando esas mismas figuras y las figuras 63 y 64, se puede decir que el giro que realiza el penacho tras sortear el obstáculo se ha mejorado en gran medida, reproduciendo una mayor inclinación ascendente. Cabe destacar que en el momento t = 1.040 s (figura 63), por un lado,

el punto 22 empeora considerablemente, mostrando una concentración un 63,21 % mayor a la observada, mientras que por otro lado, el punto 25 mejora un gran medida.

Estudiando el penacho tras la barrera, en las figuras 63 y 64, se aprecia una gran mejora de su curvatura tras la barrera, el penacho pasa por el punto 9 con un ajuste bueno y mejora mucho por los puntos 35 y 32. También mejora la posición que alcanza en el tanque de arena, la concentración en los puntos 31 y 29 sigue siendo superior, pero en menor medida que en los casos anteriormente estudiados. Además, el penacho es mucho más compacto y similar al experimental.

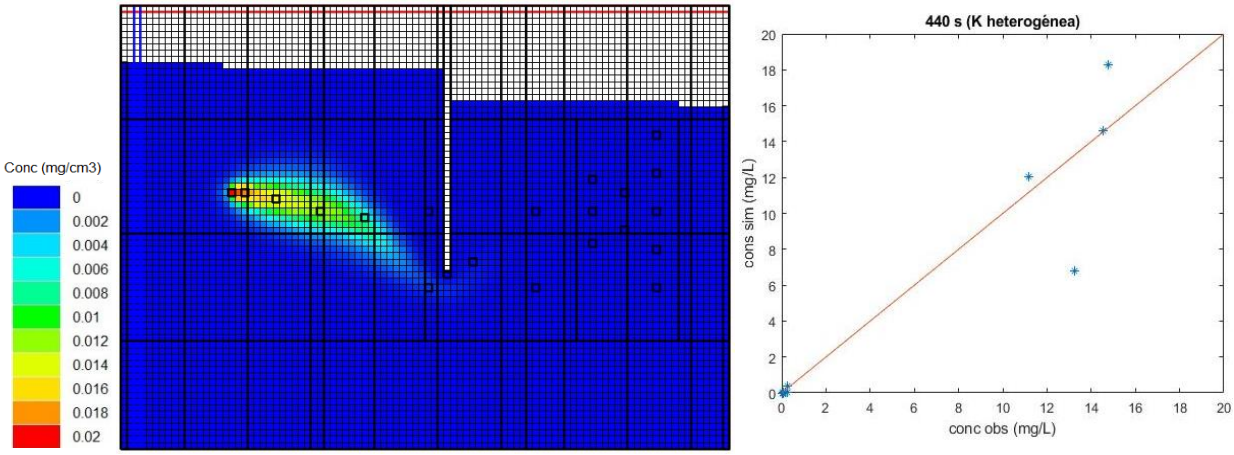

Figura 58. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

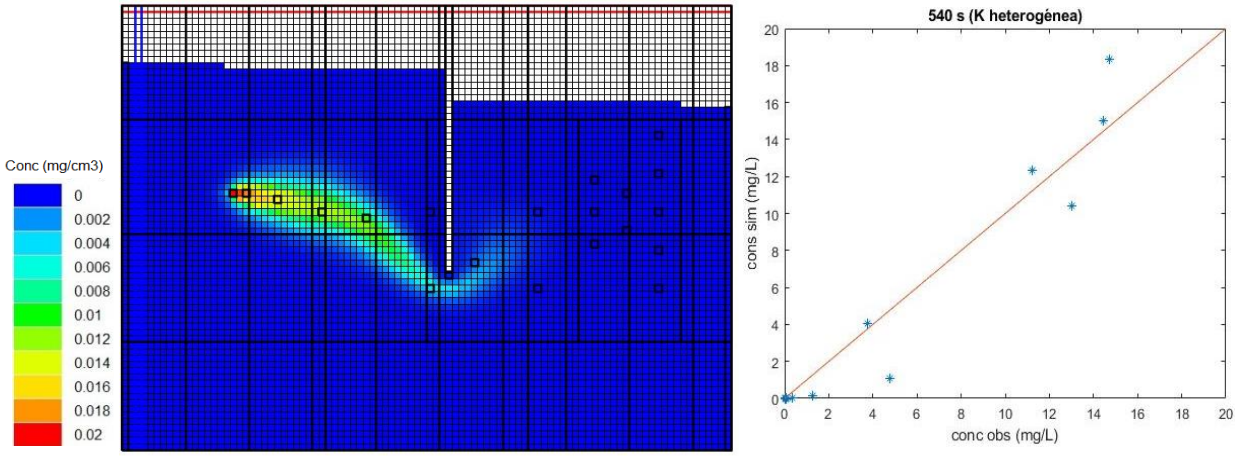

Figura 59. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

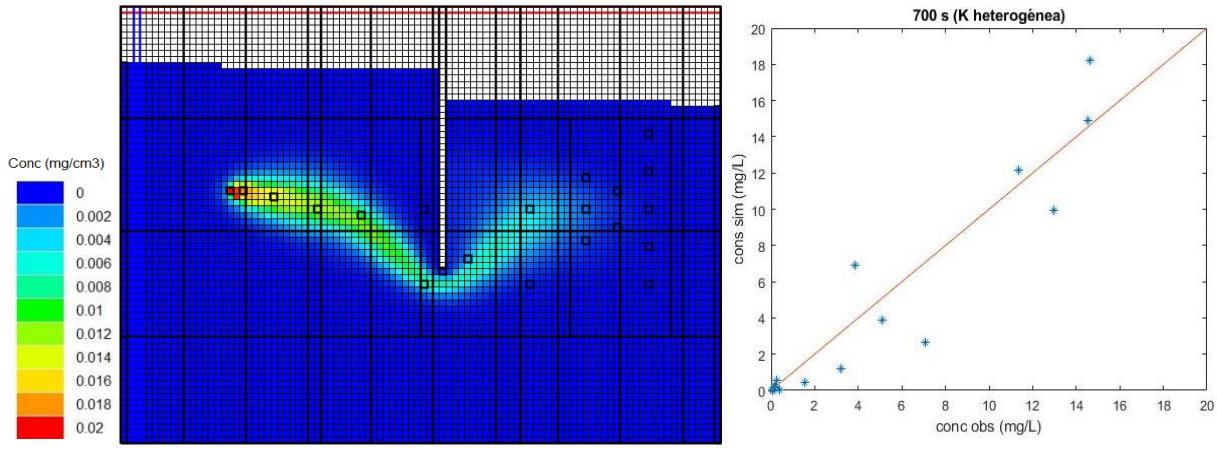

Figura 60. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

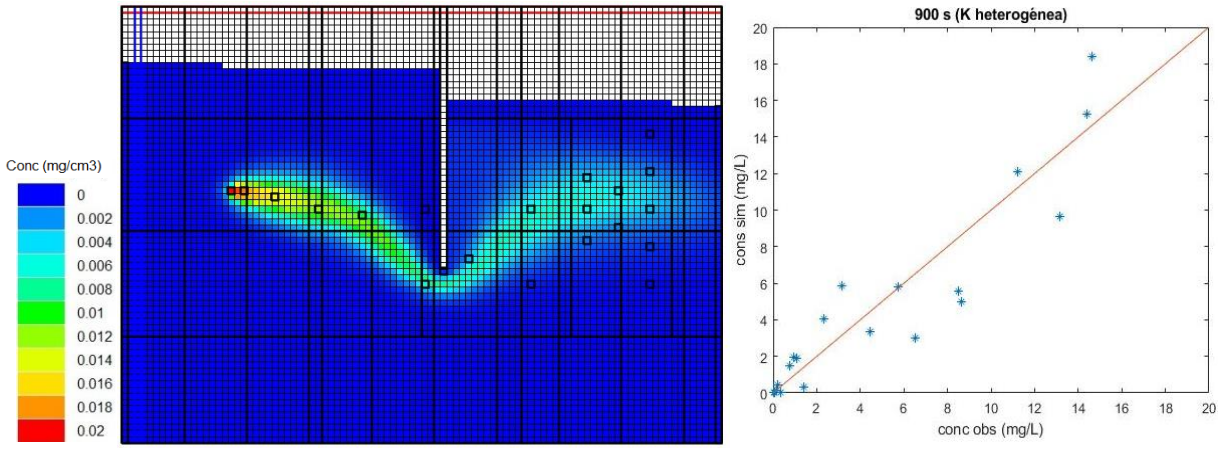

Figura 61. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

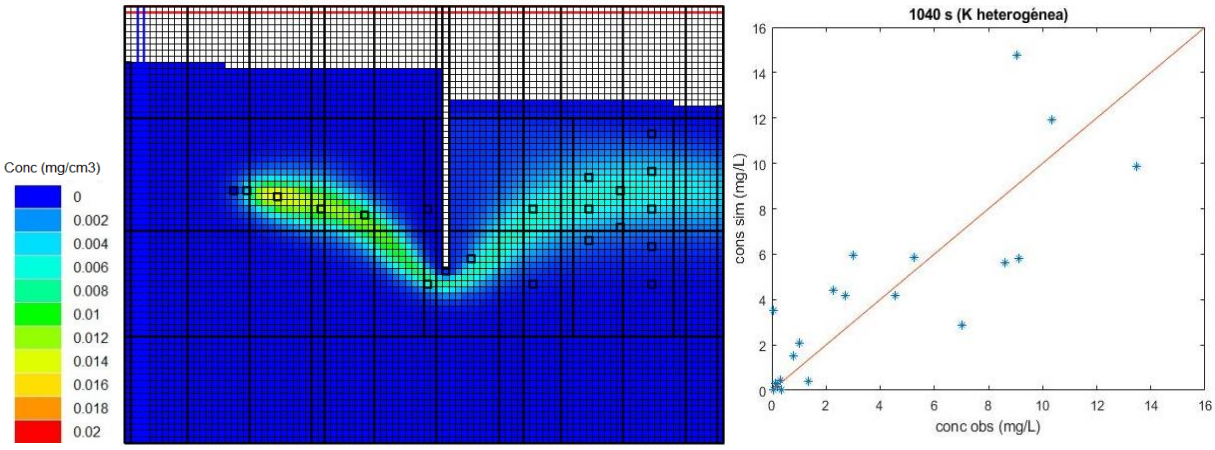

Figura 62. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

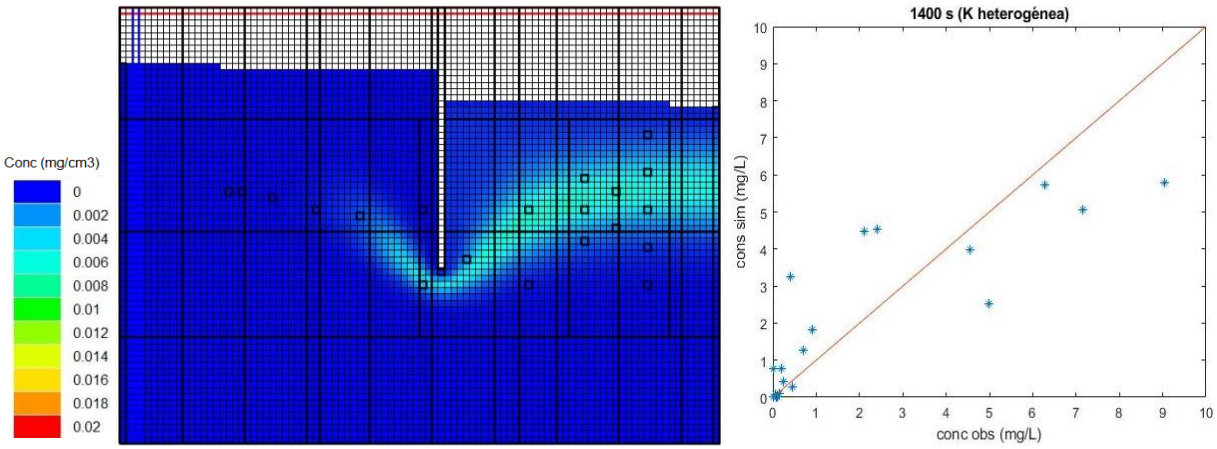

Figura 63. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de α_L, K heterogénea). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

En la tabla 15 se recogen los indicadores que comparan las concentraciones observadas con las simuladas, mostrando que se consigue un buen ajuste para todos los pasos de tiempo.

Tabla 15. Análisis de la 2ª calibración de la dispersividad longitudinal (K heterogénea) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	2º calibración de α_L	0,909	0,137	0,598	1,666
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	2º calibración de α_L	0,947	0,139	0,698	1,354
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	2º calibración de α_L	0,906	0,215	1,038	1,721
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	2º calibración de α_L	0,859	0,184	1,440	1,963
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	2º calibración de α_L	0,679	-0,206	1,799	2,413
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	2º calibración de α_L	0,729	-0,050	0,986	1,452

La tabla 16 recoge las medidas de los errores obtenidos para la totalidad de la información empleada en la calibración del parámetro, 1.419 observaciones. De esta manera, queda de manifiesto que considerar las heterogeneidades del medio da como resultado el mejor ajuste.

Cuando se considera homogénea la conductividad hidráulica, no se define correctamente el campo de velocidades v_x, tal y como se ha demostrado en el apartado anterior. De manera que el ajuste de las concentraciones se obtiene calibrando únicamente el valor de la dispersividad, lo cual resulta insuficiente y los valores que se obtienen resultan poco realistas. Empleando los valores de la conductividad hidráulica tras su calibración (tabla 2), el campo de velocidades es más certero y se obtienen valores para la dispersividad longitudinal más realistas, así como un ajuste a las concentraciones muy bueno.

Tabla 16. Comparación de errores de la concentración simulada con los distintos campos de dispersividad longitudinal. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L).

	R^2	ME	MAE	RMSE
Inicial	0,610	0,321	1,658	2,912
1º calibración de α_L, (K homogénea)	0,644	0,433	1,644	2,695
2º calibración de α_L, (K heterogénea)	0,849	-0,024	1,087	1,780

En este capítulo se ha llevado a cabo la calibración de la dispersividad longitudinal manteniendo constante, en todo momento y para la totalidad del dominio del modelo, el valor de la relación entre la dispersividad transversal vertical y dispersividad longitudinal $\left({}^{\alpha_{TV}}/_{\alpha_L}\right)$ dado por Citarella et al. (2015a). Sin embargo, Fetter (2008) expresa que la forma del penacho puede ser más sensible a dicha relación entre dispersividades que a la propia dispersividad longitudinal. De modo que se realizan varias pruebas modificando el valor de la relación entre dispersividades y se observa que se cumple lo declarado por Fetter (2008), la forma del penacho simulado es más compacta y definida al disminuir el valor de ${}^{\alpha_{TV}}/_{\alpha_L}$. Además, el valor empleado en este trabajo para dicha tasa supera el rango comúnmente empleado comprendido entre 0,05 y 0,2 (Freeze y Cherry, 1979).

3.4. Falta de estanqueidad en la tablestaca

Con el propósito de inducir tortuosidad en las líneas de flujo, se insertó una barra vertical de plástico a modo de tablestaca, con una longitud de 42 cm y cuya disposición en el interior del tanque de arena queda ilustrada en la figura 15. El diseño de esta barrera supone que la barra de plástico ocupa la totalidad del espesor del tanque de arena (10 cm). No obstante, al tratarse de un elemento independiente al resto del tanque que, además, es colocado tras el

llenado del mismo con las cuentas de vidrio, el sellado entre dicha barra y las paredes del tanque podría no ser perfecto. De ser así, podrían existir espacios a través de los cuales se produce cierta filtración de agua, afectando así a las líneas de flujo.

De manera que, en este apartado, se estudia la hipótesis en la cual se considera que la tablestaca no es completamente estanca. Para ello, se modifican los modelos numéricos de flujo y transporte, activando la zona que corresponde a la barrera, y se indican como parámetros a optimizar por el software PEST, la conductividad hidráulica y la dispersividad longitudinal de la zona que corresponde a la barrera. Como límites superior e inferior, entre los cuales el software PEST realiza los cálculos iterativos, para la conductividad hidráulica se estima el valor de 0,01 cm/s y 0 cm/s. El máximo valor de la conductividad hidráulica se ha estipulado tras realizar varias pruebas y comprobar que un valor superior supondría la anulación de la tortuosidad de las líneas de flujo, mientras que el valor mínimo corresponde al caso en el que la estanqueidad es total. Para la dispersividad longitudinal, se consideran como límite superior e inferior los valores de 1 cm y 0 cm, siguiendo el razonamiento expuesto en el apartado anterior.

La primera calibración se realiza partiendo del modelo bidimensional inicial, es decir, aquel en el cual tanto la conductividad hidráulica como la dispersividad longitudinal son homogéneas para todo el modelo, con valores de 0,58 cm/s y 0,212 cm, respectivamente. De esta manera, el resultado obtenido queda recogido en la tabla 17.

Tabla 17. Valores de la conductividad hidráulica y la dispersividad longitudinal para la zona de la barrera tras su calibración (K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

Conductividad hidráulica, K (cm/s)	0,0041
Dispersividad longitudinal, α_L (cm)	0,2652

Las figuras 64 a 69 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. Tal y como ocurre en las hipótesis anteriormente analizadas en las que se considera el medio homogéneo, el penacho simulado no reproduce la curvatura inicial observada en laboratorio, como puede observarse en los primeros pasos de tiempo (figuras 64 y 65), donde la concentración en el punto 25 es un 42,54 % y un 46,91 % inferior a la observada, respectivamente. Los puntos cercanos a la fuente, puntos 34, 22 y 7, dan valores superiores durante todo el tiempo simulado, aun así el ajuste mejora.

Asimismo, se reproduce más fielmente el paso del penacho por debajo de la barrera (figuras 65, 66 y 67), aunque siguen dándose discrepancias. El punto 13 muestra de forma general un buen ajuste, aunque la concentración es de media un 35,4 % superior a la observada. El punto 26 obtiene un mejor resultado, pero indica de media una concentración un 35,77 % mayor. Con respecto al punto 27, la concentración es de media un 37,42 % inferior a la observada, lo cual se debe a la no correcta reproducción del giro que el penacho adquiere al sortear la tablestaca. En el primer paso de tiempo, los puntos 13 y 26 indican una concentración muy superior, pues el transporte simulado va más avanzado que el observado.

Además, debido a ello, el penacho tampoco alcanza la posición que se observa el laboratorio una vez traspasado el obstáculo, como se aprecia en las figuras 68 y 69. El punto 9 indica de media una concentración un 33,43 % inferior a la observada, así como los puntos 35 y 32 donde la concentración es menor, mientras en los puntos 31, 33 y 29 esta es mayor. También es notable que la forma del penacho tras la barrera no se asemeja a la del penacho experimental, resulta muy poco definida.

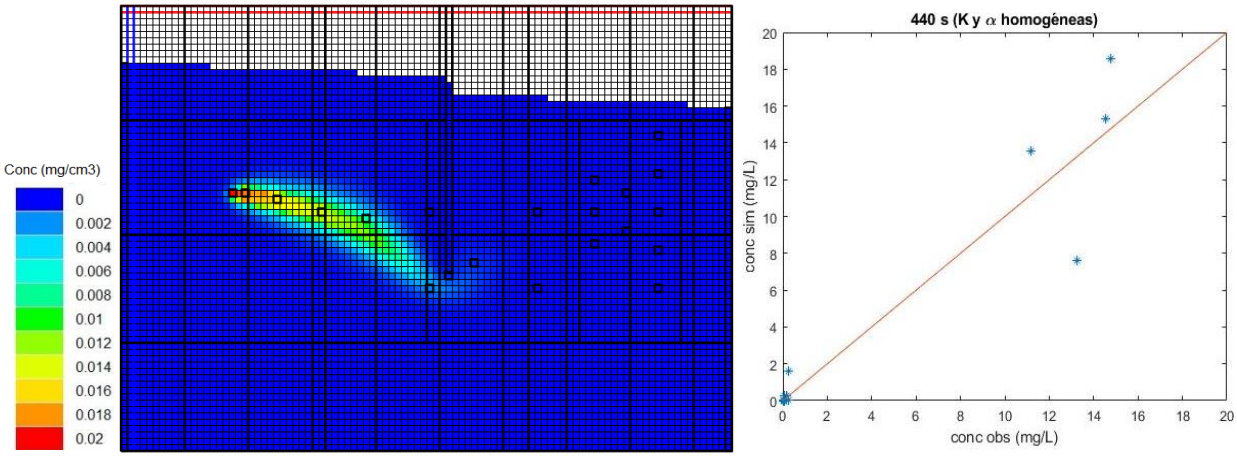

Figura 64. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

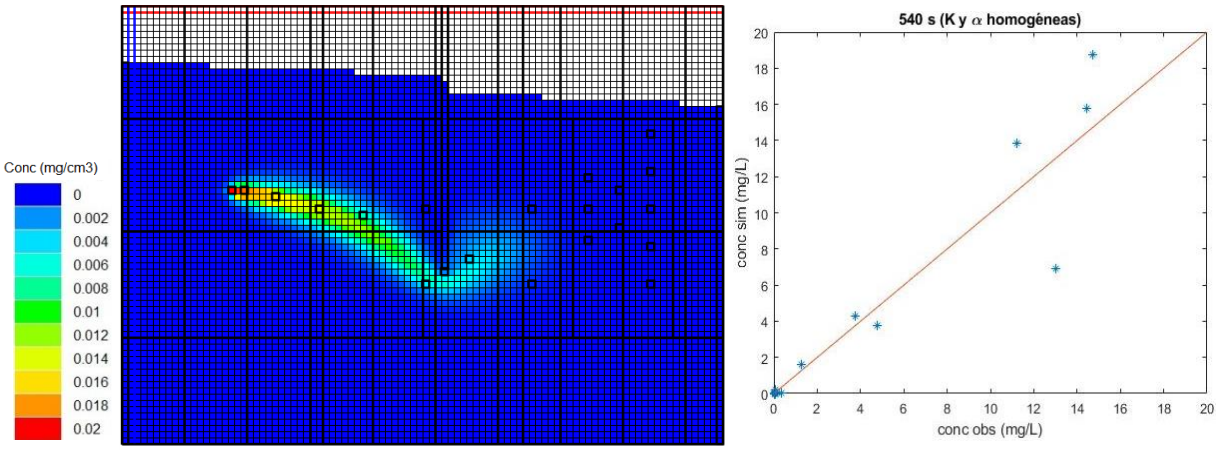

Figura 65. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

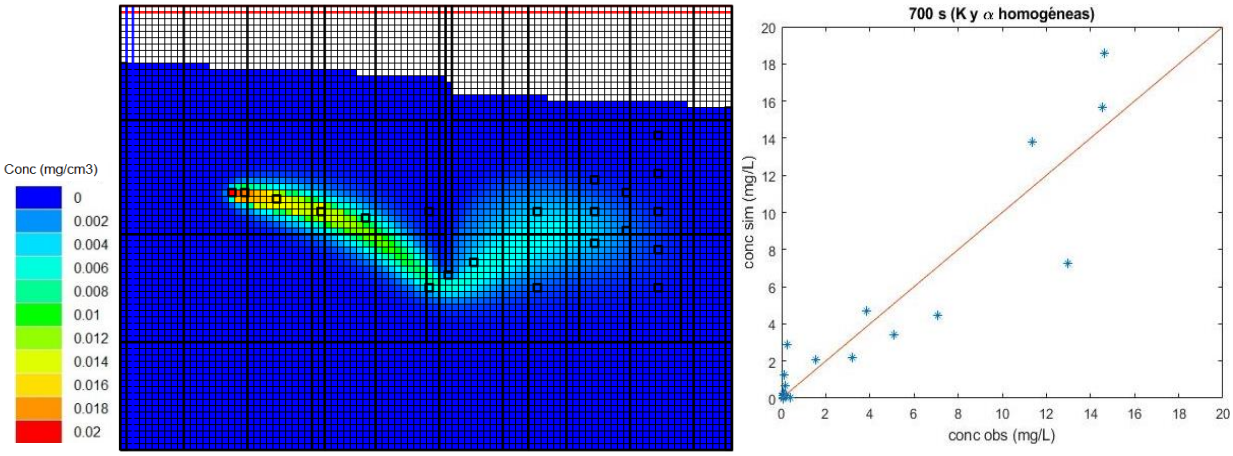

Figura 66. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

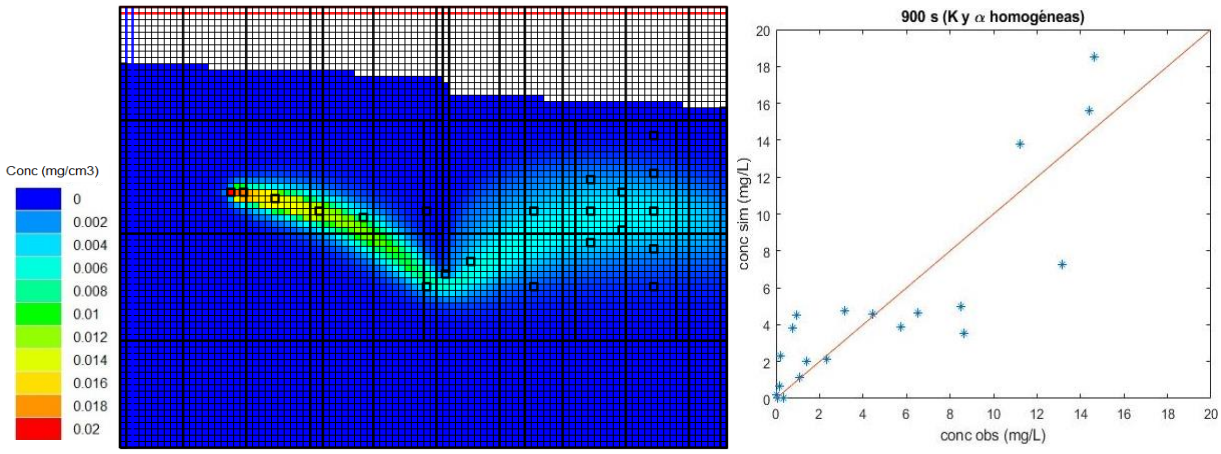

Figura 67. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

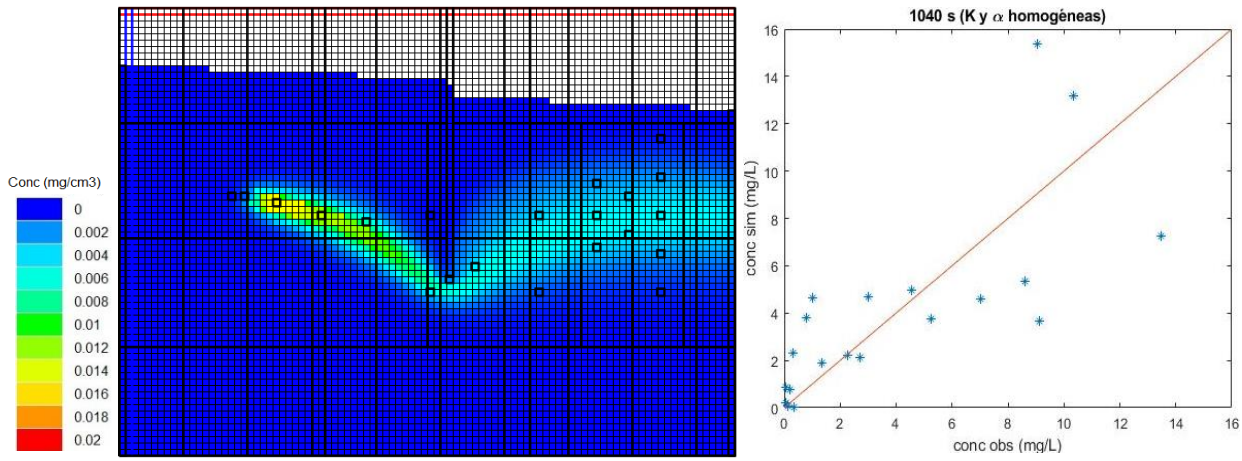

Figura 68. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

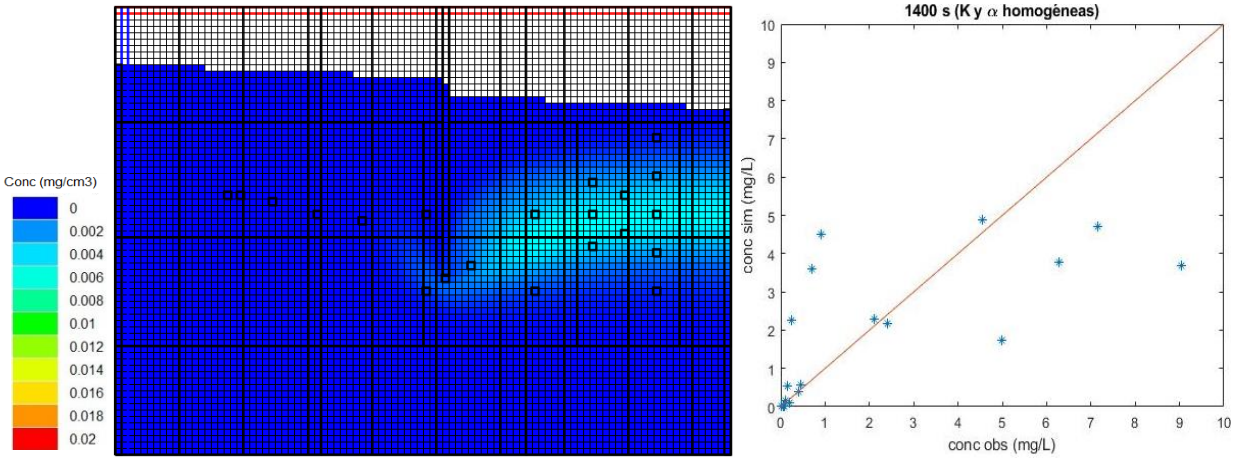

Figura 69. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (1ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L homogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

La tabla 18 recoge los indicadores que comparan las concentraciones observadas con las simuladas para los pasos de tiempo estudiados y a pesar de que se siguen produciendo las discrepancias iniciales, se ha reducido el error. No obstante, los últimos pasos de tiempo siguen mostrando un ajuste pobre.

Tabla 18. Análisis de la 1ª calibración de la filtración a través de la barrera (K y α_L homogéneas) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	1ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,918	-0,115	0,750	1,651
540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	1ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,905	-0,052	0,846	1,783
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	1ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,874	-0,095	1,258	1,955
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	1ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,756	-0,032	1,915	2,580
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	1ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,550	-0,095	2,093	2,885
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	1ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,496	0,221	1,184	1,968

La segunda calibración se realiza considerando el campo de conductividad hidráulica heterogéneo calculado en el segundo apartado de este capítulo (tabla 2 y figura 19) y el campo de dispersividad longitudinal heterogéneo calculado en el tercer apartado (tabla 14 y figura 57). De esta manera, el resultado obtenido queda recogido en la tabla 19.

Tabla 19. Valores de la conductividad hidráulica y la dispersividad longitudinal para la zona de la barrera tras su calibración (K y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

Conductividad hidráulica, K (cm/s)	0,002
Dispersividad longitudinal, α_L (cm)	0,2324

Las figuras 70 a 75 muestran el penacho simulado y la gráfica de valores simulados versus observados de la concentración del trazador para los pasos de tiempo de estudio. Tal y como las figuras 70 y 71, el penacho se aproxima a la barrera pasando por el punto 25, ajustándose

mejor a la curvatura observada. El ajuste de los puntos 22 y 7 es muy bueno y se mejora mucho la concentración en el punto 25, donde sigue siendo inferior a la observada pero se ha logrado aumentar en gran medida su concentración, siendo ahora, de media, un 76,12 % menor.

De igual manera, el penacho simulado consigue pasar a una menor distancia al sortear la barra vertical y se consigue reproducir mucho más verazmente el giro ascendente tras sortearla, como se observa en las figuras 71, 72 y 73. Se consigue que el penacho pase por el punto 27, donde la concentración sigue siendo menor a las observaciones, pero con mejor ajuste, en este caso muestra una concentración un 16,96 % menor a la observada.

Gracias a la buena simulación del giro tras la barrera, la curvatura que adquiere el penacho es mucho más similar a la del penacho experimental, pasando sobre los puntos 9 y 32, tal y como se observa en las figuras 73, 74 y 75. El ajuste del punto 9 es muy bueno y los puntos 35 y 32 indican una mayor concentración que la de que se consigue con el modelo inicial, aunque sigue siendo baja, un 42,6 % y un 37,32 %. Por otro lado, las concentraciones en los puntos 31, 33 y 29 también mejoran, pues se reducen con respecto al modelo inicial, pero siguen siendo elevadas, un 36,18 %, un 73 % y un 28,53 % de media y respectivamente.

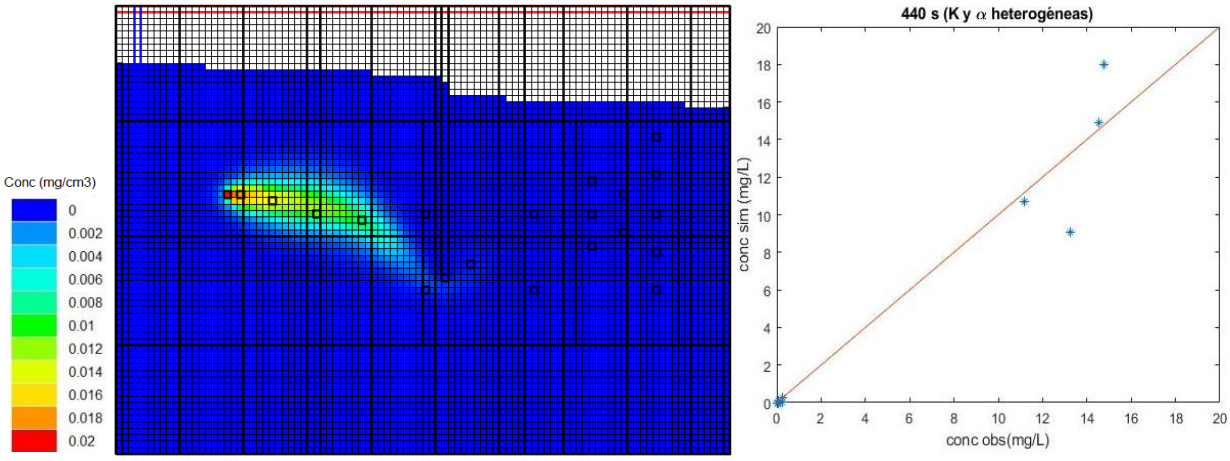

Figura 70. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

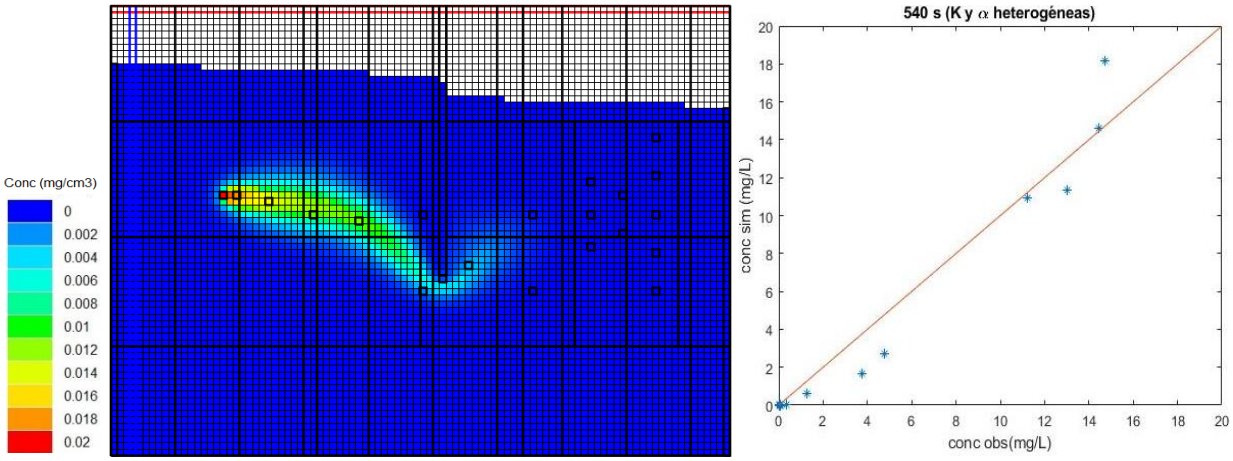

Figura 71. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera K, y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

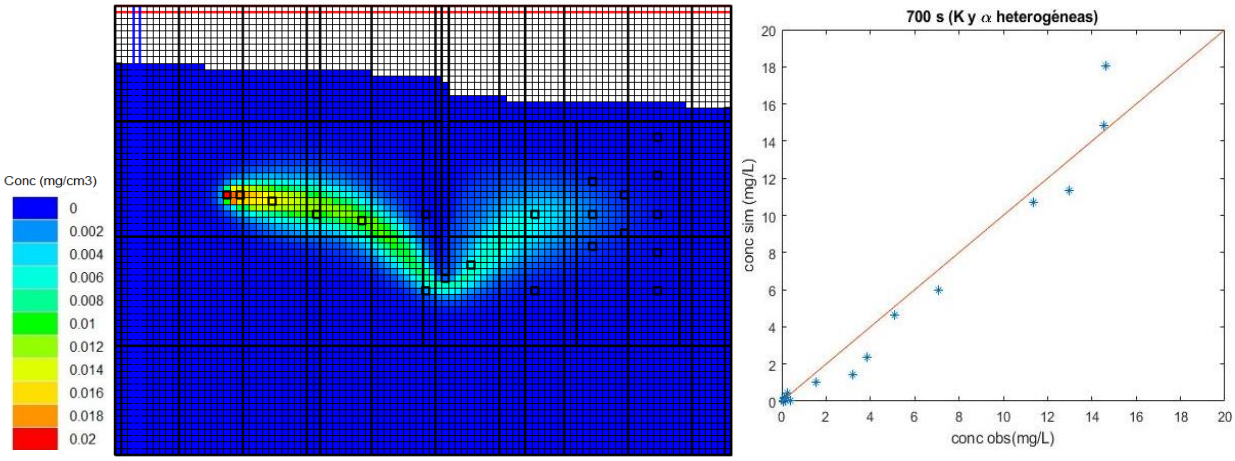

Figura 72. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

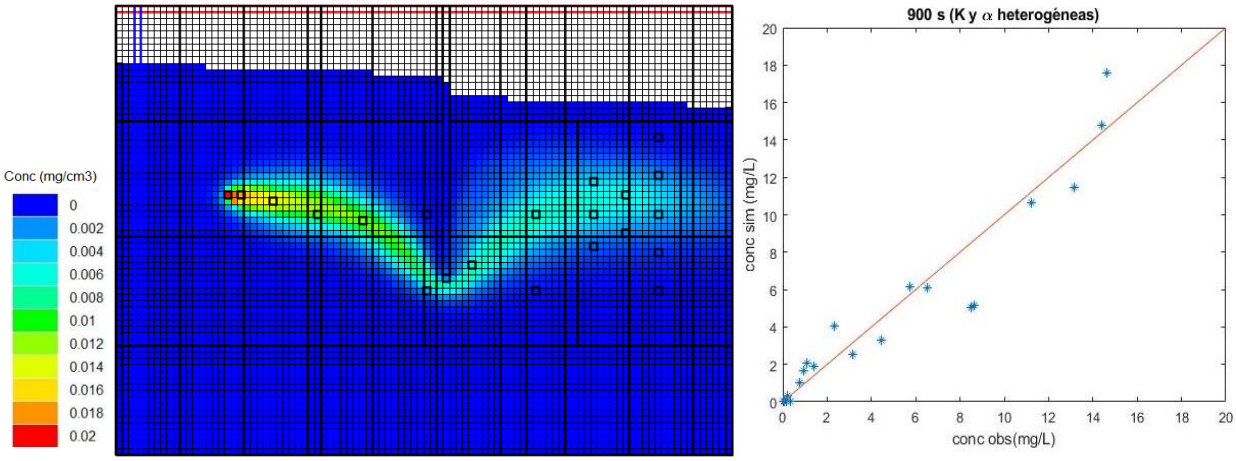

Figura 73. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

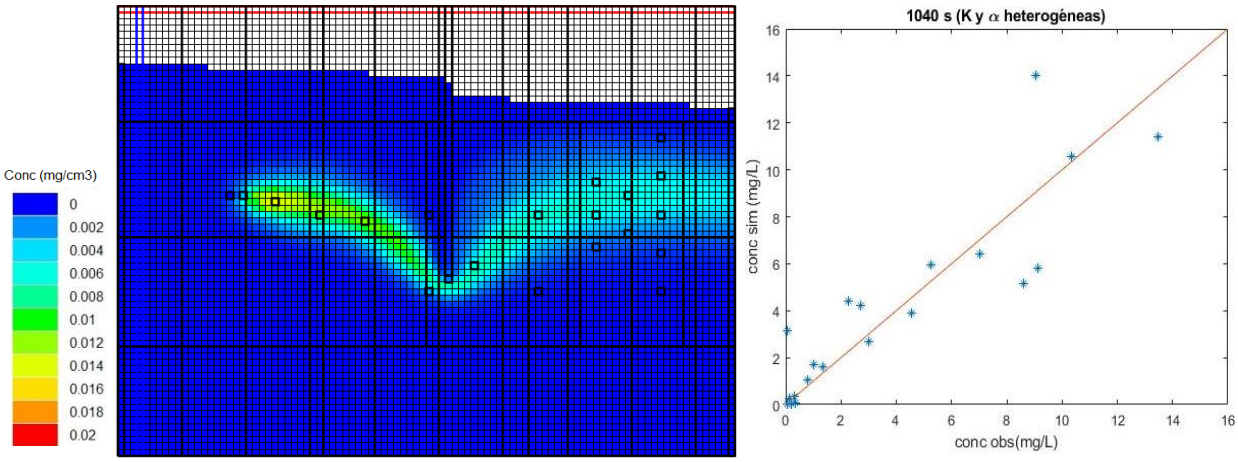

Figura 74. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

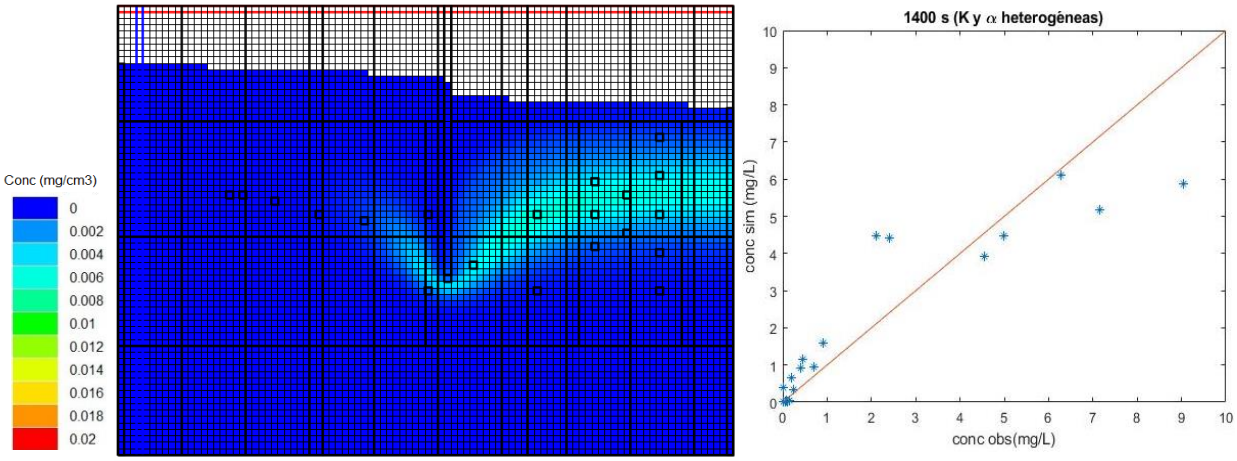

Figura 75. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (2ª calibración de la filtración a través de la barrera, K y α_L heterogéneas). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC.

La tabla 20 recoge los indicadores que comparan las concentraciones observadas con las simuladas, se puede decir que se ha logrado un ajuste muy bueno, incluso en los últimos dos pasos de tiempo analizados.

Tabla 20. Análisis de la 2ª calibración de la filtración a través de la barrera (K y α_L heterogéneas) y comparación con respecto al modelo homogéneo inicial por cada paso de tiempo de estudio. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L).

		R^2	ME	MAE	RMSE
440 s	**Inicial**	0,759	0,319	0,927	2,759
	2ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,953	0,092	0,455	1,192

540 s	**Inicial**	0,751	0,466	1,187	2,804
	2ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,964	0,204	0,568	1,099
700 s	**Inicial**	0,681	0,485	1,754	3,125
	2ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,965	0,215	0,632	1,060
900 s	**Inicial**	0,543	0,576	2,509	3,644
	2ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,918	0,191	0,993	1,466
1.040 s	**Inicial**	0,248	0,406	2,745	3,895
	2ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,794	-0,148	1,253	1,879
1.400 s	**Inicial**	0,343	0,256	1,454	2,240
	2ª calibración de la filtración a través de la barrera	0,841	-0,034	0,712	1,139

Finalmente, la tabla 21 recoge las medidas de los errores obtenidos para la totalidad de los datos empleados en la optimización de la hipótesis de falta de estanqueidad en la tablestaca, 1.419 observaciones. Se puede decir que considerando las heterogeneidades del medio (K y α_L heterogéneas) junto con la filtración entre las paredes del tanque y la barra vertical de plástico se consigue un buen ajuste y un penacho más similar al penacho experimental. Además, cabe destacar, que modificando únicamente el concepto de la barrera con respecto al modelo inicial, se consigue un ajuste considerablemente bueno, muy similar al obtenido en la primera hipótesis, en la que considera heterogénea la conductividad hidráulica.

Tabla 21. Comparación de errores de la concentración simulada con las distintas suposiciones de cómo actúa la barrera. Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: MOC (mg/L).

	R^2	ME	MAE	RMSE
Inicial	0,610	0,321	1,658	2,912
1ª calibración de la filtración a través de la barrera (K y α_L homogéneas)	0,786	-0,017	1,302	2,141
2ª calibración de la filtración a través de la barrera (K y α_L heterogéneas)	0,899	0,002	0,817	1,438

3.5. Transporte tridimensional

En los apartados anteriores, se ha llevado a cabo el estudio del transporte en dos dimensiones, para lo cual, los valores de la concentración obtenidos mediante las imágenes de la pared fotografiada del tanque de arena se consideran como valor representativo de la concentración en la totalidad del espesor del tanque. Por tanto, se asume que la concentración se encuentra distribuida de manera homogénea sobre el eje y. Esta simplificación se realiza teniendo en cuenta que el inyector por el cual se introduce el trazador en el medio poroso ocupa los 10 cm de ancho del tanque de arena. No obstante, se decide construir un modelo tridimensional del experimento y analizar los resultados obtenidos.

Inicialmente, se considera que el medio es homogéneo e isótropo, las ecuaciones de flujo y transporte expuestas anteriormente se deben modificar para que tengan en cuenta dichos fenómenos sobre el eje y. Además, se considera que el medio poroso es homogéneo. La resolución de la ecuación del flujo se realiza mediante MODFLOW 2005 (Harbaugh, 2005). Para el flujo en estado estacionario se emplea

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \,, \tag{13}$$

y para el flujo en estado transitorio,

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} + W = S_S \frac{\partial h}{\partial t} \,, \tag{14}$$

siendo h la altura piezométrica [L], W el flujo volumétrico por unidad de volumen que representa la fuente [1/T], S_S el almacenamiento específico [1/T] y t el tiempo [T].

Para la ecuación de transporte, se emplea MT3DMS (Zheng y Wang, 1999), utilizando los paquetes de advección y dispersión. Para un soluto conservativo se debe resolver

$$\left[D_X \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right] - \left[\frac{\partial}{\partial x}(v_x C) + \frac{\partial}{\partial y}\left(v_y C\right) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z C)\right] = \frac{\partial C}{\partial t} \,, \tag{15}$$

siendo D_X, D_y y D_z los coeficientes de dispersión hidrodinámica longitudinal sobre su respectivo eje [L^2/T], C la concentración [M/L^3] y t el tiempo [T].

Para la elaboración del modelo 3D se consideran las mismas condiciones iniciales y de contorno empleadas en el modelo 2D, las cuales quedan descritas en el segundo apartado del

segundo capítulo de este trabajo. De igual manera, se emplea una malla de diferencias finitas con una discretización de 96 columnas (dirección x, sentido longitudinal del tanque), 70 capas (dirección z, altura del tanque) y 10 filas (dirección y, ancho del tanque). Por lo tanto, el tamaño de cada celda es de $(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = (1, 1, 1)$ cm.

Tal y como se ha explicado anteriormente, las medidas tomadas en laboratorio corresponden a una de las paredes del tanque de arena, de modo que los puntos de observación en el modelo numérico se colocan en la fila 10, que representa dicha pared.

Las figuras 76 a 83 muestran el desarrollo del penacho obtenido mediante la modelación 3D para los pasos de tiempo de estudio. Comparando dicho resultado con el obtenido con el modelo 2D inicial, figuras 2, 6, 8, 10, 12, 13 y 14, se comprueba que es prácticamente el mismo.

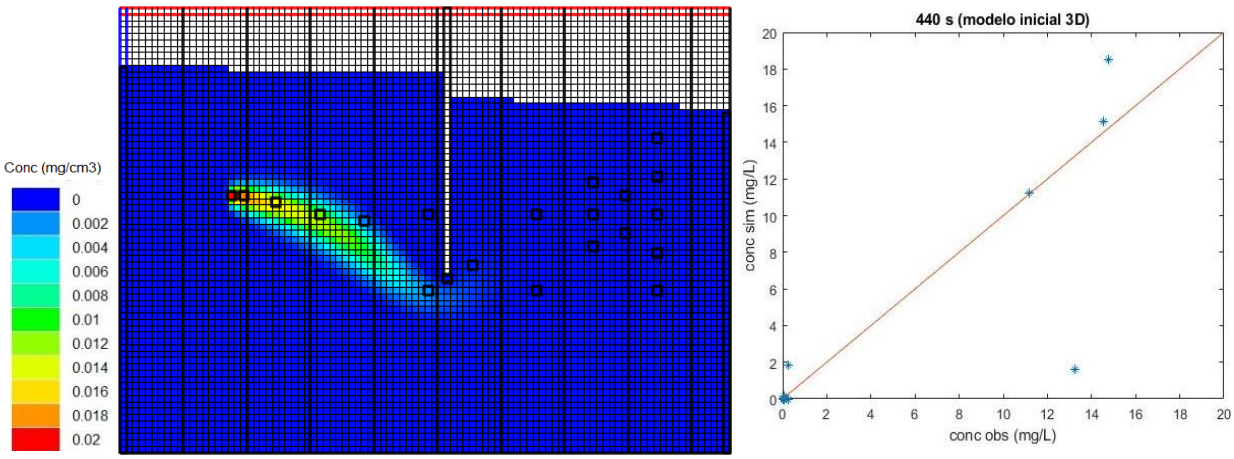

Figura 76. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 440 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

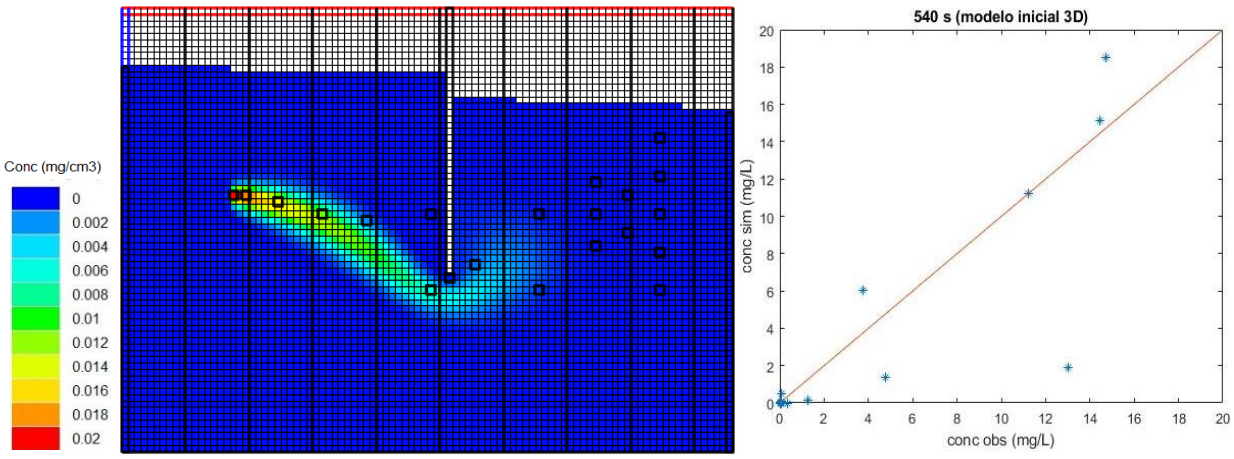

Figura 77. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 540 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

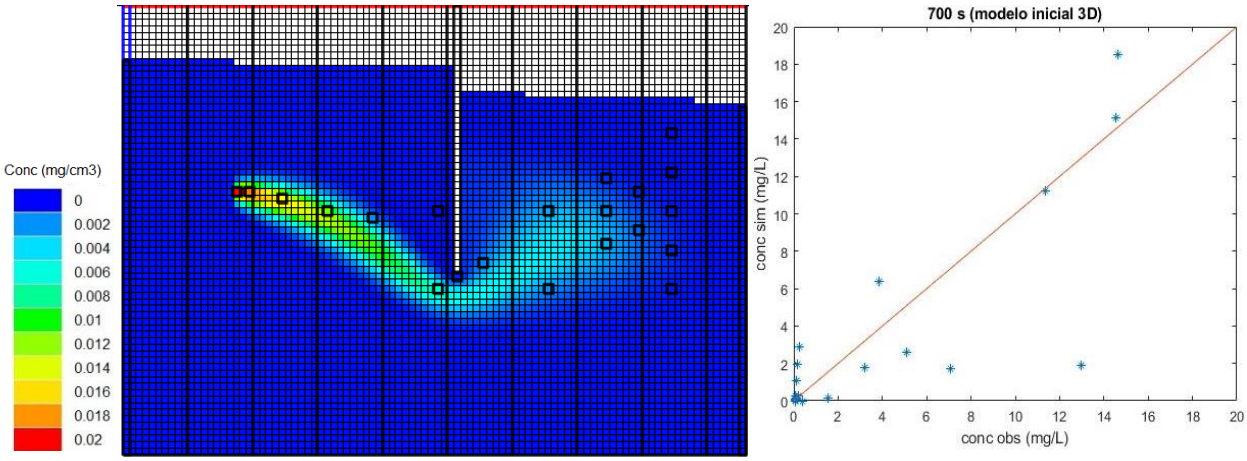

Figura 78. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 700 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

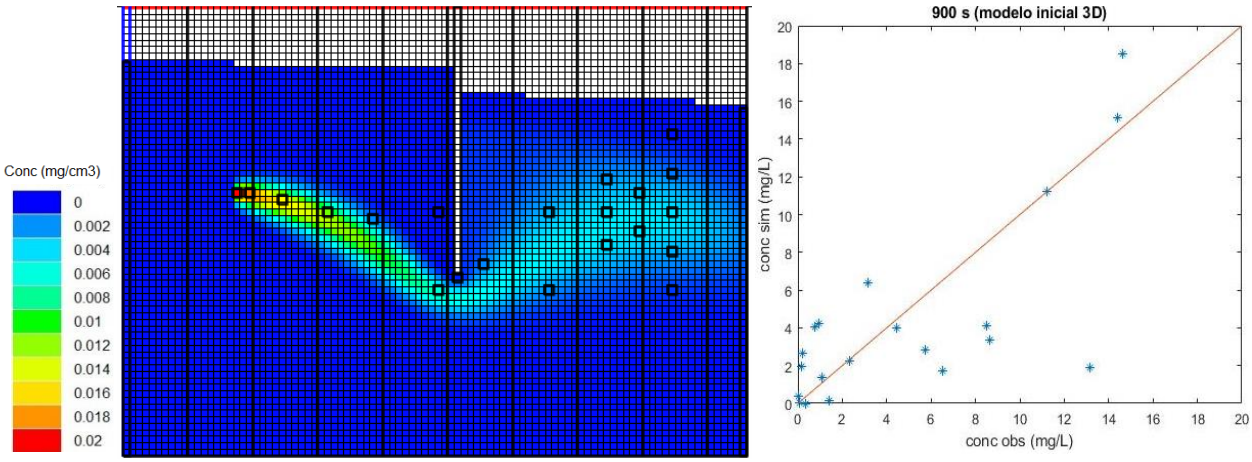

Figura 79. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.040 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

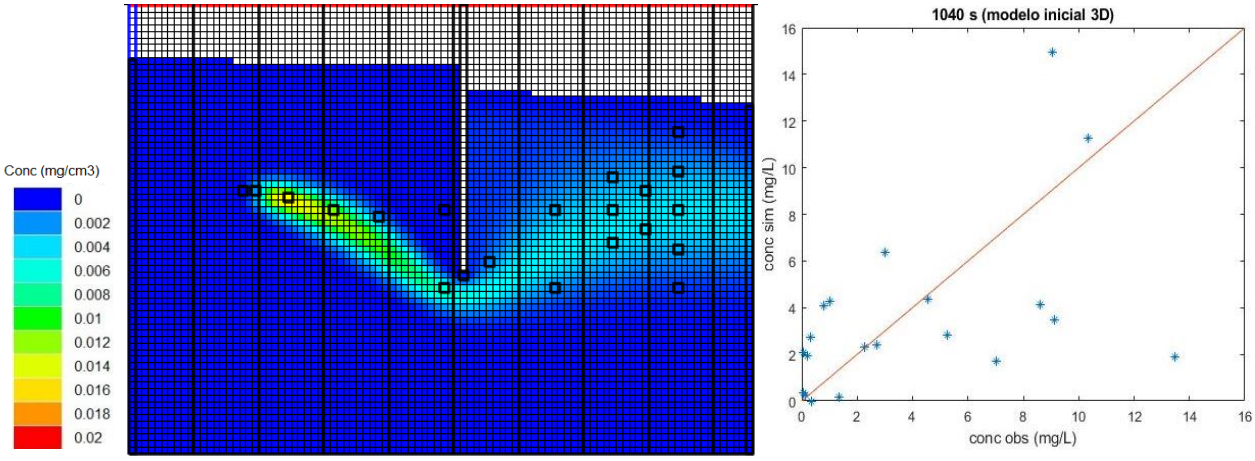

Figura 80. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 900 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD**.**

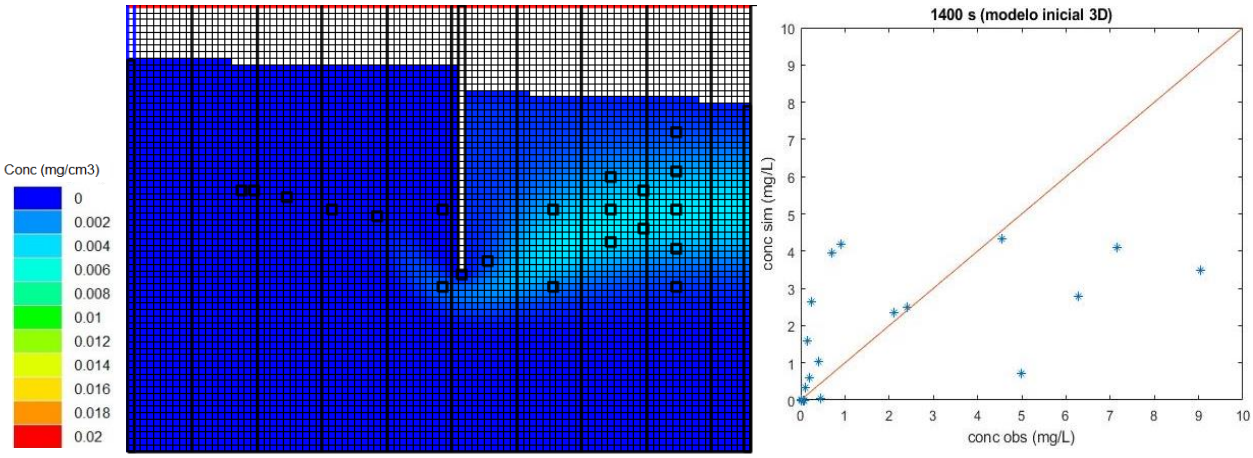

Figura 81. Penacho y gráfica de valores de concentración observada versus simulada en el momento t = 1.400 s. (modelo inicial 3D). Método de resolución numérica de la ecuación de transporte: TVD.

En vista de la gran similitud entre los resultados del modelo 3D y el modelo 2D, se contrastan las concentraciones en los puntos de observación. Como muestra la figura 82, el resultado es prácticamente el mismo, se obtiene una diferencia media absoluta de 2,867E-06 mg/cm^3 y el coeficiente de determinación es igual a 0,999. Asimismo, se comparan las concentraciones obtenidas en la fila 10, que representa la pared del tanque de arena, con las de la fila 5, centro del tanque de arena, del modelo 3D. El resultado se recoge en la figura 83, donde la diferencia media absoluta es de 2,877E-07 mg/cm^3 y el coeficiente de determinación es 0,999.

Así, se corrobora que, efectivamente, la asunción realizada por los autores Citarella et al. (2015a) es correcta, al tratarse de un espesor muy pequeño (10 cm) y emplear un sistema de inyección que ocupa la totalidad del mismo, el experimento consigue reproducir fielmente un caso de transporte bidimensional.

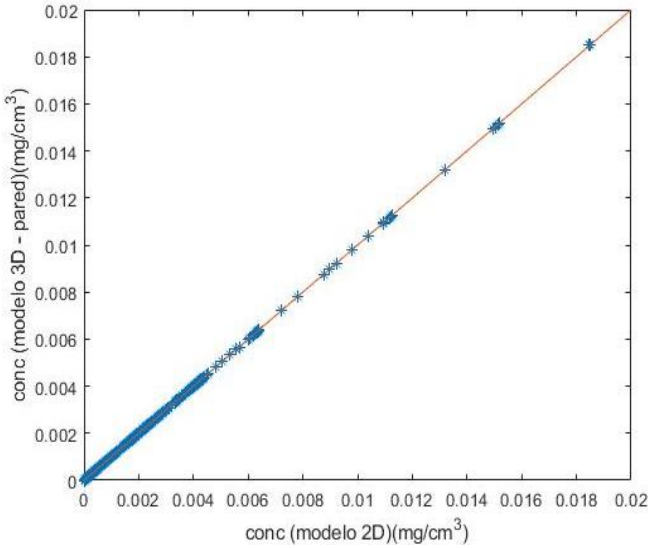

Figura 82. Gráfica de valores de concentración modelo 2D – modelo 3D (pared).

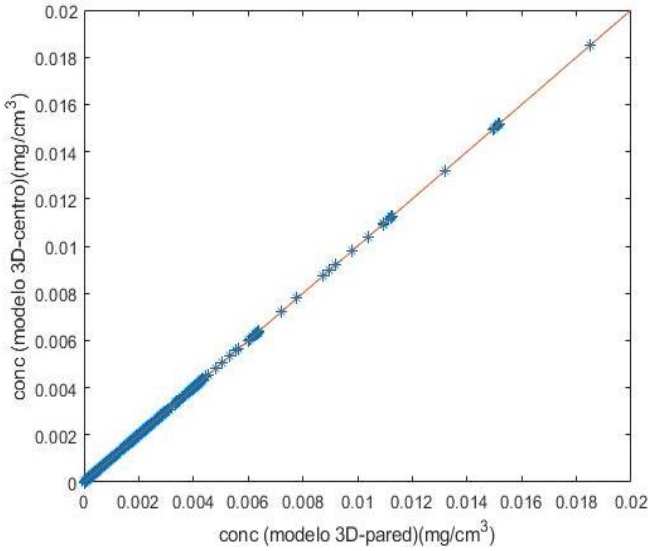

Figura 83. Gráfica de valores de concentración modelo 3D (pared) – modelo 3D (centro).

4. Síntesis y conclusiones

El Departamento de Ingeniería Civil, Ambiental, Territorial y Arquitectura de la Universidad de Parma (DICAteA), Italia, llevó a cabo un experimento de transporte de masa en un tanque de arena de laboratorio, el cual se reprodujo mediante un modelo numérico bidimensional. Al comparar los penachos de contaminación, observado y simulado, se apreciaron ciertas discrepancias entre ambos, a pesar de que los parámetros, variables externas y condiciones de contorno e iniciales son perfectamente conocidas y, por lo tanto, no deberían diferir entre sí.

En este trabajo se estudian varias hipótesis para analizar la causa de la discordancia entre ambos penachos. Por un lado, se estudia la posible heterogeneidad del medio, mediante la calibración por zonas de los parámetros de flujo y transporte, conductividad hidráulica y dispersividad longitudinal. Por otro lado, se analiza la posible filtración de agua a través del contacto entre la barra vertical, que actúa de tablestaca, y las paredes del tanque de arena. Finalmente, se analiza la existencia de una componente tridimensional en el transporte. Para la calibración de los parámetros, se hace uso de un modelo inverso que utiliza la técnica de optimización método de mínimos cuadrados ponderados, como es el software PEST. Se emplean las mediciones de la concentración un número de puntos fijos para encontrar el conjunto de valores de los parámetros que mejor las reproduzcan. Asimismo, se realiza la división del dominio del modelo en zonas, cada una definida por un valor distinto de los parámetros estudiados.

4.1. Conclusiones

Tras el análisis de las distintas hipótesis se llega a un modelo numérico que reproduce mejor las concentraciones observadas que el modelo homogéneo con condiciones de contorno ideales, pero sin que la reproducción de las concentraciones llegue a ser perfecta. A este respecto, y antes de analizar los resultados del estudio, cabe mencionar ciertos aspectos que afectan la exactitud de los valores de concentración obtenidos mediante el método de análisis de fotografías. Por un lado, Cupola (2016) expone que el aire atrapado entre las cuentas de vidrio que conforman el medio poroso modifica la intensidad de la luminosidad de la solución de fluoresceína de sodio, provocando así errores en el proceso de calibración de la relación entre la intensidad de la luminosidad y la concentración. Por otro lado, se asume un valor

medio como velocidad del flujo específico, aunque, una vez iniciada la inyección del trazador, dicha velocidad cambia, al ser influenciada por el caudal de entrada del trazador. La afección del flujo en la fuente sobre el dominio total del modelo puede ser despreciable, ya que se trata de un caudal muy pequeño; sin embargo, sí será notable en las proximidades de la misma. De manera que esta simplificación puede suscitar falta de confianza en los resultados obtenidos mediante la calibración luminosidad-concentración del trazador.

En el artículo de Zhou et al. (2014) se analizan las diferentes metodologías y enfoques de la modelación inversa, pudiendo concluir que, comúnmente, se hace uso de observaciones de alturas piezométricas para la identificación de la conductividad hidráulica , como es el caso de Zhou et al. (2011) y Xu et al. (2013), quienes defienden el uso de información sobre alturas piezométricas transitorias. En cuanto a la simulación de transporte de masa, incluir información piezométrica junto a mediciones de la concentración permite mejorar las predicciones tanto de transporte como de flujo, obteniéndose una reproducción más fidedigna del penacho, tal y como indican Christiansen et al. (1995), Hendricks Franssen et al. (2003) y Li et al. (2012).

En este estudio, al carecer de información sobre la piezometría, el campo de conductividad hidráulica se optimiza ajustando los valores de la concentración observada en laboratorio, lo cual implica realizar el ajuste de la velocidad real del flujo o de filtración. Por lo tanto, la incorporación en el modelo inverso de PEST de mediciones de alturas piezométricas como observaciones beneficiaría la calibración del campo de conductividad hidráulica, ya que estas podrían preajustarse considerando únicamente la información piezométrica. Después, una vez calibrados los valores de la conductividad hidráulica, se ejecutaría de nuevo PEST para reproducir las mediciones de concentración mediante la optimización del campo de dispersividad longitudinal. Otra opción sería la calibración de la conductividad hidráulica empleando ambos tipos de mediciones, tanto piezometría como concentración.

La calibración de parámetros se realiza mediante el uso de un modelo inverso. A partir de una serie de mediciones se debe calcular el conjunto de parámetros que optimice el ajuste de las predicciones de la simulación a las observaciones. Para llevar a cabo este trabajo, el uso del software de estimación de parámetros PEST ha resultado esencial. Es una herramienta muy práctica y de gran potencial, cuyo uso puede resultar de gran valía no solo a la hora de constuir modelos de aguas subterráneas sino también para mejorar modelos ya existentes.

Durante el proceso de optimización, se advirtió la gran dificultad para ajustar el valor de la concentración de los puntos más cercanos a la fuente, siendo estos los puntos de observación 34, 22 y 7. Las concentraciones simuladas en las coordenadas de dichos puntos resultan mayores que las observadas en todos los casos estudiados. Ciertamente, se consigue obtener un ajuste razonablemente bueno para los puntos 22 y 7 cuando se considera la heterogeneidad del medio. Sin embargo, el punto 34 muestra un desviación de 2,6 mg/L . Este punto de observación se encuentra muy próximo a la fuente, por lo que, dicha discrepancia se puede atribuir a la falta de precisión en las mediciones cercanas a la fuente.

Para la primera hipótesis, en la que se estudia la conductividad hidráulica, se realizan dos calibraciones, primero considerando los 20 puntos de observación (figura 17) y, segundo,eliminando el punto 9, ya que en un estudio basado en este experimento (Chen et al., 2018) se obtuvieron mejores resultados al prescindir de la información relativa a este punto. En este trabajo, en cambio, se consigue un mejor ajuste a las mediciones de la concentración haciendo uso de los 20 puntos, incluido el punto 9. Este punto en cuestión resulta relevante en la óptima reproducción del penacho experimental, pues pasa precisamente sobre él.

Tras la primera calibración de la conductividad hidráulica se logra un campo de valores heterogéneos con una varianza de 0,007 $(cm/s)^2$ y una media geométrica de 0,581 cm/s. Así, se consigue definir de manera favorable la forma del penacho y las concentraciones, obteniéndose los siguientes indicadores estadísticos de los residuos entre observaciones y predicciones: R^2 = 0,793; ME = -0,019 mg/L; MAE = 1,381 mg/L y RMSE = 2,210 mg/L.

En cuento a la segunda hipótesis, en la cual se realiza la calibración de la dispersividad longitudinal, se analizan dos casos, incialmente, considerando la conductividad hidráulica como homogénea y después, como heterogénea. El mejor resultado se obtiene con la segunda calibración, ya que de esta manera, el campo de velocidades v_x es más certero y se obtienen valores más realistas de la dispersividad. Se logran un campo de valores heterogéneos con una varianza de 0,011 cm^2 y un valor esperado de 0,206 cm, con los siguiente indicadores: R^2 = 0,849; ME = -0,024 mg/L; MAE = 1,087 mg/L y RMSE = 1,780 mg/L.

Analizando los resultados de las primeras dos hipótesis, el parámetro con mayor sensibilidad con respecto a las observaciones (medidas de la concentración) es la dispersividad longitudinal. A pesar de ello, optimizando únicamente la conductividad hidráulica, se obtiene una reproducción más fiel del penacho experimental y una mayor disminución de la función objetivo en comparación con la optimización de únicamente la

dispersividad longitudinal. Así, queda de manifiesto la gran importancia de la buena definición de la conductividad hidráulica y, por tanto, en la velocidad intergranular.

Para estos dos parámetros de flujo y transporte, se obtiene un coeficiente de correlación de -0,27, lo cual indica una relación lineal baja negativa. Las zonas en las que se dan los valores más elevados de la conductividad hidráulica, coincide con los valores menores de dispersividad longitudinal.

Cabe resaltar que se advierte, tras varias pruebas modificando el valor de la relación α_{TV}/α_L, que la forma del penacho es más sensible al parámetro de dispersividad transversal vertical que al parámetro de dispersividad longitudinal. La forma del penacho resulta más compacta y definida con menores valores de α_{TV}/α_L, asemejándose más a la forma del penacho experimental. De manera que se debería considerar su análisis y calibración, especialmente, en la zona tras la barra vertical, pues tras los casos estudiados sigue produciéndose discrepancia entre penachos debida a la propagación del trazador. En este estudio, no se ha realizado la optimización del valor de α_{TV}/α_L, debido a que el código MT3DMS está formulado de manera que únicamente se puede determinar un valor para cada capa, no está programado para leer matrices y, por tanto, no se puede definir zonas con valor distinto.

Por otro lado, la reproducción más fiel, tanto de la forma del penacho como de las concentraciones, se consigue considerando la heterogeneidad del medio, con los parámetros de conductividad hidráulica y dispersividad, y la filtración de agua a través de las líneas de contacto entre la barra vertical y las paredes del tanque. Se obtienen unos indicadores favorables: R^2 = 0,899; ME = 0,002 mg/L; MAE = 0,817 mg/L y RMSE = 1,438 mg/L. Así, se puede concluir que la permeabilidad de la barra vertical no es perfecta, existe flujo entre la barra vertical y las paredes del tanque, el cual a pesar de ser pequeño, tiene una gran importancia.

Finalmente, se verifican las palabras de Citarella et al. (2015) con respecto a la consideración del tanque de arena como una sección transversal, en la cual el flujo y transporte se dan en dos dimensiones, sin variación de la concentración sobre el plano y (ancho del tanque de arena). Al realizarse la inyección del trazador por todo el espesor del tanque y siendo este muy pequeño, la componente horizontal del transporte es despreciable.

4.2. Futuras investigaciones

En vista de la influencia que el valor de la relación α_{TV}/α_L tiene sobre la forma del penacho, su calibración podría dar un mejor ajuste. Para ello, sería necesaria la redacción de un código informático que permita realizar dicha calibración considerando zonas de diferente valor, para así permitir, en caso oportuno, que se manifieste su heterogeneidad.

En este estudio, la calibración de los parámetros de flujo y transporte se ha realizado haciendo uso de la regularización de Tikhonov con un enfoque determinístico, obteniendo una única representación de la conductividad hidráulica y dispersividad longitudinal. Sin embargo, se podría realizar una modelación estocástica inversa. De esta manera, se lograrían diversas representaciones de los parámetros estudiados, reconociéndose así, el grado de incertiumbre que inherentemente acompaña al valor de los parámetros cuando este es estimado mediante el ajuste del resultado del modelo a una serie de mediciones.

Se propone emplear el método auto-calibrante (*Self-Calibrated Method*, SCM), el cual fue presentado por Sahuquillo et al. (1992) y después, desarrollado por Gómez-Hernández et al. (1997) y Capilla et al. (1997 y 1998) para la simulación de la transmisividad. Posteriormente, Wen et al. (2002) y Hendricks Franssen (2003) emplearon este método incluyendo mediciones de concentración. El método auto-calibrante emplea técnicas geoestadísticas, como el kriging, y requiere la definición de un variograma inicial, junto a técnicas de optimización, con el objeto de minimizar una función objetivo similar a la utilizada en este estudio. Mediante este método se lograrían múltiples campos de los parámetros estudiados, en este caso, conductividad hidráulica y dispersividad longitudinal, siendo cada uno de ellos igualmente realista y capaz de reproducir las concentraciones observadas en laboratorio. Consiguiendo así, representaciones más heterogéneas de los parámetros pues no requiere su zonificación. Para mayor detalle acerca de la metodología del método auto-calibrante dirigirse a los artículos mencionados.

5. Bibliografía

Anderson, M., & Woessner, W. (1992). *Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport.* Academic Press.

Butera, I., Tanda, M., & Zanini, A. (2013). Simultaneous identification of the pollutant release history and the source location in groundwater by means of a geostatistical approach. *Environ Res Risk Assess. 27*, 1269-1280.

Capilla, J., Gómez-Hernández, J., & Sahuquillo, A. (1997). Stochastic simulation of transmissivity conditional to both transmissivity and piezometric data - 2. Demanstration on a synthetic aquifer. *Journal of Hydrology, 203*, 175-188.

Capilla, J., Gómez-Hernández, J., & Sahuquillo, A. (1998). Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometriz head data - 3. Application to the Culebra Formation at the Waste Isolation Pilot Plan (WIPP), New Mexico, USA. *Journal of Hidrology, 207*, 254-269.

Carrera, J., & Neuman, S. (1986). Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Maximum Likelihood Method incorporating prior information. *Water Resources Research, Vol. 22, NO. 2*, 199-210.

Casalini, T., Salvalaglio, M., Perale, G., Masi, M., & Cavallotti, C. (2011). Diffusion and agregation of sodium flourescein in aqueous Solutions. *The Journal of Physical Chemistry, 115*, 12896-12904.

Chen, Z., Gómez-Hernández, J., Xu, T., & Zanini, A. (2018). Joint identification of contaminant source and aquifer geometry in a sandbox experiment with the restart ensemble Kalman filter. *Journal of Hydrology 564*, 1074-1084.

Christiansen, H., Hill, M., Rosbjerg, D., & Jensen, K. (1995). Three-dimensiona inverse modeling using heads and concentrations at a Danish landfill. *Models for Assessing and Monitoring Groundwaterity (Proceedings of a Boulder Symposium July 1995). IAHS Publ. no. 227*, 167-175.

Chu, W.-S., Strecker, E. W., & Lettenmaier, D. P. (1987). An evaluation of data requeriments for groundwater contaminant transporte modeling. *Water Resources Research, Vol. 23, NO. 3*, 408-424.

Citarella, D., Cupola, F., Tanda, M., & Zanini, A. (2015a). Evaluation of dispersivity coefficients by means of a laboratory image analysis. *Journal of Contaminant Hydrology 172*, 10-23.

Citarella, D., Tanda, M., & Zanini, A. (2015b). Identification of the location probability density function of a tracer source in a heterogeneous laboratory sandbox. *University of Parma*.

Cupola, F. (2016). Theory and application of inverse problems in groundwater: numerical, laboratory and field studies. *Università degli Studi di Parma*.

Cupola, F., Tanda, M., & Zanini, A. (2015). Laboratory sandbox validation of pollutant source location methods. *Environ Res Risk Asses. 29*, 169-182.

De Marsily, G., Lavedau, G., Boucher, M., & Fasanino, G. (1984). *Interpretation of interference tests in a well field using geostatistical techiniques to fit the permeability distribution in a reservoir model. Geostatistics for Natural Resources Characterization.* Ed. G. Verlys, M. David, A.G. Journel y A. Marechal, pp. 831-849.

Doherty, J. (2015). *Calibration and Uncertainty Analysis for Complex Environmental Models.* Brisbane, Australia: Watermark Numerical Computing.

Doherty, J. (2018). PEST, Model-Independet Parameter Estimation. User Manual Part I: PEST, SENSAN and Global Optimisers. 7th Edition.

Evensen, G. (2003). The Ensemble Kalman Filter: theoretical formulation and practical implementation. *Ocean Dynamics, 53*, 343-367.

Evensen, G. (2007). *Data assimilation: the Ensemble Kalman Filter.* Springer Verlag.

Fetter, C. (2008). *Contaminant hydrology.* Waveland Press, Inc.

Freeze, R., & Cherry, J. (1979). *Groundwater.* Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall.

Gómez-Hernández, J., Sahuquillo, A., & Capilla, J. (1997). Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data - 1. Theory. *Journal of Hydrology, 203*, 162-174.

Harbaugh, A. (2005). *MODFLOW-2005, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -- the Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16.* Reston, VA, USA: U.S. Geological Survey.

Hendricks Franssen, H.-J., Gómez-Hernández, J., & Sahuquillo, A. (2003). Coupled inverse modelling of groundwater flow and mass transport and the worth of concentration data. *Journal of Hydrology 281*, 281-295.

Li, L., Haiyan, Z., Gómez-Hernández, J., & Franssen, H.-J. (2012). Jointly mapping hydraulic conductivity and porosity by assimilating concnetration data via ensemble Kalman filter. *Journal of Hydrology 428-429*, 152-169.

Medina, A., & Carrera, J. (1996). Coupled estimation of flow and solute transport parameters. *Water Resources Research, Vol. 32, NO. 10*, 3063-3076.

Neupauer, R., & Wilson, J. (1999). Adjoint method for obtaining backward-in-time location and travel time probabilities of a conservative groundwater contaminant. *Water Resources Research, Vol. 35*, 3389-3398.

Pollock, D. (2016). *User guide for MODPATH Version 7 -- A particle-tracking model for MODFLOW: U. S. Geological Survey Open-File Report 2016-1086.*

Pollock, D. (2017). *MODPATH v7.2.01: A particle-tracking model for MODFLOW: U.S. Geological Survey Software Release, 15 December 2017.*

Snodgrass, M., & Kitanidis, P. (1997). A geostatistical approach to contaminant source identification. *Water Resources Research, Vol. 33*, 537-546.

Wagner, B. (1992). Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modeling. *Journal of Hydrology*, 275-303.

Wen, X.-H., Deutsch, C., & Cullick, A. (2002). Construction of geostatistical aquifer model integrating dynamic flow and tracer data using inverse technique. *Journal of Hydrology, 255*, 151-168.

Woodbury, A., & Ulrych, T. (1993). Minimum Relative Entropy: Forward Probabilistic Modeling. *Water Resources Research, Vol. 29*, 2847-2860.

Woodbury, A., & Ulrych, T. (1996). Minimum relative entropy inversion: Theory and application to recovering the release history of a groundwater contaminant. *Water Resources Research, Vol. 32*, 2671-2681.

Xu, T., Gómez-Hernández, J., Zhou, H., & Li, L. (2013). The power of transient piezometric head data in inverse modeling: An application of the localized normal-score EKF with covariance inflation in a heterogenous bimodal hydraulic conductivity field . *Advances in Water Resources 54*, 100-118.

Zheng, C., & Bennett, G. (2002). *Applied Contaminant transport modeling*. Jhon Wiley & Sons.

Zheng, C., & Wang, P. (1999). MT3DMS: A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide. *US Army Corps of Engineers*.

Zhou, H., Gómez-Hernández, J., & Hendricks Franssen, H.-J. (2011). An approach to handling non-Gaussianity of parameters and variables in ensemble Kalman filtering. *Advances in Water Resources 34*, 844-864.

Zhou, H., Gómez-Hernández, J., & Li, L. (2014). Inverse methods in hydrogeology: Evolution and recent trends. *Advances in Water Resources 63*, 22-37.