

Anexo C. Limitaciones y metodología para un modelo numérico

1.1 ¿Qué es un modelo?

Antes de tratar el tema de modelación numérica en túneles se debe hacer una precisión frente a la definición de un *modelo numérico* y cómo este se relaciona con la comprensión global de un medio complejo. En Colombia, el tema de modelación numérica (particularmente en flujo, el transporte no se considera por el alcance de nuestra normativa) es un campo del conocimiento que apenas comienza y es aquí donde se debe introducir al lector frente a las consideraciones y responsabilidad ética¹ que tiene un modelador al dar una respuesta técnica de un problema.

En términos generales, un *modelo*, es considerado como una representación simplificada de la complejidad del mundo natural y puede ser presentado a través de una abstracción *conceptual* (del pasado – presente) o *numérica* (– basado en un estado inicial – del futuro) del problema. Particularmente, los modelos numéricos basan su concepción, considerando dos tipos de modelos matemáticos: los *modelos basados en datos* o de “caja negra” que emplean ecuaciones empíricas o estadísticas para calcular una variable desconocida y los *modelos basados en procesos* que utilizan la física (no lo considera *Beven y Young* [2013]) para describir los procesos y principios del flujo de agua subterránea en un dominio definido y con un enfoque de solución tipo *estocástico* (los parámetros tiene una distribución probabilística) o *determinístico* [*Anderson et al.*, 2015].

Estos modelos matemáticos pueden ser calculados a partir de *modelos analíticos* o *modelos numéricos*. Los primeros, requieren un alto nivel de simplificación del mundo natural, el cual puede ser resuelto matemáticamente, a través de una ecuación simple con pocos parámetros [*Samper y Lorenzo*, 2008] y que presenta un grado de dificultad según las restricciones empleadas [*Anderson et al.*, 2015]. Estas formulaciones pueden ser calculadas de forma *manual* (sencillo), como es la ecuación de flujo en medios porosos [*Darcy*, 1856] o *automático*, con hojas de cálculo, programas de ordenador [*Barlow y Moench*, 1998] o software especializado (complejo) como es Matlab® (software desarrollado por MathWorks Inc.) que permite resolver la ecuación de flujo de infiltración en túneles para medios heterogéneos [*Perrochet y Dematteis*, 2007] (Capítulo 2).

Así mismo, estas ecuaciones mantienen una sinergia con los modelos numéricos, al ser una poderosa guía para su construcción [*Haitjema*, 2006] y su constante utilidad para la verificación de la soluciones

¹ Acorde con *Anderson et al.* [2015], la ética en la modelación de aguas subterráneas significa que el modelador de agua subterránea actúa con responsabilidad moral, durante las etapas de planificación, diseño, ejecución y presentación de resultados en un modelo. Así mismo su ética radica en: ser imparcial, objetivo, realista, esforzarse constantemente y garantizar el uso de los mejores conocimientos científicos disponibles para el ejercicio de modelación. Aunque existan presiones externas (cliente, políticas, ambientales, jurídicas), él se debe mantener firme y autónomo, defender sus conocimientos y expresar abiertamente las limitaciones de su trabajo intelectual.

numéricas que arrojan los códigos programados [*Anderson et al.*, 2015; *Samper y Lorenzo*, 2008]. Por tanto, su interés se restringe a casos particulares y no complejos, y es aquí donde los modelos numéricos, a través de su esquema de solución por diferencias finitas (FD) o elementos finitos (FE), pueden abordar los problemas más complejos en 2D y 3D de un medio (homogéneo o heterogéneo) que presenta múltiples configuraciones (aproximadas) del sistema real [*Anderson et al.*, 2015; *Bear*, 1988].

Acorde con *Anderson et al.* [2015], los modelos numéricos son para el hidrogeólogo, una potencial herramienta que permite resolver los problemas que preceden el agua subterránea de forma más eficiente y en un menor tiempo. Al emplear códigos (programa de computador) con diferentes lenguajes de programación (Fortran, C/C++, Python, etc.), se pueden definir soluciones numéricas que no son continuas en el espacio o el tiempo. Estas presentan condiciones iniciales complejas, una geometría 3D heterogénea, con anisotropía en sus propiedades hidráulicas, físicas y químicas. Su esquema de solución basa su fundamento en los métodos o esquemas de solución iterativos, asociados a criterios de error que consumen recursos computacionales y tiempo según el grado de complejidad del modelo [*Diersch*, 2014].

1.1.1 Propósito de la modelación

El punto de partida para todo ejercicio de modelación de agua subterránea, es identificar el propósito del modelo. La construcción de modelos numéricos no es un fin en sí mismo y su concepción está definida para responder uno o varios conjuntos de cuestionamientos que permitirán darle al modelador, una guía o herramienta para pronosticar, recrear e interpretar condiciones antecedentes y futuras del mundo real [*Anderson et al.*, 2015].

Para *Király et al.* [1998] y *Anderson et al.* [2015] el objetivo principal, es resolver cuestionamientos tales como: ¿el modelo numérico qué puede aportarme a mi problema, el esquema matemático es adecuado, en qué escala se encuentra la información deseada y estará disponible, la modelación numérica es la mejor manera de lograr mi objetivo y comprensión del problema que estoy estudiando o es la analítica, se tienen datos suficientes para la configuración adecuada de un modelo numérico, la información es de calidad, qué grado de incertidumbre tendrán mis estimaciones, qué esquema de calibración emplearé, cuánto tiempo me tomará, qué beneficios tengo al usar un software u otro, etc.?. Al resolver estos cuestionamientos, el modelador podrá plantear y brindar una estimación acertada al comportamiento real del sistema con su modelo.

Sin embargo, las configuraciones numéricas presentan limitaciones que no solo se relacionan con los esquemas matemáticos de solución y la programación que emplea el software con un hardware adecuado. Esto va más allá de las configuraciones que el modelador emplea del Modelo Hidrogeológico Conceptual (MHC), el cual generalmente está restringido por la falta de información (geológica, hidráulica,

hidrogeoquímica, etc.)² y condicionará los resultados, estimaciones o calibración que se realice [Singhal y Gupta, 2010].

Otro punto importante dentro del propósito del modelador es definir la escala del modelo (regional, subregional o local). Si el modelo se empleará para gestión o planificación, la escala regional o subregional es adecuada. En cambio si el modelo es para fines de diseño, construcción u operación, la escala local es ideal [Deeds, 2011].

1.1.2 Limitaciones y problemas de los modelos

En las últimas décadas, los resultados (simulaciones) de los modelos numéricos, han presentado un inconveniente frente a la mala interpretación (o el mal uso de los modelos) y la confusión que tiene el modelador³ en la definición y relación conjunta de tres términos durante el proceso de modelación (Figura C - 1). Király *et al.* [1998] y Reilly y Harbaugh [2004] los define como: “*la representación esquemática del sistema real o modelo conceptual*”, “*Desarrollo o uso de un código de computación*” e “*Interacción entre la modelación numérica y el sistema real o modelo*”.

- *Representación esquemática del sistema real o modelo conceptual:*

Este esquema (MHC) representa una simplificación del sistema real que se va a modelar (geometría del acuífero con su geología, parámetros del medio, condiciones de contorno, etc.) [Király *et al.*, 1998; Reilly y Harbaugh, 2004]. Lo anterior es representado a través de ecuaciones diferenciales que pueden cambiar en función del tipo de problema a resolver (flujo no saturado, saturado, flujo constante o densidad variable, flujo multifásico, etc.), la asignación de condiciones de contorno e iniciales al esquema y la definición de pocos parámetros que son dependientes de las propiedades hidráulicas del acuífero (conductividad hidráulica, almacenamiento específico, porosidad efectiva), etc.

- *Desarrollo o uso de un código de computación:*

El uso o desarrollo propio de algoritmos, es un dolor de cabeza para el modelador. Estos códigos deben considerar métodos numéricos que resuelven las ecuaciones de aguas subterráneas que son definidas en el esquema abstracto – modelo conceptual [Reilly y Harbaugh, 2004]. El problema no es sencillo y en la mayoría de los casos, el modelo numérico sólo sirve para dar una idealización

² Una descripción metodológica para construir un MHC se detalla en Betancur *et al.* [2012].

³ Según Király *et al.* [1998]: un *modelo numérico* no representa la realidad de un medio, solamente es la representación esquemática (abstracta, conceptual y simbólica) de un *sistema real*.

del esquema. Este está condicionado a las simplificaciones de la heterogeneidad del medio y los regímenes de flujo que se pueden presentar en la matriz de baja permeabilidad, fracturada o diluida por procesos geológicos complejos y con características físicas y químicas diversas. En términos generales, el modelo numérico planteado hasta el momento, es una idealización más o menos imperfecta del esquema abstracto [Király *et al.*, 1998].

- *Interacción entre la modelación numérica y el sistema real / modelo:*

Los modelos numéricos son aplicaciones de los códigos de computación [Reilly y Harbaugh, 2004] y herramientas críticas que el juicio profesional, guiados por la intuición del modelador y los principios hidrogeológicos, condicionaran la calidad y utilidad del proyecto de modelación [Anderson *et al.*, 2015]. Una vez termina la elección y configuración adecuada del modelo numérico, los resultados (simulaciones) presentan una dificultad al momento de transferirlos al mundo real.

Lo anterior se debe a que sólo son válidos en el ordenador y su representatividad en el sistema real tiene asociada una gran incertidumbre con las simplificaciones del modelo conceptual [Király *et al.*, 1998]. De ahí el papel influyente que tiene el modelador con la elección adecuada de las suposiciones y condiciones de contorno que emplea en la configuración. Su buena elección, garantizará hasta cierto punto, la validez del modelo con un aceptable grado de incertidumbre, el cual podrá usarse para tomar decisiones estratégicas de planeación y control, apoyados en los diferentes escenarios de simulación.

Para Doherty [2011] la filosofía de la modelación es: “reconocer que un modelo no puede prometer la respuesta correcta. Sin embargo, si se construye adecuadamente, un modelo puede prometer que la respuesta correcta se encuentra dentro de los límites de incertidumbre dados por el modelador”. Los modelos que no tengan un análisis de incertidumbre pueden caer en el error de no ser una buena representación real del sistema. Las diferentes combinaciones paramétricas (equifinalidad paramétrica), pueden generar múltiples respuestas con sus entradas (insumos). Por tanto, todo modelo calibrado debe entregar un margen de incertidumbre (error) aceptable para los parámetros que emplea y este debe ser acorde a los límites construidos para su fin. De ahí que no se debe dar una única respuesta (aplicación de esto se ve en los modelos analíticos del capítulo 2).

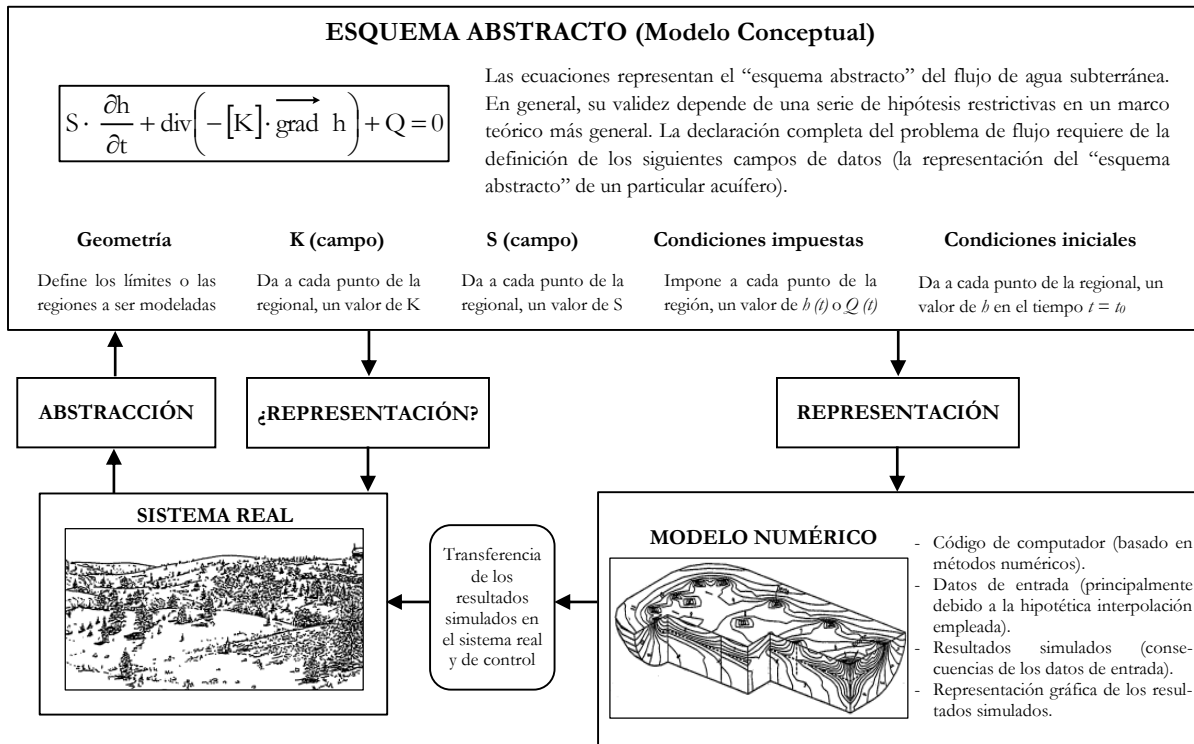


Figura C - 1 Relaciones entre el *sistema real*, la *representación esquemática del sistema real* y los *modelos numéricos*. Los métodos experimentales deben ser utilizados para comprobar si el sistema real, puede ser realmente considerado o comprendido con una representación esquemática o numérica. Adaptado de Király *et al.* [1998] y después de Király [1994]

1.1.3 Metodología empleada en una modelación numérica

En un modelo numérico de aguas subterráneas los insumos que se emplean para su construcción condicionaran la calidad de los resultados y su representatividad con la realidad del sistema. Por lo general, todos los insumos que permiten concebir el modelo (geometría, dominio, parámetros hidráulicos, etc.) no están disponibles al inicio. Sin embargo, el modelador debe tener la suficiente experiencia para idealizar la configuración hidrogeológica y al mismo tiempo, planear el levantamiento de esta información, seguido a esto la construcción numérica no tomará tiempo y su cálculo (simulaciones) dependerá de la complejidad del problema. En la Figura C - 2 se presenta el esquema metodológico que comúnmente sigue un modelador de aguas subterráneas.

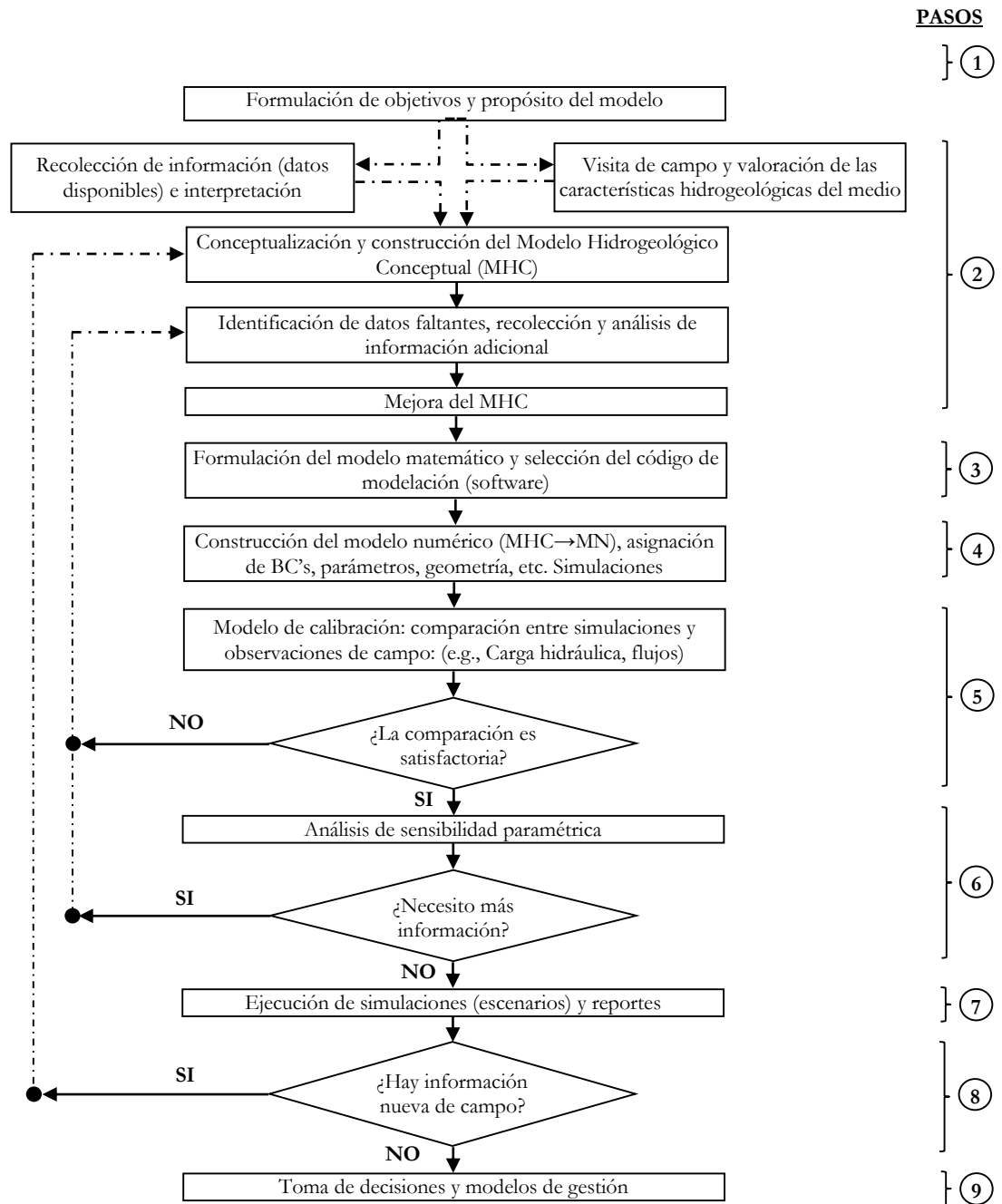


Figura C - 2 Diagrama de flujo de varias actividades a realizar por el modelador en la etapa de modelación de aguas subterráneas. Adaptado de *Anderson et al.* [2015]; *Reilly y Harbaugh* [2004]; *Singhal y Gupta* [2010]

La definición dada para cada paso de la metodología, está acorde con *Anderson et al.* [2015] y *Singhal y Gupta* [2010]. A continuación, se describen de forma general los pasos y actividades que debe seguir un modelador para realizar un adecuado proceso de modelación numérica.

- I. *Formulación de objetivos y propósito del modelo:* como se detalló anteriormente, en esta etapa el modelador da respuesta a sus cuestionamientos y realiza las simplificaciones apropiadas para el modelo conceptual, el modelo numérico y el software a utilizar.
- II. *Definición del modelo hidrogeológico conceptual (MHC):* consiste en dar una descripción del sistema de flujo de agua subterránea incluyendo los cuerpos de agua, pozos, unidades hidroestratigráficas, contornos del sistema, geología y demás información recolectada en campo. Si el modelador no participa de la campaña de campo para recolección de datos e insumos, debe realizar una visita de campo, con el fin de que tenga una visión general o perspectiva de las configuraciones geológicas, hidrológicas e hidrogeológicas de la zona. Esto contribuirá a que tenga argumentos y criterio para asignar las condiciones de contorno, parámetros, etc., del modelo numérico.
- III. *Formulación del modelo matemático y elección del código de modelación (software):* Una vez se defina el modelo conceptual y el propósito del modelo, se puede elegir el modelo matemático y códigos asociados. El modelo matemático basará sus principios en las ecuaciones que gobiernan el problema, las condiciones de contorno y para problemas en transitorio sus condiciones iniciales. Lo anterior permitirá elegir el código y método numérico más eficiente que aproxime al modelo matemático.
- IV. *Construcción del modelo numérico (MN):* consiste en asociar la configuración esquemática del modelo conceptual en un modelo numérico de aguas subterráneas. Su configuración se compone de un dominio, el uso de una malla, la definición de límites o contornos, propiedades hidráulicas, etc.
- V. *Calibración del modelo numérico:* Este paso es el más importante de todo el proceso de modelación porque permite realizar la adecuada conexión y sinergia entre el MHC y el MN. Si la comparación no es adecuada, se debe revisar nuevamente la configuración conceptual y numérica del modelo. Para realizar esta comparación, el modelador emplea una serie histórica de los datos observados y un algoritmo de búsqueda (capítulo 2), el cual ajusta automáticamente los parámetros del modelo numérico hasta encontrar una aproximación adecuada. No se recomienda realizar una calibración manual, pues eleva el grado de incertidumbre de zonas homogéneas del modelo y su ineficiencia en tiempo se denota notablemente. Esta práctica la emplean modeladores con poca experiencia y se traduce en la variación de un solo parámetro, hasta ajustar la observación, de ahí su error (en el capítulo

2, se detalla el alcance de la calibración automática). Una vez el modelo calibrado este ajustado, este podrá ser empleado para los escenarios de predicción.

- VI. *Análisis de incertidumbre paramétrica:* Durante el proceso de calibración el modelador emplea un análisis de incertidumbre para garantizar la confiabilidad y calidad de su modelo. Al emplear una franja de confianza, minimiza el error asociado a las mediciones, el diseño del modelo y el grado de predicción futuro del modelo [Singhal y Gupta, 2010]. Los parámetros más sensibles serán los más importantes para hacer que el modelo coincida con los valores observados [Reilly y Harbaugh, 2004]. Es de vital importancia que se empleen intervalos (proporcionales a los órdenes de magnitud de los parámetros medidos en campo) en los que el modelo puede dar garantía de su respuesta numérica. Si se requiere información adicional para evaluar la incertidumbre del modelo, el modelador debe reconsiderar la baja utilidad de su modelo y plantear nuevamente el MHC y el MN.
- VII. *Escenarios de predicción:* este paso consiste en emplear el modelo numérico calibrado y con un nivel de incertidumbre aceptado para simular condiciones adicionales o futuras de que se requieran evaluar con un grado de confiabilidad. Por ejemplo, evaluar escenarios de excavación y sus flujos de infiltración en minas o túneles o estimar la disponibilidad del recurso subterráneo con el estrés hidráulico que experimenta un acuífero, etc.
- VIII. *Información nueva de campo:* por lo general es un dolor de cabeza para el modelador cuando llegan a la oficina nuevos datos que obligan a tener una revisión exhaustiva del MHC y en especial de las configuraciones geométricas y numéricas del MN. Si el modelador estima que esta nueva información no afectará las condiciones del modelo actual y que esta información puede ser empleada para predicción, puede continuar con el siguiente paso. De lo contrario, incidiría en una revalidación de todo el ejercicio realizado hasta el momento y plantear un nuevo MHC y MN.
- IX. *Toma de decisiones y modelos de gestión:* en la actualidad, son muy pocos los proyectos que llegan a esta etapa para el modelador, gestionar su propio modelo sería lo ideal, pero muchas veces el producto se entrega a terceros y estos deben suplir todo el proceso intelectual llevado hasta el momento para una configuración con simplificaciones y limitaciones por detrás. Por tanto, el modelador debe dar a conocer las restricciones empleadas en su configuración para que el nuevo modelador, pueda dar uso adecuado de este en actividades de gestión, tomas de decisión u oferta del recurso subterráneo. Un modelo aproximado garantiza durante el tiempo, una buena gestión y es de carácter importante para los terceros realizar los respectivos ajustes y actualización con la nueva información que se levante en campo. Actualizar las condiciones garantizan disminuir la incertidumbre del modelo, lo cual termina en una nueva concepción del MHC y MN.

Bibliografía

- [1] Anderson, M. P., W. W. Woessner, y R. J. Hunt (2015), *Applied Groundwater Modeling (Second Edition)*, Academic Press, San Diego.
- [2] Barlow, P. M., y A. F. Moench (1998), Analytical solutions and computer programs for hydraulic interaction of stream-aquifer systems: Open-File Report 98-415ARep., Marlborough, Massachusetts.
- [3] Bear, J. (1988), *Dynamics of fluids in porous media*, 784 pp., Dover.
- [4] Betancur, V. T., T. C. A. Palacio, y E. M. J. F. (2012), Conceptual Models in Hydrogeology, Methodology and Results, in *Earth and Planetary Sciences » Geology and Geophysics » "Hydrogeology - A Global Perspective"*, edited by G. A. Kazemi, February 10, 2012 under CC BY 3.0 license.
- [5] Beven, K., y P. Young (2013), A guide to good practice in modeling semantics for authors and referees, *Water Resources Research*, 49(8), 5092-5098.
- [6] Darcy, H. P. G. (1856), Determination of the Laws of Water Flow through Sand, the Public Fountains of the City of Dijon, Appendix D e Filtration, Section 2 of Appendix D on Natural Filtration. Translated from the French by Patricia Bobeck., *Kendall/Hunt Publishing Company, Iowa*, 455 - 459.
- [7] Deeds, N. E. (2011), Assessment of Groundwater Modeling Approaches for Brackish Aquifers : Final Report, Report,Rep., University of North Texas Denton, Texas.
- [8] Diersch, H.-J. G. (2014), *FEFLOW Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media*, 1018 pp., Springer Berlin Heidelberg.
- [9] Doherty, J. (2011), Modeling: Picture Perfect or Abstract Art?, *Ground Water*, 49(4), 455-455.
- [10] Haitjema, H. (2006), The Role of Hand Calculations in Ground Water Flow Modeling, *Ground Water*, 44(6), 786-791.
- [11] Király, L. (1994), Groundwater flow in fractures rocks: models and reality, *In: 14th Mintrop Seminar über Interpretationsstrategien in Exploration und Produktion, Ruhr Universität Bochum 159*, 1-21.
- [12] Király, L., - Y. P. Jeannin, y M. Sauter (1998), Introduction to karst modelling, *Bulletin d'Hydrogéologie No. 16 (1998)*, Centre d'Hydrogéologie, Université de Neuchâtel, 1-6.
- [13] Perrochet, P., y A. Dematteis (2007), Modeling Transient Discharge into a Tunnel Drilled in a Heterogeneous Formation, *Ground Water*, 43(6), 786-790.
- [14] Reilly, T. E., y A. W. Harbaugh (2004), Guidelines for Evaluating Ground-Water Flow Models (SIR2004-5038)Rep., Virginia.
- [15] Samper, J., y M. Lorenzo (2008), Soluciones analíticas para el cálculo de caudales de infiltración en túneles, *El agua y las infraestructuras en el medio subterráneo. AIH - GE. Barcelona*, nov. 24-26.
- [16] Singhal, B., y R. Gupta (2010), *Applied Hydrogeology of Fractured Rocks*, Springer Netherlands.