

La investigación reportada en esta tesis es parte de los programas de investigación del CICESE (Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, B.C.).

La investigación fue financiada por el CONAHCYT (Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías).

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México). El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo o titular de los Derechos Autor.

CICESE © 2023, Todos los Derechos Reservados, CICESE

Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California



Maestría en Ciencias en Ciencias de la Tierra con orientación en Geofísica Aplicada

Inversión desacoplada de datos hidrofísicos para un modelo de intrusión salina

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
Maestro en Ciencias

Presenta:

Alina Itzel Gallardo Romero

Ensenada, Baja California, México

2023

Tesis defendida por

Alina Itzel Gallardo Romero

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Diego Ruiz Aguilar

Codirector de tesis

Dr. Loic Marie Jean Claude Jose Ghislain Peiffer

Codirector de tesis

Dr. Carlos Francisco Flores Luna

Dr. Claudio Inguaggiato

Dr. Armando Trasviña Castro



Dr. Diego Ruiz Aguilar

Coordinador del Posgrado en Ciencias de la Tierra

Dra. Ana Denise Re Araujo

Directora de Estudios de Posgrado

Resumen de la tesis que presenta Alina Itzel Gallardo Romero como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Ciencias de la Tierra con orientación en Geofísica Aplicada.

Inversión desacoplada de datos hidrogeofísicos para un modelo de intrusión salina

Resumen aprobado por:

Dr. Diego Ruiz Aguilar

Codirector de tesis

Dr. Loic Marie Jean Claude Jose Ghislain Peiffer

Codirector de tesis

La presente tesis caracteriza el fenómeno de intrusión salina para un acuífero costero usando un algoritmo de inversión que incorpora el uso de datos geofísicos e hidrogeológicos. Con el uso conjunto de los programas UHO3DMT y TOUGH3 se implementa un modelado directo en serie, el cual se usa para resolver el problema de inversión con un algoritmo de mínimos cuadrados. Para probar el modelado directo en serie se generan perfiles de concentración en sales disueltas totales y conductividad eléctrica para el caso de un acuífero homogéneo y uno heterogéneo con pozos. Como paso previo a la inversión se realiza un análisis de sensibilidades a parámetros relevantes a la variación de concentración en sales disueltas, como el tiempo, la porosidad, la recarga de agua, el factor de cementación y la permeabilidad. Tras elegir los parámetros ideales se implementa el algoritmo de inversión en un acuífero homogéneo con pozos y se genera un modelo final de concentraciones salinas. Se recuperó el modelo inicial y la geometría de la intrusión. Los resultados obtenidos sugieren que el programa creado invierte correctamente los parámetros de tiempo, permeabilidad y factor de cementación y además se encontró que la inversión de datos AMT era sensible a cambios en la permeabilidad y a la porosidad.

Palabras clave: inversión, modelado directo 3D, método magnetotelurico, modelo geohidrológico, acuífero costero, intrusión salina, método magnetotelurico, flujo hidráulico.

Abstract of the thesis presented by Alina Itzel Gallardo Romero as a partial requirement to obtain the Master of Science degree in Earth Sciences with orientation in Applied Geophysics.

Uncoupled inversion of hydrogeophysical data applied to a saltwater intrusion model

Abstract approved by:

Dr. Diego Ruiz Aguilar

Thesis Co-Director

Dr. Loic Marie Jean Claude Jose Ghislain Peiffer

Thesis Co-Director

The present thesis looks to investigate the phenomena of saline intrusion for a coastal aquifer using an inversion algorithm which incorporates hydrogeological and geophysical data. With the joint usage of the programs UHO3DMT and TOUGH3 as one direct model to obtain geophysical data, this thesis looks to resolve the modelling of a coastal aquifer with saline intrusion with a least-square inversion method. Saline concentration and conductivity profiles are generated for the case of an homogeneous aquifer with wells and an heterogeneous aquifer without wells. A study of sensibilities of the parameters time, porosity, water recharge, the cementation factor and permeability, is done beforehand to choose the most ideal parameters to use in the inversion algorithm, which is implemented in an ideal homogeneous aquifer with wells. The created inversion algorithm is tested and profiles of saline concentration are generated. The initial model and the geometry of the salt intrusion was recuperated. The results obtained suggest that the algorithm inverts AMT data to calculate time, permeability and the cementation factor, and that a sensibility to variations in the permeability and porosity can affect the inversion of AMT data.

Keywords: inversion, 3D forward modelling, magnetotelluric method, geohydrological modelling, coastal aquifer, saline intrusion, hydraulic flux.

Dedicatoria

Para mi familia y maestros que fueron mis guías.

Agradecimientos

Al Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California por haberme brindado un lugar en la institución para poder desarrollarme académicamente en el área de ciencias de la tierra y así llevar a cabo mi tesis de maestría.

A todos los maestros que me instruyeron durante las clases el primer año y a mis asesores, el Dr. Loic Peiffer y el Dr. Diego Ruiz que me guiaron en la realización de mi tesis de maestría y a mis sinodales, el Dr. Claudio Inguaggiato, el Dr. Armando Trasviña Castro y el Dr. Carlos Flores, que apoyaron en la revisión de mi tesis.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por brindarme el apoyo económico para realizar mis estudios de maestría.

Al Dr. Luis A. Gallardo, al MC. Erik Gallardo y MC. Miguel Martínez que me brindaron sus consejos y apoyo en la comprensión del algoritmo de inversión, así como en el uso del programa de modelado directo UHO3DMT.

A todos los maestros, familia y amigos que me apoyaron en mi desarrollo académico para construir mi formación actual.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español	ii
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	iv
Agradecimientos	v
Lista de figuras	viii
Lista de tablas	xi
Capítulo 1. Introducción	
1.1. Acuíferos costeros y el problema de Henry	3
1.2. Hipótesis y Objetivos	6
1.2.1. Hipótesis	6
1.2.2. Objetivo general	6
1.2.3. Objetivos Específicos	6
1.2.4. Organización del trabajo	6
Capítulo 2. Marco teórico	
2.1. Modelado de datos magnetotelúricos	8
2.1.1. El método magnetotelúrico (MT)	8
2.1.2. Modelado AMT con el programa de UHO3DMT	10
2.2. Modelado hidrogeológico para un acuífero con intrusión salina	11
2.2.1. Modelado hidrogeológico con TOUGH3	11
2.2.2. Conversión de datos de TDS a conductividad	17
Capítulo 3. Metodología: Estrategias de modelado e inversión de datos AMT y datos hidrogeológicos	
3.1. ¿Por qué un algoritmo de inversión?	18
3.2. Parametrización	18
3.2.1. Selección de dimensiones del problema	18
3.2.2. Selección de variables y constantes del problema	19
3.2.3. Selección de variables como parámetros a resolver	21
3.3. Modelado directo en serie de datos AMT y datos hidrogeológicos	22
3.3.1. Esquema del modelado directo en serie	23
3.3.2. Condiciones de Dirichlet para el modelado hidrogeológico	24
3.3.3. Discretización de la malla	24
3.4. Algoritmo de inversión en serie	27
3.4.1. Algoritmo de búsqueda	27
3.4.2. Esquema de inversión	29
Capítulo 4. Resultados del modelado directo	
4.1. Aplicación del modelado hidrogeológico con TOUGH3	30

4.1.1.	Caso A: Un acuífero homogéneo con intrusión salina	30
4.1.2.	Caso B: Un acuífero homogéneo con intrusión salina y con pozos	31
4.2.	Aplicación del modelado de datos AMT con UHO3DMT	32
Capítulo 5.	Resultados de la inversión de datos hidrogeológicos y de datos AMT	
5.1.	Análisis de sensibilidades	37
5.1.1.	Cálculo de sensibilidades	38
5.2.	Aplicación del algoritmo de inversión	42
5.2.1.	Experimento 1: Inversión para calcular el tiempo, la permeabilidad y el factor de cementación	43
5.2.2.	Inversión de un modelo sintético interpolado con pozos	44
5.2.2.1.	Experimento 2: Inversión para calcular el tiempo, el factor de cementación y la permeabilidad	45
5.2.2.2.	Experimento 3: Inversión para calcular el tiempo y el factor de cementación	47
Capítulo 6.	Discusión y conclusiones	
6.1.	Discusiones	50
6.1.1.	Discusión sobre el modelado directo en serie	50
6.1.1.1.	Sobre el modelo de Henry	50
6.1.1.2.	Sobre los resultados del modelado directo	51
6.1.2.	Sobre los resultados del algoritmo de inversión	53
6.2.	Conclusiones	56
Literatura citada	58
Anexo	62

Lista de figuras

Figura	Página
1. Esquema simple del fenómeno de intrusión salina en zonas costeras.	4
2. Configuración de un acuífero que se encuentra en zonas costeras y que no tiene recarga de agua dulce de fuentes locales. El agua entra al acuífero en un área de recarga lejana, y fluiría a la zona de la costa horizontalmente.	5
3. Modelo conceptual planteado por Sun et al. (2017) que modela un acuífero confinado en zonas costeras.	5
4. Líneas, puntos y elementos volumétricos, definidos en el software de generador de mallas de elemento finito llamado GMSH, para un ejemplo de la malla aire-tierra sin topografía.	10
5. Superficies definidas en GMSH para un ejemplo de la malla aire-tierra sin topografía.	10
6. Sistema abierto donde hay intercambio de materia.	12
7. Configuración de un sistema para un problema no estacionario.	12
8. Arquitectura modular del programa TOUGH3.	15
9. Discretización en X, Y para el modelo hidrogeológico.	19
10. Discretización de malla en TOUGH3 con la posición de los pozos descritos en la tabla 5.	20
11. Esquema de modelado directo	23
12. Diagrama del acuífero con intrusión salina.	24
13. Malla estructurada hecha en el programa de GMSH partiendo de un dominio de $100km \times 100km \times 100km$	25
14. Discretización usada para la malla estructurada para conductividad eléctrica en el dominio de la intrusión salina	27
15. Sección vertical del modelo de TDS para el caso A, luego de un periodo tiempo de 30 años. Los vectores señalan la dirección y magnitud del flujo de agua.	30
16. Secciones horizontales y verticales con vectores de flujo másico del modelo directo para un tiempo de 30 años.	33
17. Flujo másico en 30 años para un acuífero con pozos, donde la tasa de extracción y posición de los pozos están definidas en la tabla 5.	34
18. Distribución de la conductividad eléctrica (del medio poroso saturado) a lo largo del acuífero después de 30 años de simulación, donde los ejes se definen según el dominio de $100km \times 100km \times 100km$ de UHO3DMT.	34
19. Vista de planta de la resistividad aparente obtenida con UHO3DMT y los datos de conductividad del caso de estudio B, para un corte en la superficie ($z=0$ km) y un tiempo de 30 años. Se muestra la componente xy de la resistividad aparente para una frecuencia de 10 Hz, donde el eje y y x se definen según el dominio de $100km \times 100km \times 100km$ de UHO3DMT.	35

Figura	Página
20. Sección vertical del modelo de TDS en función de la frecuencia obtenida con UHO3DMT y los datos de conductividad del caso de estudio B para un tiempo de 30 años. En el perfil se muestra la componente xy de la resistividad aparente, donde solo el eje x se define según el dominio de TOUGH3.	35
21. Sección vertical en $y=50$ km de los datos de campo eléctrico para un dominio con profundidad de $300m$ y longitud de $600m$, donde el acuífero se ubica entre $49.9km$ y 50.1 km en el eje x. El tiempo de simulación es de 30 años usando los datos del caso B. En la figura se muestra la componente x del campo eléctrico para una frecuencia de 10 Hz. . .	36
22. Sensibilidad de un perfil en $z = 25m$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto al tiempo para una variación de 0.05 años.	38
23. Sensibilidad de un perfil con corte en $y = 25m$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto a la porosidad para una variación de 0.02.	39
24. Sensibilidad de un perfil con corte en $y = 25m$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto al factor de cementación para una variación de 0.005.	40
25. Sensibilidad de un perfil con corte en $y = 25m$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto a la permeabilidad para una variación de $1.18 \times 10^{-14}m^2$	41
26. Esquema del algoritmo de inversión usando el método de perturbaciones para el cálculo de las derivadas.	42
27. Sección vertical en $y = 0$ del perfil de TDS del modelado directo obtenido en la iteración 1 para el experimento 1. Los parámetros asociados al modelado directo son: $t = 10$ años, $m=2.00$ y $\varepsilon = 1.416 \times 10^{-12}$	43
28. Sección vertical en $y = 0m$ del perfil de TDS del modelado directo obtenido en la iteración 3 para el experimento. Los parámetros asociados al modelado directo son: $t = 31.71$ años, $m=2.00$ y $\varepsilon = 9.3816 \times 10^{-13}$	43
29. Comparación de las secciones verticales obtenidas del perfil de TDS a partir del modelo sintético del caso B con interpolación (figura de la izquierda) y el modelado sintético del caso B sin interpolación (figura de la derecha). Ambos cortes corresponden a una sección en $y = 0m$	45
30. Comparación del perfil de TDS obtenido a partir del modelo sintético interpolado (figura de la izquierda (a), (c) y (e)) y el modelado final asociado a la inversión del experimento 2 (figura de la derecha (b), (d) y (f)). Los perfiles (a) y (b) corresponden a una sección vertical en $z = 0m$, los perfiles (c) y (d) a una sección horizontal en $y = 0m$, y (e) y (f) a una sección horizontal en $y = 100m$	46

Figura	Página
31. Comparación del perfil de TDS obtenido a partir del modelo sintético interpolado (figura de la izquierda (a), (c) y (e)) y el modelado directo de la iteración 8 del experimento 3 (figura de la derecha (b), (d) y (f)). Los perfiles (a) y (b) corresponden a una sección vertical en $y = 0\text{m}$, los perfiles (c) y (d) a una sección horizontal en $z = 0\text{m}$, y (e) y (f) a una sección horizontal en $z = 100\text{m}$	48
32. Sección vertical con corte en $y = 0\text{ m}$ de la diferencia porcentual entre el modelo de TDS asociado a los datos observados sin interpolar y el modelo final del experimento 3. . . .	54
33. Sección vertical con corte en $y = 0\text{ m}$ de la diferencia porcentual entre el modelo de TDS con interpolación asociado a los datos observados y el modelo final del experimento 3. .	54
34. Cortes en vertical de un modelo de TDS para un acuífero heterogéneo con intrusión salina. El modelo inicial considera un medio de tres capas, con porosidades, densidades de roca y permeabilidades dadas por la tabla 10.	63

Lista de tablas

Tabla		Página
1.	Lista de las propiedades geofísicas que detectan algunos métodos geofísicos en problemas hidrogeológicos según Binley et al. (2015).	3
2.	Datos de salida para el módulo EOS7 del software TOUGH3	15
3.	Factores corregidos en el módulo EOS7 del modelo de TOUGH3	16
4.	Valor de parámetros hidrogeológicos para el modelado directo con TOUGH3.	20
5.	Coordenadas y flujos de pozos de extracción para el modelado directo con TOUGH3 según la malla de la figura 10, donde $Z(m)$ es la distancia entre el subsuelo del acuífero hasta el punto de extracción.	21
6.	Resistividades para los volúmenes en la malla estructurada de GMSH	25
7.	Evolución de parámetros por cada iteración del algoritmo de inversión para el experimento 1. La tabla registra el tiempo, el factor de cementación y la permeabilidad.	44
8.	Evolución de los parámetros del experimento 2 por cada iteración. Se registran los valores de tiempo, factor de cementación y permeabilidad, que se ajustan a los datos observados obtenidos del modelo sintético interpolado de la figura 29(b).	47
9.	Evolución de parámetros del experimento 3 por cada iteración. Se registran los valores de tiempo, factor de cementación y permeabilidad, que se ajustan a los datos observados obtenidos del modelo sintético interpolado de la figura 29(b).	49
10.	Valores de parámetros hidrogeológicos para el modelado directo con TOUGH3.	62

Capítulo 1. Introducción

El agua dulce es un recurso indispensable para el sustento de la vida en el planeta y conforma un 2.5 % de toda el agua que se encuentra en la superficie de la Tierra. El agua dulce puede ser obtenida de fuentes superficiales, como ríos, lagos y arroyos; y de fuentes subterráneas, como acuíferos. En México, según datos de Instituto Mexicano de Tecnología del Agua (IMTA), el 38.9 % del agua dulce se extrae de acuíferos subterráneos (IMTA, 2019). Estos acuíferos subterráneos se abastecen mediante la recarga de agua dulce infiltrada en la tierra durante temporadas de lluvia. No obstante, si algún acuífero se encuentra a las cercanías del mar, como llega a suceder en acuíferos costeros, existe el peligro de que el agua salada se infiltre y se mezcle con el agua dulce. A este problema se le conoce como intrusión salina.

El abastecimiento de agua potable a ciudades costeras depende de la obtención de agua extraída de acuíferos costeros. Actualmente muchos de estos acuíferos se encuentran amenazados por diversos problemas que limitan su extracción, como la intrusión salina, sequías y contaminación por desechos industriales. En México actualmente existen 18 acuíferos reportados con un problema de intrusión salina, siendo 9 de estos acuíferos pertenecientes al estado de Baja California, según datos de la última ficha técnica reportada por CONAGUA (2022). Esto plantea un riesgo alto de no poder satisfacer la demanda de agua en el futuro. Para tener una mejor administración del agua y evitar llegar a tal extremo se requiere de un conocimiento de los procesos que ocurren en el acuífero. Estos procesos se pueden estudiar realizando mediciones de conductividad eléctrica en pozos, las cuales se usan para inferir el perfil de sólidos disueltos totales (TDS) del acuífero.

Los métodos geofísicos presentan una opción no invasiva y beneficiosa para recabar información sobre los acuíferos sin necesidad de la perforación de pozos. Esta información recabada se puede usar para estudiar aspectos de la geometría del medio poroso. Para sondeos profundos en regiones semi-áridas, los métodos más empleados son el Transitorio Electromagnético (TEM), Magnetotelúrico (MT), Audio-Magnetotelúrico (AMT), de corriente directa y Audio-Magnetotelúrico con fuente controlada (CSAMT). Aplicado a estudios regionales hidrogeológicos, los métodos geofísicos han ayudado a la aportación de nuevas técnicas de investigación y obtención de datos en zonas con acuíferos. McDonnell et al. (2023), por ejemplo, implementa el estudio de imágenes de resistividad eléctrica para monitorear una intrusión salina inducida experimentalmente en un acuífero confinado.

Los estudios geológicos e hidrogeológicos pueden ser complementados con métodos geofísicos para una mejor caracterización del medio. Normalmente un estudio hidrogeológico aporta información de las

propiedades del medio poroso y de la trayectoria del flujo de agua, y por otro lado la geofísica nos indica la geometría del acuífero y la geometría de la intrusión salina. La mayor parte de los estudios hidrogeológicos hacen uso de métodos eléctricos y electromagnéticos para poder ver las conductividades de heterogeneidades cerca de la superficie, así como los procesos dinámicos de los fluidos (Rubin & Hubbard, 2005). Algunos softwares de modelado hidrogeológico de uso común son TOUGH3 (Pruess et al., 1999) y Modflow (Harbaugh, 2005).

Para entender el papel que tienen las características hidrogeológicas como lo es la intrusión salina en los datos geofísicos y en mediciones hidrogeológicas es necesario conocer las leyes que las relacionan. Las técnicas de modelado permiten tanto realizar modelos a partir de observaciones (inversión), como predecir observaciones a partir de un modelo (modelado directo). La técnica de modelado directo ha sido implementada en diversos estudios para acuíferos costeros: Micallef et al. (2020) usa un modelado directo basado en aproximaciones de datos de reflexión sísmica y de TDS para obtener perfiles de resistividad en un acuífero en la bahía de Canterbury; Luján & Romo (2010) y Burke Mena (2016) obtienen perfiles de resistividad de acuíferos costeros con el modelado de datos AMT.

Las técnicas de inversión tienen el objetivo de encontrar el modelo que reproduce mejor los datos observados. En este proceso la cantidad de datos y los parámetros a invertir definen la flexibilidad y rapidez del algoritmo para encontrar una solución dentro del dominio de búsqueda. Bjorck (1996) aborda los distintos métodos de inversión originados del método de mínimos cuadrados y sus variantes. En el caso específico donde se conjuntan datos de origen diferente, como es el caso de esta tesis, el algoritmo se puede clasificar en dos tipos: acoplado y desacoplado. Un algoritmo de inversión desacoplado es aquel en el cual cada conjunto de datos produce su modelo, mientras que el acoplado genera un modelo único a través de varios modelos directos con datos de manera separada y después integrados, o bien a través de un conjunto simultáneo de modelados inversos (Hinnell et al., 2010; Gallardo, 2004).

La aplicación de técnicas de modelado conjunto de datos geofísicos e hidrogeológicos en acuíferos costeros con problemas de intrusión salina es un problema reciente, con pocos desarrollos documentados de modelado. En este proyecto se propone simular numéricamente un caso sintético de intrusión salina que parte de un modelo de referencia conocido como el problema de Henry (1964). De esta manera se buscará aplicar la técnica de inversión para un esquema de modelado directo que conjunta datos AMT y datos de concentración en sólidos totales disueltos (TDS). Los datos hidrogeológicos extraídos del modelo de Henry (1964) y la distribución de conductividad eléctrica servirán como base para obtener los datos observados del algoritmo. La relación de la ley de Archie se implementará para convertir los datos de TDS a conductividad eléctrica. Por último, se usará el método de mínimos cuadrados para calcular el

modelo que mejor se ajusta a los datos observados.

1.1. Acuíferos costeros y el problema de Henry

El fenómeno de intrusión salina es el proceso que se manifiesta cuando un acuífero de agua dulce se encuentra conectado a un cuerpo de agua de mar. Al estar el agua de mar en contacto directo con el agua dulce a través de una interfaz, el agua de mar comienza a desplazarse por el acuífero mediante procesos de difusión, por un gradiente de presión generado por la diferencia de densidad. En este desplazamiento (*density-driven flow*) de la interfaz de contacto, el agua de mar con alta de concentración de sólidos totales disueltos (TDS) tiende a moverse por debajo del agua dulce. Este proceso de intrusión sólo se detiene cuando la presión en el acuífero aumenta y equilibra la presión generada por la intrusión del agua de mar.

La adquisición de datos en acuíferos con intrusión salina se puede hacer mediante la recabación de información de pozos; que incluye tanto datos de TDS, como de temperatura y presión. Obtenidos los datos, la información entonces se puede usar en estudios hidrogeológicos para monitorear el estado del acuífero. En casos donde se busca estudiar la geometría del acuífero y la geometría de la intrusión salina se puede optar por el uso de métodos geofísicos. Binley et al. (2015) expone algunos de los diferentes métodos geofísicos usados en la hidrogeología y las propiedades geofísicas que se estudian en cada uno de los métodos (tabla 1).

Tabla 1. Lista de las propiedades geofísicas que detectan algunos métodos geofísicos en problemas hidrogeológicos según Binley et al. (2015).

Método geofísico	Propiedades geofísicas
Métodos eléctricos	Conductividad eléctrica
Polarización inducida	Conductividad eléctrica
Polarización inducida espectral	Conductividad eléctrica, cargabilidad
Polarización espontánea	Conductividad eléctrica, polarización eléctrica
Inducción EM	Conductividad eléctrica, permeabilidad eléctrica
Ground Penetration Radar (GPR)	Permitividad, conductividad eléctrica
Métodos sísmicos	Módulos elásticos, densidad
Métodos sismoeléctricos	Densidad de corriente eléctrica
Resonancia Magnética Nuclear	Densidad de protones
Métodos gravimétricos	Densidad

La caracterización de heterogeneidades hidrogeológicas con datos geofísicos se ha aplicado a la obtención de información sobre procesos dinámicos como el de transporte de solutos. Binley et al. (2015) describe

cómo ha progresado la hidrogeofísica a lo largo del tiempo para estudiar tales procesos y qué ha mejorado con la invención de herramientas y métodos de análisis que incorporan múltiples tipos de datos, como el caso de la inversión. A la vez, Binley et al. (2015) también enfatiza la importancia de estudiar variaciones espacio-temporales en la conductividad eléctrica y de estudiar la interfaz entre el agua dulce y agua de mar en acuíferos subterráneos.

El determinar estas interfaces, sin embargo, requiere información detallada de las características hidrogeológicas del fluido y del medio, así como del algoritmo adecuado de modelado hidrogeológico. Dependiendo de la zona de estudio, los acuíferos se pueden simular partiendo de un esquema base. El acuífero que se busca modelar en la presente tesis es el acuífero confinado B que se muestra en la figura 1. Hinsby K. et al. (2001) describe el diagrama de la figura 1 como un esquema simplificado de un acuífero confinado que funciona mediante un mecanismo de tipo pistón. Este esquema se puede aplicar a acuíferos no confinados que se conectan al mar, donde una alta demanda de agua produce un decaimiento en el nivel piezométrico. De Montety & Radakovitch (2008) implementaron este modelo para un caso estudio de un fenómeno de intrusión salina en un acuífero de agua dulce en zonas costeras en la delta de Rhone.

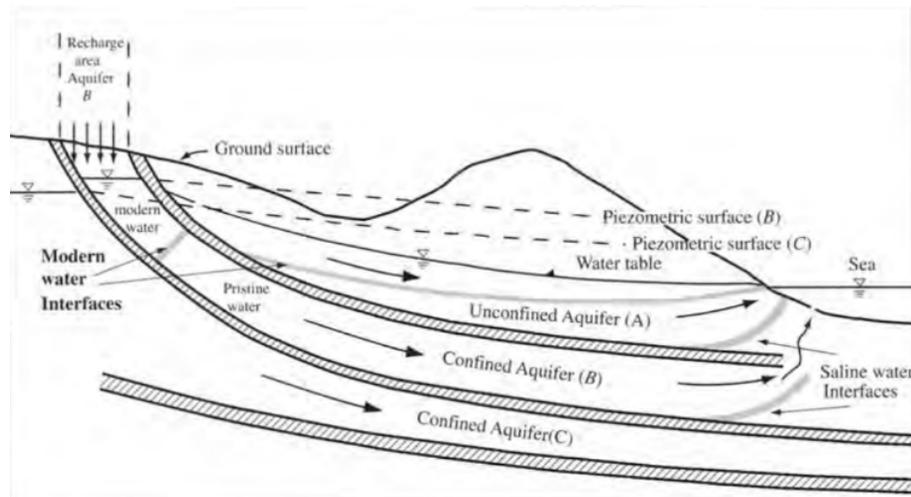


Figura 1. Esquema simple del fenómeno de intrusión salina en zonas costeras tomado de De Montety & Radakovitch (2008).

Una primera aproximación a este tipo de problemas la realizó Henry (1964), quien resuelve el problema de modelado del fenómeno de intrusión salina usando una serie de simplificaciones al acuífero a simular. El resultado del esquema con tales simplificaciones se observa en la figura 2. Las ecuaciones diferenciales obtenidas a partir de dicho modelo fueron resueltas por primera vez usando el método de Fourier-Galerkin (Henry, 1964). El esquema de Henry (1964) sirve como un esquema base para corroborar el

Sun et al. (2017) (figura 3) para modelar en 3D un acuífero con intrusión salina. En el modelo, L es la distancia de la frontera del mar hacia la costa, B es el espesor del acuífero y H_f es la altura del nivel freático a partir del fondo del acuífero. H_{ref} es la altura piezométrica y Q_f es la recarga de agua por unidad de área. En este esquema el acuífero está constreñido por una frontera impermeable por abajo y arriba, que se resuelve para los TDS usando el módulo EOS7 del software TOUGH3 (Pruess et al., 1999).

1.2. Hipótesis y Objetivos

1.2.1. Hipótesis

La incorporación de datos de conductividad eléctrica medidos en pozos como información *a priori* en el esquema de modelado inverso de datos AMT ayuda a una mejor caracterización de la evolución de la interfaz de la intrusión salina en un acuífero, así como en la determinación de parámetros geohidrológicos en acuíferos costeros.

1.2.2. Objetivo general

Caracterizar el fenómeno de intrusión salina realizando una inversión 3D usando datos hidrogeológicos y audio-magnetotelúricos.

1.2.3. Objetivos Específicos

- Buscar una estrategia para simular el fenómeno de intrusión salina a partir de datos AMT y datos hidrogeológicos usando el modelo de referencia de Henry (1964).
- Reproducir distribuciones en 3D de conductividades eléctricas del agua y de TDS a partir del modelo de referencia de Henry (1964) y el modelado hidrogeológico usando el programa TOUGH3.
- Implementar un algoritmo de inversión de datos audiomagnetotelúricos para un acuífero confinado con intrusión salina.

1.2.4. Organización del trabajo

Esta tesis se organiza en las siguientes secciones. En el capítulo 2 se plantea el marco teórico detrás del modelado hidrogeológico de TOUGH3 y del modelado de datos AMT con UHO3DMT. En el capítulo 3

se plantea la metodología que se usará para el modelado directo y el algoritmo de inversión, donde se definen los valores de las constantes y parámetros a invertir. Posteriormente, en el capítulo 4 se exponen los resultados obtenidos del modelado directo de un acuífero con intrusión salina y en el capítulo 5 se exponen los resultados obtenidos del algoritmo de inversión. Por último, en el capítulo 6 se analizan algunos puntos de interés y se resumen los resultados y observaciones generales en las conclusiones.

Capítulo 2. Marco teórico

En este capítulo se describen los principios y fundamentos en los cuales se basa el modelado directo para un acuífero con intrusión salina definido por el problema de Henry (1964). En la sección 2.1 se describen los principios teóricos que rigen al método magnetotelúrico y en la sección 2.2 se definen los fundamentos del modelado hidrogeológico con TOUGH3.

2.1. Modelado de datos magnetotelúricos

2.1.1. El método magnetotelúrico (MT)

El método magnetotelúrico (MT) es una técnica que involucra la medición de las fluctuaciones naturales de las componentes ortogonales del campo eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{B} en la superficie de la Tierra. Los datos obtenidos del método MT, dada una cierta frecuencia f , se encuentran dentro del tensor de impedancias \underline{Z} de segundo rango (Chave et al., 2012), que mide la oposición ofrecida al flujo de corriente en un circuito de corriente alterna debido a la resistencia. La impedancia relaciona las componentes horizontales del campo eléctrico y magnético:

$$E_i = \frac{1}{\mu_0} Z_{ij} B_j \quad (1)$$

donde Z_{ij} está compuesto por una parte real y una parte imaginaria y $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ T} \cdot \text{m} \cdot \text{A}^{-1}$ es la permeabilidad magnética en el vacío (Simpson & Bahr, 2005). La magnitud de Z_{ij} se relaciona con la resistividad aparente:

$$\rho_{a,ij(\omega)} = \frac{1}{\mu_0 \omega} |Z_{ij}(\omega)|^2 \quad (2)$$

y la parte imaginaria de Z_{ij} se relaciona con el corrimiento de la fase ϕ_{ij} a causa de la atenuación de las ondas EM al entrar en la Tierra:

$$\phi_{ij} = \tan^{-1} \left(\frac{\text{Im} \{Z_{ij}\}}{\text{Re} \{Z_{ij}\}} \right). \quad (3)$$

El modelado directo 3D consiste en obtener los campos eléctrico y magnético (\mathbf{d}) a partir de una distribución de conductividades (\mathbf{m}) del subsuelo, solucionando un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que describen el fenómeno usando métodos de diferencias finitas (Yee, 1966); (Newman & Alumbaugh, 1995) o elementos finitos.

El comportamiento de los campos electromagnéticos en el subsuelo esta definido por las ecuaciones de Maxwell, que en frecuencias bajas pueden simplificarse a la ecuación de Helmholtz en términos del campo eléctrico:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -i\omega\sigma\mathbf{E}, \quad (4)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\sigma}(\nabla \times \mathbf{H}) = -i\omega\mu\mathbf{H}. \quad (5)$$

A diferencia del problema directo, el inverso busca encontrar el modelo (\mathbf{m}) que mejor describa los datos observados (\mathbf{d}), tal que

$$\mathbf{m} = F^{-1}(\mathbf{d}). \quad (6)$$

Sea el problema del tipo lineal, entonces el modelo será igual a la matriz m por una matriz de constantes \mathbf{A} , de tal forma que

$$F(\mathbf{d}) = \mathbf{A}\mathbf{m}. \quad (7)$$

Esta forma permite una inversión directa para encontrar el valor de m . En la presente tesis se implementa el método de mínimos cuadrados para inversión, donde se busca minimizar una función objetivo donde los parámetros del modelo que se buscan resolver son una función lineal en el espacio (Nocedal & Wright, 2006).

El método de mínimos cuadrados parte de minimizar una función objetivo $f(x)$ donde el modelo $\phi(x; t)$ es una función lineal de x . La función objetivo esta dada por:

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m r_j^2(x), \quad (8)$$

donde $f(x)$ depende de residuales $r_j(x)$ de la forma $r_j(x) = \phi(x; t) - y_j$ o, en su forma matricial, $r(x) = Jx - y$.

Minimizando la función $f(x)$, para que los datos observados se acercan lo más posible a los datos sintéticos se obtiene la función objetivo a minimizar:

$$\lim_{j \rightarrow 0} r_j(x) = \lim_{j \rightarrow 0} (d_{obs} - d_{sin}) \rightarrow 0. \quad (9)$$

2.1.2. Modelado AMT con el programa de UHO3DMT

UHO3DMT es un software desarrollado por Gallardo-Romero (2020) escrito en C++ que se enfoca en hacer modelado directo de datos magnetoteléuricos para perfiles de conductividad en 3D. El software considera cambios topográficos y aplica la técnica de elementos finitos para resolver la ecuación de Helmholtz (ecuaciones 4 y 5). Además, cuenta con una implementación con interfaz de paso de mensajes (MPI) para ejecutarse en paralelo y disminuir el tiempo de cómputo.

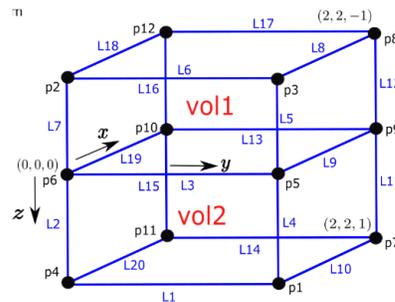


Figura 4. Líneas, puntos y elementos volumétricos, definidos en el software de generador de mallas de elemento finito llamado GMSH, para un ejemplo de la malla aire-tierra sin topografía.

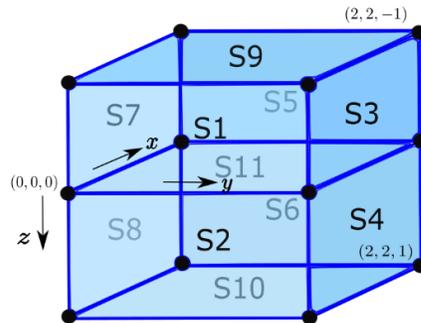


Figura 5. Superficies definidas en GMSH para un ejemplo de la malla aire-tierra sin topografía.

Para generar la malla no estructurada se llevaron a cabo los siguientes pasos:

1. Crear la malla que define el dominio del problema, usando el software de GMSH, basándose en las figuras 4 y 5.
2. Definir los puntos, líneas, superficies y volúmenes que limitan al dominio simulado usando el

software de generación de mallas GMSH, tomando como base los esquemas mostrados en las figuras 1 y 2.

3. Generar la malla no estructurada.
4. Refinar la malla en los sitios de evaluación y en la interfaz aire-tierra.
5. Exportar en formato .gmsH y convertir a formato .UHO compatible con UHO3DMT usando el programa mshtouho.py que incluye el software.
6. Crear un archivo de texto donde se guardan las conductividades asociadas a cada tetraedro ubicado dentro del dominio de interés.
7. Generar un archivo de texto donde se guarda el número de cada tetraedro en la malla no estructurada establecida por GMSH.

Una vez realizados los pasos anteriores, los archivos de entrada son trasladados a una carpeta en donde se ubica el programa de modelado directo que posteriormente se ejecuta. En el caso en el que se use la versión para computo paralelo se especifica un pbscript para correr el programa principal en el cluster, además de que se añaden unas pequeñas modificaciones en el ejecutable de UHO3DMT para especificar la cantidad de núcleos a emplear.

2.2. Modelado hidrogeológico para un acuífero con intrusión salina

2.2.1. Modelado hidrogeológico con TOUGH3

Las ecuaciones de balance de materia se derivan de la ley de conservación de la masa. Un sistema es una colección de partículas de ciertas fronteras (reales o hipotéticas) que están determinadas solamente por el observador y que limitan la región del universo que se desea estudiar. Existen dos tipos de sistemas: abiertos y cerrados. Un sistema abierto transfiere material por la frontera del sistema (figura 6) y un sistema cerrado es aquel que no permite interacción alguna con sus alrededores.

Elegido el sistema, lo que sigue es describirlo mediante magnitudes relacionadas con el comportamiento del sistema al interactuar con el entorno. Asociado a cada sistema existe un conjunto de atributos macroscópicos susceptibles a medirse experimentalmente, a los cuales pueden asignarse valores numéricos, como la presión, la temperatura, el volumen, etc. Estos atributos se denominan variables o funciones de estado. Un balance macroscópico de masa ignora los detalles de un sistema y equivale a un balance

alrededor de todo el sistema. Las variables dependientes como la temperatura y el TDS dejan de ser funciones de la posición y representan entonces un promedio global que toma en cuenta todo el volumen del sistema (Himmelblau & Riggs, 1997).



Figura 6. Sistema abierto donde hay intercambio de materia.

La ley de conservación de la masa se puede reducir a que la acumulación de masa es igual a la suma de la masa que entra y sale del sistema:

$$m_A = m_{in} - m_{out} + m_G - m_C \quad (10)$$

donde m_A es la acumulación de masa dentro del sistema, m_{in} es la masa transportada hacia el sistema a través de su frontera y m_{out} es la masa transportada hacia afuera del sistema a través de su frontera, m_G es la masa generada dentro del sistema y m_C es la masa consumida dentro del sistema.

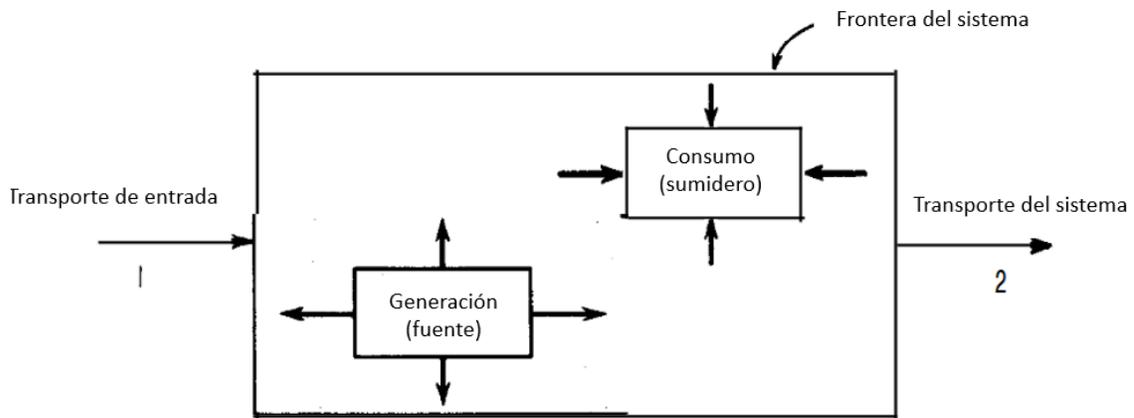


Figura 7. Configuración de un sistema para un problema no estacionario.

Expresando el término de masa acumulada como

$$m_A = \rho V(t + \Delta t) - \rho V(t), \quad (11)$$

donde m_A es la masa acumulada, ρ es la densidad del objeto, $V(t + \Delta t)$ es el volumen de la masa acumulada en un tiempo $t + \Delta t$ y $V(t)$ es el volumen de la masa acumulada en un tiempo t .

Por otro lado se simplifica la ecuación 10 para considerar fuentes puntuales y superficiales:

$$m_A = M_1 + M_2 = \rho v \Delta t S + \rho v \Delta t, \quad (12)$$

donde M_1 indica la unidad másica que entra en un tiempo Δt por una superficie de tamaño S , v es la velocidad de flujo y M_2 es la unidad másica que entra al sistema mediante una fuente puntual.

Consecutivamente se igualan las ecuaciones 11 y 12:

$$\rho V(t + \Delta t) - \rho V(t) = \rho v \Delta t S + \rho v \Delta t. \quad (13)$$

Dividiendo ambos lados de la ecuación 13 por Δt y aproximando el límite donde $\Delta t \rightarrow 0$ se obtiene la ecuación diferencial para balance de masa (Todd, 2009):

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} = \rho \vec{v} \cdot S \hat{n} + \rho v. \quad (14)$$

Generalizando para un número infinito de fuentes, sumideros y flujos, se reescribe:

$$\frac{d}{dt} \int^V \rho dV = \int^S \rho \vec{v} \cdot \hat{n} dS + \int^V \rho q dV. \quad (15)$$

La ecuación 15 se conoce como la ecuación integral de balance de masa y el término \vec{v} es considerado como la velocidad de flujo de Darcy (Todd, 2009).

Un software que resuelve la ecuación integral de balance de masa es el software TOUGH3 (Pruess et al., 1999). El programa TOUGH3 se enfoca en la simulación del flujo de agua multicomponente para un medio poroso y emplea una discretización del espacio y tiempo usando el método integral de diferencias finitas descrito por Narasimhan & Witherspoon (1976).

La forma general de las ecuaciones de balance de masa que usa TOUGH3 es:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_n} M^K dV_n = \int_{\Gamma_n} \mathbf{F}^\kappa \cdot \mathbf{n} d\Gamma_n + \int_{V_n} q^\kappa dV_n \quad \kappa = 1, \dots, NK \quad (16)$$

donde M es la masa o energía por unidad de volumen V , κ indica el componente (agua, aire, H_2 , solutos, etc.), q denota las fuentes y sumideros y \mathbf{F} denota el flujo debido a los procesos advectivos, dispersivos y convectivos. El primer término corresponde al término de acumulación de masa definido como:

$$M^K = \phi \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} X_{\beta}^{\kappa} \quad (17)$$

donde β es la fase del fluido, ϕ es la porosidad, S_{β} es la saturación de la fase β , ρ_{β} es la densidad de la fase β y X_{β}^{κ} es la fracción de masa del componente κ .

El término de flujo másico advectivo esta dado por:

$$\mathbf{F}^{\kappa}|_{\text{adv}} = \sum_{\beta} X_{\beta}^{\kappa} \left(-k \frac{k_{r\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla P_{\beta} - \rho_{\beta} \mathbf{g}) \right) \quad (18)$$

donde k es la permeabilidad absoluta, $k_{r\beta}$ es la permeabilidad relativa a la fase β , μ_{β} es la viscosidad, P es la presión del fluido en β y \mathbf{g} es el vector de gravedad.

Para el problema de intrusión salina se usará también el flujo másico asociado con la difusión:

$$\mathbf{F}^{\kappa}|_{\text{dif}} = - \sum_{\beta} \phi \tau_0 \tau_{\beta} \rho_{\beta} d_{\beta}^{\kappa} \nabla X_{\beta}^{\kappa} \quad (19)$$

donde d_{β}^{κ} es la difusión molecular por κ en fase, \mathbf{u}_{β} es la velocidad de Darcy en la fase β y $\tau_0 \tau_{\beta}$ es la tortuosidad del medio poroso.

TOUGH3 cuenta con distintos módulos que cumplen funciones de modelado de parámetros termodinámicos distintos (Pruess et al., 1999). La figura 8 muestra la arquitectura del funcionamiento del programa TOUGH3 y sus distintos módulos. El módulo de mayor relevancia para esta tesis es el EOS7, que modela fracciones másicas de componentes de sal y agua en un medio saturado, así como también modela los parámetros termodinámicos dados por la tabla 2.

Para ingresar los parámetros a modificar en el programa de TOUGH3, el software emplea un archivo de tipo texto el cuál se organiza por ocho apartados principales: ROCKS, MULTI, PARAM, DIFFU, TIMES, ELEME, CONNE, INCON, GENER. En el apartado de ROCKS se describe el del tipo de roca que se

usa en cada bloque de la malla, especificando su nombre, densidad (kg/m^3), porosidad, permeabilidad (m^2) en las direcciones x , y y z , conductividad térmica ($W/m^{\circ}C$) y calor específico ($J/kg^{\circ}C$). En el apartado MULTI se ingresan detalles sobre el número de componentes másicos usados para la simulación, el número de ecuaciones de balance de masa a resolver para cada bloque de la malla, el número de fases presente (que en el caso de la intrusión salina son 2) y si se toma en cuenta la difusión. El apartado PARAM indica la cantidad de parámetros a ingresar, la cantidad máxima de iteraciones en el tiempo y su espaciado, así como el criterio de convergencia relativo y absoluto.

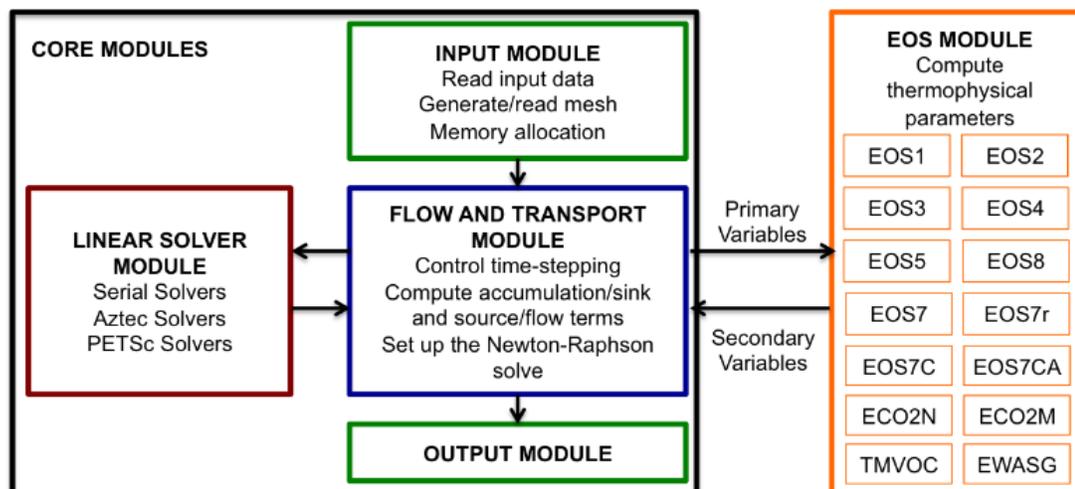


Figura 8. Arquitectura modular del programa TOUGH3.

Tabla 2. Datos de salida para el módulo EOS7 del software TOUGH3

Dato	Descripción
Presión	–
Temperatura	Solo en modo no isotérmico
Saturación	Para todas fases
Fracción masica	Fracción masica de todos los componentes para todas fases
Permeabilidad relativa	Permeabilidad relativa para todas las fases
Presión Capilar	Entre fases
Densidad	Densidad entre las fases mobiles
Calor	Solo en modo no isotérmico
Flujo total	–
Flujo difusivo	Solo cuando NB = 8

En el caso en el que la simulación emplee un proceso de difusión, la información se ingresa en el apartado DIFFU, donde se tiene que especificar el valor de difusión en gas y líquido para cada compuesto distinto (agua salada y agua dulce). En el apartado TIMES se especifican los tiempos en los que el usuario

registrará los datos de salida.

Los apartados de ELEME, CONNE, INCON Y GENER son apartados que requieren detallar la información de cada bloque de la malla. La sección de ELEME especifica los bloques de la malla con su posición, volumen y ubicación en el espacio. En CONNE se escriben las conexiones entre los bloques vecinos en la malla y sus interfaces. La sección de INCON especifica las condiciones de cada bloque en el tiempo inicial, su salinidad, presión y temperatura. Finalmente, GENER se usa para especificar el valor de flujo de fuentes y sumideros.

En cuanto al archivo de salida, la información después de la simulación se guarda en un archivo OUTPUT, OUTPUT_ CONNE, OUTPUT_ ELEME y OUTPUT_ GENER. A menos que el usuario especifique la impresión de un parámetro específico, el archivo OUTPUT registra el flujo de la sal, del agua dulce y del calor, la densidad de cada una de las fases en (kg/m^3) y la entalpía específica (J/kg) para las fuentes y sumideros. Además de estos datos, registra información sobre el número de iteraciones realizadas para cada tiempo en específico, la presión, la saturación de la fase líquida, el tiempo de simulación en segundos, la temperatura y la viscosidad.

Para realizar un modelo hidrológico con mayor exactitud, se implementó una corrección al modelado directo en Tough3. El programa, descrito en el manual de uso (Pruess et al., 1999), considera que los efectos de la salinidad en la viscosidad de la fase acuosa se modelan con una corrección polinómica en función de la viscosidad del agua pura. Esta relación está dada por la expresión:

$$\mu_m(P, T, X_b) = \mu_w(P, T) \cdot (1 + v_1 X_b + v_2 X_b^2 + v_3 X_b^3) \quad (20)$$

donde $v_1=0.4819$, $v_2 = -0.2774$ y $v_3 = 0.7814$ son coeficientes empíricos.

Tabla 3. Factores corregidos en el módulo EOS7 del modelo de TOUGH3

Nombre	Valor
Presión (Pa)	1.0000E+05
Densidad de agua salada (kg/m^3)	1.0250E+03
v_1	6.6000E-02
v_2	0
v_3	0

Sin embargo, la viscosidad del agua de mar es menor que el valor predeterminado que se usa en TOUGH3 y la densidad es distinta. A consecuencia de esto, se aplica en el archivo de entrada una corrección a la

densidad, así como a la viscosidad. A partir de las ecuaciones de Isdale et al. (1972) se cambiaron los parámetros a los indicados en la tabla 3

2.2.2. Conversión de datos de TDS a conductividad

La ley de Archie es ampliamente usada en hidrogeofísica para inferir la conductividad del medio poroso a partir de la conductividad eléctrica del agua y la porosidad del medio. Existen algunos estudios que describen su implementación. Tran et al. (2016) proponen un esquema de inversión para calcular los parámetros hidrogeológicos y petrofísicos usando la relación petrofísica de la ley de Archie. Kowalsky et al. (2012) realiza un modelado inverso de datos para un trazador de sal para relacionar la porosidad con la conductividad eléctrica. También se ha reportado su uso conjunto con el programa de MPiTOUGH2 para estimar parámetros hidrológicos con aplicaciones hidrogeofísicas (Commer et al., 2014).

Archie (1942) determinó que la resistividad de las arenas depende del factor de formación, que es la razón entre la resistividad media del medio poroso y la resistividad del agua que ocupa los poros. Para un medio saturado con porosidades entre 10 % y 40 %, y con una salinidad de entre 20,000 a 100, 000 mg de NaCl por litro, se obtiene una relación entre la porosidad y la resistividad del medio dada por:

$$R = R_w \theta^{-m}, \quad (21)$$

donde R es la resistividad del medio poroso cuando los poros están llenos, R_w es la resistividad del agua, θ es la porosidad y m el factor de cementación. Para areniscas consolidadas, $m \in (1.8, 2.0)$, y para areniscas no consolidadas y limpias, $m = 1.3$ (Archie, 1942).

Con el propósito de convertir datos de TDS a conductividad eléctrica del medio poroso, se relaciona el TDS con la conductividad del agua con la relación lineal dada por Walton (1989):

$$\sigma(f_s) = \left(\frac{f_s}{800} \right) * 0.1, \quad (22)$$

donde f_s son los datos de TDS en partes por millón (ppm) y σ es la conductividad eléctrica del agua en S/m para una temperatura de 15° .

Capítulo 3. Metodología: Estrategias de modelado e inversión de datos AMT y datos hidrogeológicos

3.1. ¿Por qué un algoritmo de inversión?

El fenómeno de intrusión salina se puede simular obteniendo un perfil de TDS mediante un modelado directo, el cuál parte de condiciones y parámetros que se conocen o se aproximan, como la conductividad eléctrica a lo largo del acuífero. El procedimiento usado para obtener parámetros específicos a partir de datos se llama inversión. En la presente tesis, el método de inversión hace uso de un modelado directo que obtiene los campos electromagnéticos E y B a partir de una distribución de concentraciones en sales disueltas totales. Luego, mediante el cálculo de las derivadas y la función objetivo, se calculan los nuevos datos y se comparan con los observados. De esta manera se define la dirección de búsqueda y de avance del algoritmo. Siguiendo la estructura mencionada puede encontrarse el valor verdadero de la conductividad eléctrica en el acuífero, de tal forma que esta reproduce los datos observados con cierta tolerancia. En la presente tesis se implementa el algoritmo de inversión con el objetivo de calcular los valores de conductividad dentro del acuífero y definir la interfaz entre el agua de mar y el agua dulce.

3.2. Parametrización

3.2.1. Selección de dimensiones del problema

Por simplicidad y con fines de validar los algoritmos desarrollados, se busca realizar un modelado directo e inversión del fenómeno de intrusión salina, así como simular el flujo de agua a lo largo del acuífero. Para plantear la malla y la parametrización del problema se retoma el acuífero confinado planteado por Henry (1964) (figura 2). Este esquema considera una densidad del agua dulce de $1000\text{kg}/\text{m}^3$, una densidad del agua de mar de $1025\text{kg}/\text{m}^3$, una conductividad hidráulica de $1 \times 10^{-2}\text{m}/\text{s}$, una porosidad de 0.35 y un coeficiente de difusión molecular de $1.89 \times 10^{-2}\text{m}^2/\text{s}$. Para comparar los resultados con un modelo similar se siguen las dimensiones del acuífero que usa Sun et al. (2017) para el problema de Henry (1964).

La figura 9 muestra las dimensiones del acuífero planteado por Sun et al. (2017), con 200m de longitud y 100m de profundidad. Sin embargo, para probar el algoritmo de inversión en 3D, se añaden 100m de anchura al modelo original de Sun et al. (2017). Entre otras consideraciones esta que la recarga de agua

dulce sea constante en la frontera izquierda, que la intrusión salina comience en la frontera derecha y que haya un flujo de extracción de agua a través de cinco pozos.

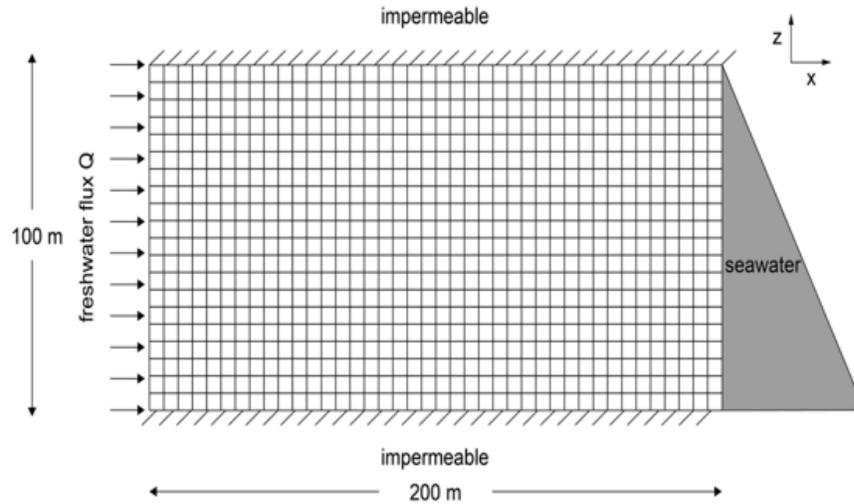


Figura 9. Discretización en X, Y para el modelo hidrogeológico.

3.2.2. Selección de variables y constantes del problema

Para definir las variables y constantes que se usarán en el algoritmo de inversión se requiere conocer el esquema de modelado directo que se usará. En la presente tesis se usa un modelado directo en serie, el cuál se estructura sobre los siguientes pasos:

1. A partir de los parámetros hidrogeológicos y las condiciones iniciales y de frontera definidas se genera un perfil de TDS con TOUGH3.
2. Con la ley de Archie se convierten los datos de TDS en conductividades eléctricas del medio poroso.
3. De la distribución de conductividades eléctricas se obtienen datos de campo eléctrico y magnético con el programa UHO3DMT.

Durante la primera fase del modelado directo se discretizó el espacio en un dominio definido por:

$$0m < X < 200m, \quad 0m < Z < 100m, \quad -100m < Y < 0m, \quad (23)$$

con un espaciado de $5m$ entre cada elemento de la malla, en los ejes x , y y z , usando el programa preexistente de la página <http://esdtools.lbl.gov/meshm/>. Se obtiene una malla en el formato

de archivo de entrada para el programa de TOUGH3 (figura 10). Los parámetros hidrogeológicos que permanecen constantes en el paso uno del esquema de modelado directo vienen dados por la tabla 4.

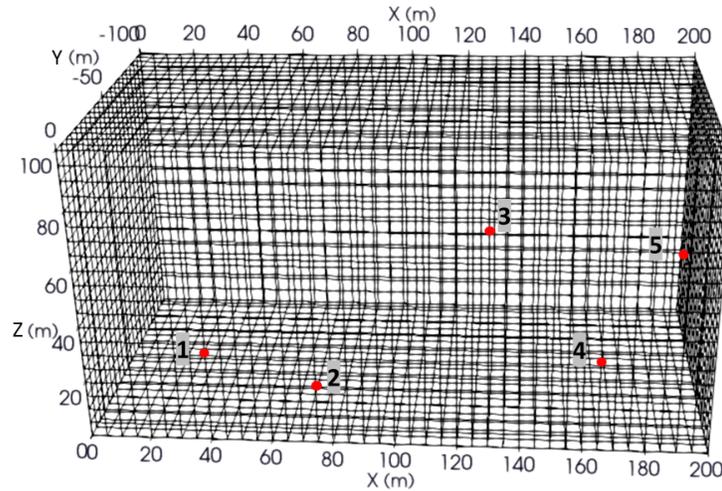


Figura 10. Discretización de malla en TOUGH3 con la posición de los pozos descritos en la tabla 5.

Tabla 4. Valor de parámetros hidrogeológicos para el modelado directo con TOUGH3.

Nombre	Valor
ϕ : Porosidad	0.35
ρ : densidad de la roca (kg/m^3)	2500
d_i^k : Coeficiente de difusión molecular en agua y salmuera (m^2/s)	2.1825×10^{-6}
α_L : Dispersividad longitudinal (m)	0.0
α_T : Dispersividad transversal (m)	0.0
Calor específico ($J/kg \text{ } ^\circ C$)	800
g : Aceleración gravitacional (m/s^2)	9.81
$\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$: Permeabilidad (m^2)	1.18×10^{-12}
Q : Recarga de agua dulce (m^3/d)	6.6×10^{-1}
ρ_w : densidad de agua de mar (kg/m^3)	1000
ρ_s : densidad de agua salada (kg/m^3)	1025
T : temperatura (C)	15
m : factor de cementación	2.0
t : tiempo (años)	30

Como se mencionó previamente, se plantea la existencia de cinco pozos de extracción con flujos indicados en la tabla 5. El flujo de extracción de los pozos se calcula de los datos recabados del acuífero de Maneadero en Ensenada, Baja California (Luján & Romo, 2010). El flujo de extracción reportado para el

acuífero con volumen de $637.5 \times 10^6 \text{ m}^3$ es de -815 kg/s . Escalando este flujo de extracción al acuífero propuesto de $100 \times 200 \times 100 \text{ m}^3$ y considerando una porosidad de 0.35 se obtiene un volumen efectivo de $700,000 \text{ m}^3$ y un flujo de extracción escalado de 0.8949 kg/s por pozo. Este nuevo valor fue el que se usó como referencia central para definir los flujos de extracción de la tabla 5.

Tabla 5. Coordenadas y flujos de pozos de extracción para el modelado directo con TOUGH3 según la malla de la figura 10, donde $Z(\text{m})$ es la distancia entre el subsuelo del acuífero hasta el punto de extracción.

No. de pozo	$x(\text{m})$	$Z(\text{m})$	$Y(\text{m})$	$F_{in} = Q\rho_w(\text{kg/s})$
1	27.5	7.5	57.5	-0.37898
2	72.5	17.5	27.5	-0.45898
3	127.5	67.5	77.5	-0.17898
4	167.5	37.5	67.5	-0.10898
5	187.5	87.5	7.5	-0.07898

Para el segundo paso del modelado directo en serie, las variables a usar son los valores de TDS, la porosidad y el factor de cementación. La conductividad eléctrica del medio poroso en el acuífero se relaciona con la conductividad del agua mediante la ecuación 22. Finalmente, el tercer paso del modelado directo usa como variables de entrada las conductividades dentro y fuera del acuífero.

Los datos manejados en la presente tesis corresponden a datos audiomagnetoteluricos (AMT) y datos de TDS, con el fin de tener una mayor cantidad de datos para estabilizar el problema inverso. Por otro lado, el tipo de datos que se usan para el algoritmo de inversión son impedancias, de tal manera que se incluye el campo magnético y eléctrico a la vez.

3.2.3. Selección de variables como parámetros a resolver

Con el fin de obtener la mayor cantidad de información del algoritmo de inversión, la elección de los parámetros a calcular con la inversión se hace con el objetivo de:

- Calcular parámetros hidrogeológicos de relevancia
- Conocer la geometría de la intrusión salina

Entre los parámetros que más afectan al perfil final de conductividades eléctricas se encuentra la porosidad. La porosidad afecta los resultados finales al ser usada para los primeros dos pasos del modelado directo. En el primer paso se ingresa la porosidad en el archivo de entrada de TOUGH3 para calcular el perfil de TDS y en el segundo se usa en conjunto con el factor de cementación para realizar la conversión

de TDS a conductividad eléctrica. Otros parámetros que pueden ser de interés, en cuanto al monitoreo del flujo de agua, son la recarga de agua y la permeabilidad.

El parámetro de mayor relevancia a calcular en la inversión es la conductividad eléctrica. No obstante, este parámetro no se puede modificar directamente como una información inicial. La manera de aproximar este problema es usando una variable que permita controlar el avance de la intrusión salina de manera indirecta. El parámetro que permite variar la geometría de la intrusión salina de manera indirecta es el tiempo y este se usa como un artificio matemático para ajustar el avance en el eje x de la intrusión salina a los datos observados en la inversión.

En resumen, los parámetros a calcular en la inversión son los siguientes:

- Porosidad
- Permeabilidad
- Recarga de agua
- Factor de cementación
- Tiempo (geometría)

3.3. Modelado directo en serie de datos AMT y datos hidrogeológicos

El modelado directo en un algoritmo de inversión cumple el propósito de obtener datos sintéticos a través de la resolución de ecuaciones diferenciales e integrales que modelan el fenómeno. En esta tesis se usa un modelado directo en serie. Este tipo de modelado se basa en el acoplamiento de dos programas de modelado directo distintos: TOUGH3 (Pruess et al., 1999) que corresponde a la parte del modelado hidrogeológico, y UHO3DMT (Gallardo-Romero, 2020), que corresponde al modelado geofísico. Ambos programas se acoplan en función de los datos de entrada y de salida, por lo que definir el objetivo y los parámetros a resolver son de importancia para decidir sobre cómo se va a armar el modelado directo en serie. En ambos casos se usan dos dominios distintos, donde el dominio que resuelve el modelado de TOUGH3 se define según las bases del acuífero y el dominio usado con UHO3DMT considera todo el área de estudio, incluyendo los medios que rodean el acuífero.

3.3.1. Esquema del modelado directo en serie

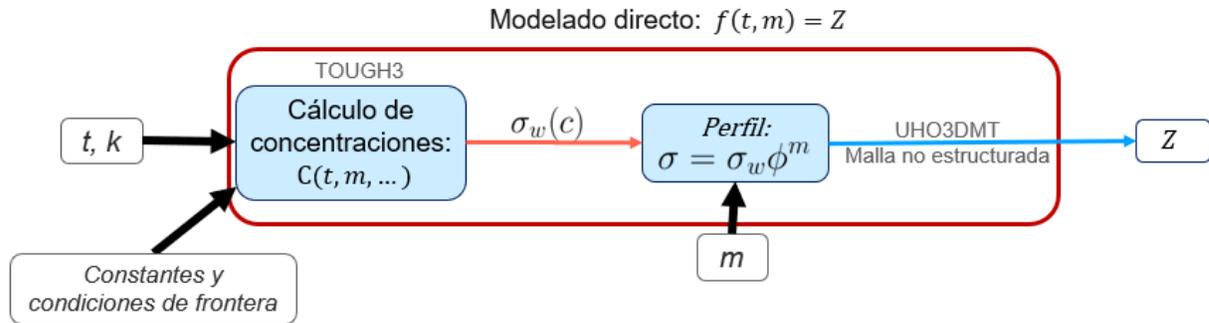


Figura 11. Esquema de modelado directo

El modelado directo usado en el algoritmo principal se compone de tres programas distintos: el programa TOUGH3 EOS7 se usa para obtener datos de TDS, un segundo programa se emplea para convertir los datos de TDS en conductividades eléctricas, y el tercer programa, UHO3DMT, obtiene datos de impedancias a partir de un modelo de conductividades eléctricas.

Los pasos en los cuales se emplean los tres programas son esquematizados en la figura 11 y se resumen en los siguientes puntos:

1. Se añade al archivo de entrada información de la discretización de la malla, del tiempo y de las condiciones de Dirichlet para el dominio del acuífero.
2. Se ingresa la aproximación de los parámetros a resolver junto con las constantes hidrogeológicas como datos de entrada a TOUGH3.
3. Se realiza una ejecución de TOUGH3 y se obtienen valores de TDS para cada punto de la malla.
4. Los valores de TDS se convierten en conductividades eléctricas usando la ley de Archie definida en la ecuación 21, con las constantes de Archie modificadas en función de los parámetros a invertir.
5. Se crea la discretización de la malla tetraédrica para los datos de entrada que usa el programa de UHO3DMT.
6. Se asignan las conductividades obtenidas a cada volumen de la malla tetraédrica que corresponde al dominio dentro del acuífero.

7. Se realiza una ejecución del programa UHO3DMT y se extraen los datos en su forma de impedancias.

3.3.2. Condiciones de Dirichlet para el modelado hidrogeológico

Las condiciones de frontera a aplicar basándose en el diagrama de la figura 12 son las siguientes:

- Las fronteras EACH y BDGF se definen como impermeables, tal que el flujo másico a través de estas dos fronteras es nulo.
- Se conserva la presión hidrostática a lo largo de todo el acuífero.
- La frontera lateral izquierda AEBF mantiene una salinidad constante igual a 0 g/L y la frontera lateral CHDG una salinidad constante igual a 35 g/L.
- La recarga de agua dulce en la frontera izquierda se mantiene con un valor inicial de $0.66m^3/d$.

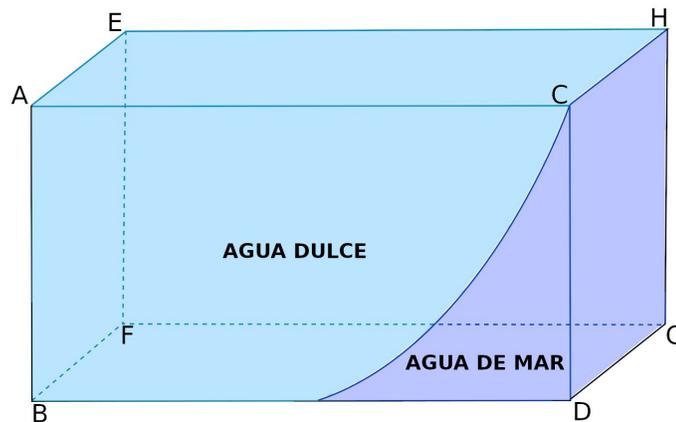


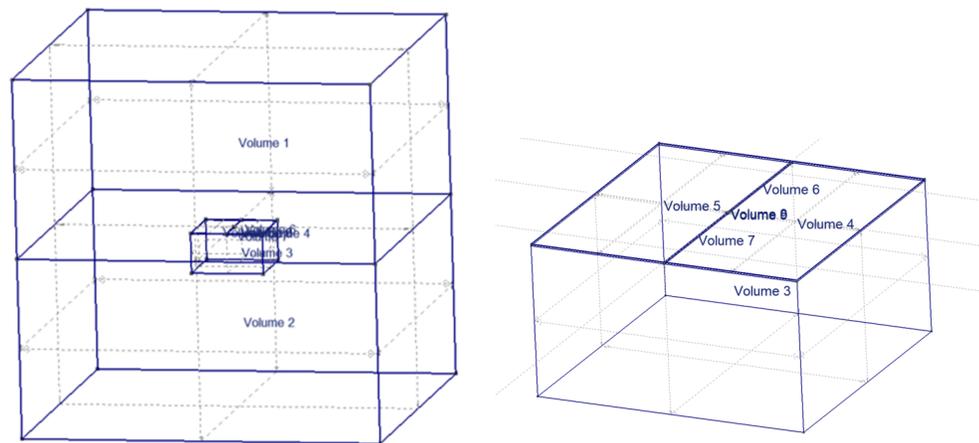
Figura 12. Diagrama del acuífero con intrusión salina.

3.3.3. Discretización de la malla

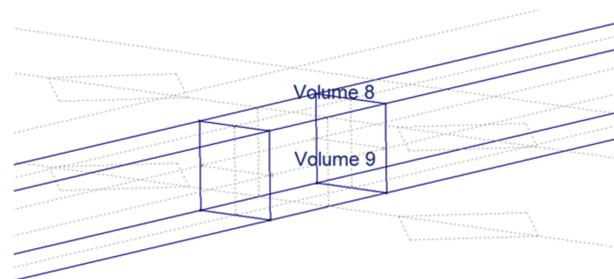
La malla usada por el programa de modelado de datos MT UHO3DMT es estructurada para toda región fuera de las fronteras del acuífero estudiado. De esta manera se pueden asociar conductividades eléctricas para regiones determinadas del espacio. La división de los distintos dominios se ilustra en la figura 13 y en la tabla 6 se señala su valor de resistividad.

Tabla 6. Resistividades para los volúmenes en la malla estructurada de GMSH

Volumen	Resistividad (Ωm)
1	10^8
2	200
3	200
4	200
5	200
6	5
7	80
8	malla no estructurada
9	200



(a) Estructura cúbica, donde el volumen 1 indica el aire y el 2 la tierra. (b) Prisma rectangular definido dentro del dominio cúbico, y que engloba la estratificación del medio.



(c) Estructura del acuífero a modelar dentro de la estratificación de la tierra, señalada en la figura 13(b)

Figura 13. Malla estructurada hecha en el programa de GMSH partiendo de un dominio de $100km \times 100km \times 100km$.

Por otra parte, el tamaño del cubo del dominio general dado por la figura 13(a) está definido con una anchura de 2 unidades de GMSH, donde cada unidad equivale a $100km$. De esta manera, se considera el

dominio alrededor del acuífero como un medio continuo en tres dimensiones. El aire representado por el volumen 1 está definido en el programa UHO3DMT con una resistividad eléctrica de $10^8 \Omega \cdot m$, mientras que el volumen 2 está definido con una resistividad eléctrica de $200 \Omega \cdot m$. Por otro lado, hay otro dominio más pequeño dentro del dominio de los volúmenes 1 y 2, el cuál se puede observar en la figura 13(b). En este prisma se estratifica el suelo para definir la conductividad eléctrica arriba del acuífero, así como abajo y a los lados. En todos los casos se considera una resistividad eléctrica de $200 \Omega \cdot m$ (a excepción de los volúmenes 6 y 7, que son los dos volúmenes que se encuentran colindando con el lado cuadrado del acuífero, como se señala en las figuras 13(b) y 13(c)). El volumen 6 toma un valor de $5 \Omega \cdot m$, representando la resistividad eléctrica del mar, y el volumen 7 toma un valor de $80 \Omega \cdot m$, que representa la resistividad del agua dulce.

Consecutivamente se refinó la malla estructurada alrededor de la frontera aire-tierra usando una refinación de forma cuadrática, y también cerca de las perforaciones de pozos, indicadas en la tabla 5, usando una refinación esférica de radio 0.003 en coordenadas GMSH.

Definiendo la malla estructurada dentro del dominio del acuífero, este se discretiza en tetraédros usando un esquema cuadrático de la forma:

$$f(x, y, z) = 1.0 \cdot 8^{\frac{-1.6+|1-y|}{2} + \frac{|1-x|}{2} + \frac{|z|}{1}}. \quad (24)$$

Como se menciono anteriormente, los volúmenes que rodean al acuífero son asociados con conductividades eléctricas constantes. Sin embargo, para el volumen 9 la conductividad eléctrica varía, de tal manera que a cada tetraédro de la malla discretizada se le asigna un valor de conductividad eléctrica asociada a la posición del centro geométrico de cada tetraedro en la malla del perfil de conductividad eléctrica. La figura 14 muestra la discretización tetraédrica usada en el volumen 9 y la discretización esférica vista desde arriba en las zonas de perforación de pozos indicadas en la tabla 5.

Para evitar la distorsión de los datos debido a las fronteras del cubo en el dominio, se consideró la profundidad del volumen 2 de la figura 13(b) mucho mayor que el skin-depth del acuífero. Tomando el rango de frecuencias de AMT de entre $10 Hz$ y $1 \times 10^5 Hz$, se usaron 16 frecuencias tomando en cuenta una resistividad de $100 \Omega \cdot m$, obteniendo así el rango de skin-depth:

$$\delta = [15.9154m, 1591.5494m]. \quad (25)$$

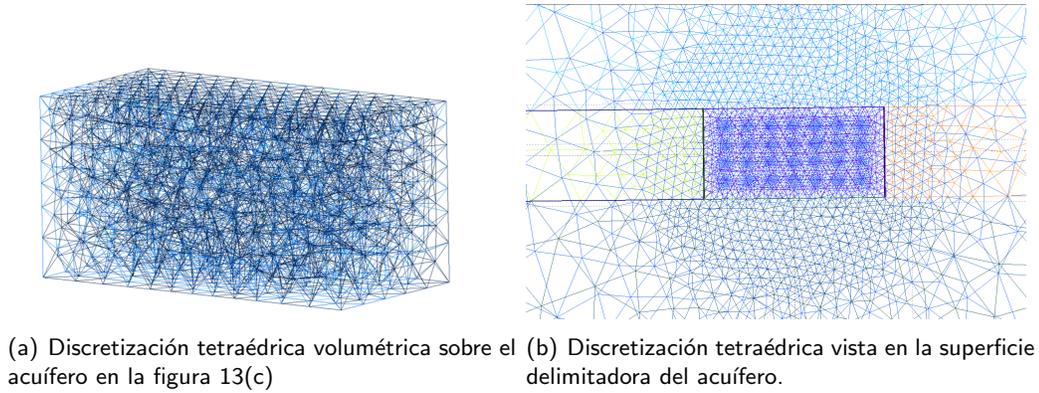


Figura 14. Discretización usada para la malla estructurada para conductividad eléctrica en el dominio de la intrusión salina

Para simular la intrusión salina se discretizó el tiempo en TOUGH3, partiendo de un tiempo inicial de 0 segundos, cuando no hay intrusión salina en el acuífero, y avanzando en intervalos de $\Delta t = 1s$, que se incrementan a lo largo de la simulación. Por otro lado, al resolver la ecuación de balance de masa con el método numérico de Newton-Raphson se usó un número máximo de 8 iteraciones newtonianas por ciclo de tiempo.

3.4. Algoritmo de inversión en serie

El algoritmo de inversión en serie que se implementa en la presente tesis hace uso del modelado directo en serie de la sección 3.3. Este algoritmo busca minimizar una función objetivo, tal que los datos sintéticos se asemejen a los datos observados. El método que se plantea es el de un algoritmo de mínimos cuadrados, donde el cálculo del jacobiano se realiza implementando variaciones en los parámetros a resolver.

3.4.1. Algoritmo de búsqueda

Derivando la ecuación 8 y expresando las derivadas en términos del jacobiano J , que incluye las primeras derivadas parciales de los residuales, se obtiene:

$$\nabla f(x) = J^T(Jx - y) = J^T r \quad \nabla^2 f(x) = J^T J \quad (26)$$

Como para cualquier punto x^* en el cuál $\nabla f(x^*) = 0$ y es el minimizador global de f , existe un x^* que satisfice:

$$J^T J x^* = J^T y \quad \forall \quad \min_x \frac{1}{2} \|r_j\|^2. \quad (27)$$

El sistema de ecuaciones dado por (27) son las *ecuaciones normales* (Nocedal & Wright, 2006) de la ecuación 8.

Para funciones $f(x)$ no lineales se puede usar el método de Gauss Newton, que es una modificación del método de Newton de *steepest descent*, que de una dirección de búsqueda p y tamaño de paso α , busca minimizar p aplicando una aproximación de Taylor de primer orden a $f(x_k + p) \approx m_k(p)$. Derivando $m_k(p)$ e igualando a 0 se obtiene:

$$p_k^N = -(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k. \quad (28)$$

Sustituyendo la ecuación 26 en la ecuación 28 se obtienen las ecuaciones normales

$$J_k^T J_k p_k^{GN} = -J_k^T r_k, \quad (29)$$

donde el primer término de las ecuaciones normales es el hessiano dado por la ecuación 26, implicando que solo se necesita calcular las primeras derivadas del residual para calcular el hessiano. Así, de las ecuaciones 27 y 29 se puede concluir que p_k^{GN} es una solución del sistema lineal de ecuaciones que ahora minimiza

$$\min_p \frac{1}{2} \|J_k p + r_k\|^2. \quad (30)$$

El criterio de minimización se considero como:

$$\sqrt{\frac{\sum_i^n (d_i^{obs} - d_i^{sin})^2}{n}} < 0.02\% \quad (31)$$

Notemos que en este método el valor de $-r_k$ dentro de la ecuación 29 equivale a y de la ecuación 27.

En general, la ecuación 29 se reduce a la expresión

$$x = J^T (J^T J)^{-1} (d_{obs} - d_{sin}). \quad (32)$$

Una manera simple en la que se puede obtener el jacobiano es mediante el método de perturbaciones, usando la definición de una derivada

$$J = \left[\frac{\partial f}{\partial \xi_1}, \frac{\partial f}{\partial \xi_2}, \dots \right] = \left[\lim_{\Delta \xi_1 \rightarrow 0} \frac{f(\xi_1 + \Delta \xi_1) - f(\xi_1)}{\Delta \xi_1}, \dots \right] \quad (33)$$

donde f es la función de los datos a variar.

3.4.2. Esquema de inversión

El esquema de inversión para un algoritmo de mínimos cuadrados se puede sintetizar en los siguientes pasos:

1. Se proponen los valores iniciales de los parámetros a resolver para la primera iteración del algoritmo de inversión.
2. A partir del modelado directo de los parámetros propuestos se calculan los datos sintéticos d^{sin} .
3. Se calcula el jacobiano con la ecuación 33, donde $f(\xi_i)$ son los datos sintéticos y $f(\xi_i + \Delta\xi_i)$ son los datos obtenidos del modelado directo del parámetro i con un incremento $\Delta\xi_i$.
4. Los datos obtenidos a partir del paso anterior se aplican a la ecuación 32.
5. El valor obtenido del paso anterior se suma a los parámetros propuestos del paso 2.
6. A partir del modelado directo de los parámetros nuevos se calculan los datos sintéticos d^{sin} .
7. Si la diferencia entre los datos observados y los datos sintéticos es mayor que una tolerancia de 0.005, se repite el procedimiento del paso 3 al 6.

El valor RMS se calcula de la siguiente manera:

El criterio de minimización se considero como:

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_i^n (d_i^{obs} - d_i^{sin})^2}{n}} \quad (34)$$

donde d_{obs} son los datos observados, d_{sin} son los datos sintéticos y n es el número total de datos usados en la inversión, el cuál equivale a 3584.

Capítulo 4. Resultados del modelado directo

El modelado directo que se usa para el algoritmo de inversión se divide en tres partes, siendo la primera parte la que corresponde a la obtención de perfiles de TDS con TOUGH3 (sección 4.1), la segunda corresponde a la conversión de TDS a conductividad eléctrica y la tercera la que corresponde a la obtención de datos de campo eléctrico y magnético (sección 4.2).

4.1. Aplicación del modelado hidrogeológico con TOUGH3

Se modelaron dos casos distintos de acuíferos:

- CASO A: Un acuífero homogéneo sin pozos de extracción y con una intrusión salina comenzando en la frontera $x = 200\text{m}$.
- CASO B: Un acuífero homogéneo con cinco pozos de extracción y una intrusión salina comenzando en la frontera $x = 200\text{m}$.

4.1.1. Caso A: Un acuífero homogéneo con intrusión salina

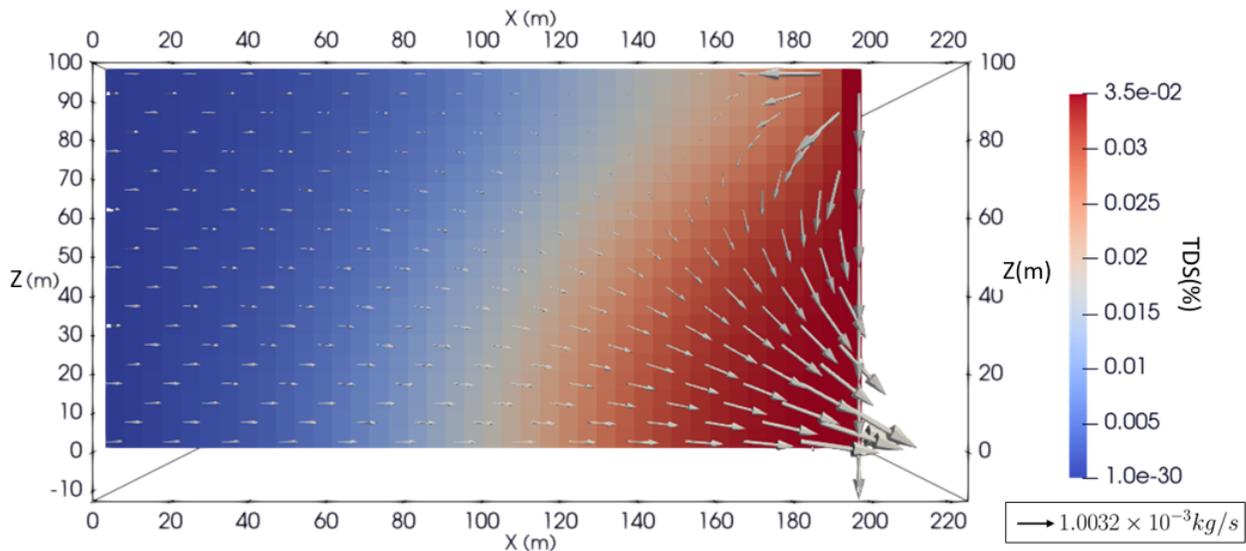


Figura 15. Sección vertical del modelo de TDS para el caso A, luego de un periodo tiempo de 30 años. Los vectores señalan la dirección y magnitud del flujo de agua.

Este experimento se realizó con los parámetros definidos en la tabla 4. La figura 15 muestra una sección vertical del acuífero simulado obtenido en $t=30$ años, donde los vectores indican la dirección y magnitud

del flujo másico de agua (kg/s) a lo largo del acuífero. Dada la geometría del modelo, los valores de TDS no varían en la dirección y .

En la figura 15 se visualiza la entrada de agua dulce por la frontera izquierda y su migración hacia la frontera derecha. De igual manera, se aprecia cómo el agua de mar se infiltra en el acuífero desde la parte superior de la frontera derecha, y sale del acuífero por la parte inferior. La dirección en la que circula el agua dulce se debe a que el flujo lateral de agua dulce es mucho mayor que el flujo lateral causado por la densidad del agua de mar. Por lo tanto, el agua salada se regresa por la frontera derecha y en el proceso se mueve una mayor cantidad de agua de mar hacia el fondo del acuífero.

El fenómeno de advección se resuelve en TOUGH3 de acuerdo a la ley de Darcy, la cual describe un campo vectorial que afecta la velocidad de transporte de materia en el acuífero. De acuerdo a la ley de Darcy, descrita en la ecuación 18, un flujo másico se genera al existir (1) un gradiente de presión dentro del medio poroso y/o (2) diferencias de densidad entre fases (density driven flow). El efecto que predomina en el acuífero simulado es el segundo, y se caracteriza por el segundo término de la ecuación 18. Al tener dos sustancias con diferente TDS, la gravedad ejercerá una fuerza distinta sobre cada sustancia, lo que moverá el agua de mar debajo del agua dulce. El flujo másico de la ecuación de Darcy a la vez se relaciona con la ley de conservación de masa, por lo que al ser igualada a la ecuación 17 genera una dependencia flujo-masa. Esto se refleja en la esquina inferior derecha y superior derecha de la figura 15, donde la combinación del efecto de flujo debido a la densidad y el flujo inducido por la recarga de agua genera una circulación de agua de mar.

Otro rasgo que se distingue de la figura 15 es la forma ligeramente cóncava que se observa en la geometría de la interfaz entre el agua dulce y el agua de mar. Esto se debe a la migración del agua de mar hacia el fondo del acuífero, pero también al cambio de velocidad de flujo del agua dulce. Como se mencionó anteriormente, la velocidad de flujo de agua dulce se ve afectada por el TDS y esto, en consecuencia, genera un movimiento circular, el cuál produce la concavidad observada. Así mismo, puede haber otros factores que afecten la forma de la interfaz, como las condiciones iniciales y las condiciones de frontera. Un caso de estudio sobre cómo un cambio en las condiciones iniciales de salinidad afectaría la interfaz se detalla más en el anexo A, donde se simula un acuífero con porosidad variable.

4.1.2. Caso B: Un acuífero homogéneo con intrusión salina y con pozos

En este caso, se modela un acuífero con pozos. La posición de los cinco pozos viene dada en la tabla 5 y los parámetros restantes se ajustaron a los descritos en la tabla 4. De la simulación se presentan dos

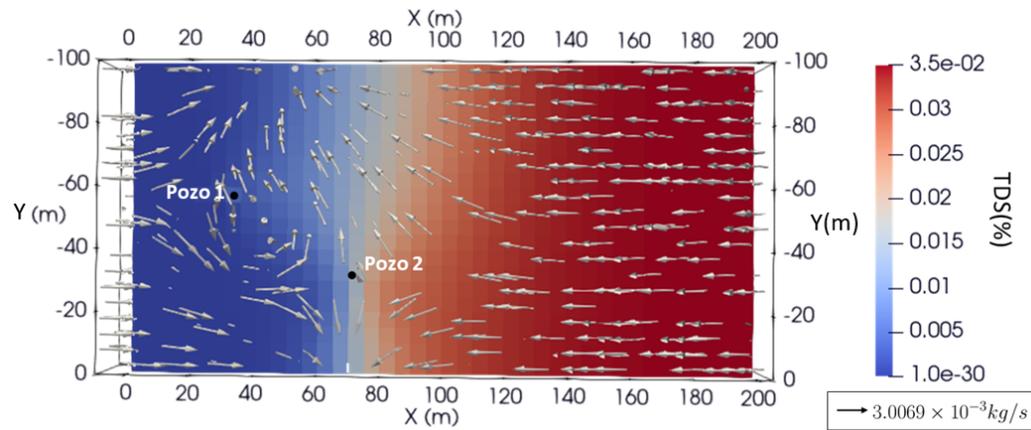
secciones horizontales y una vertical del modelo de TDS (figuras 16(a), 16(b) y 16(c) respectivamente) y una visualización en 3D del flujo másico en el acuífero (figura 17) para un tiempo de 30 años. La figura 16(a) muestra una sección horizontal para $z = 0m$, la figura 16(b) una sección horizontal para $z = 100m$ y la figura 16(c) una sección vertical en $y=25m$.

En la figura 16(a) se puede observar el flujo de agua dentro del acuífero. En comparación con las secciones verticales de TDS obtenido del modelado hidrológico del caso A, el modelo de TDS del caso B varía en las tres direcciones debido a la extracción de agua a través de los pozos. Estos cinco pozos generan unas ligeras variaciones en el eje x y eje z del acuífero. En el acuífero (figura 16(a)) esto se ve reflejado en una mayor intrusión hacia la posición ($x = 80m$, $z = 60m$), ya que el pozo, al extraer, genera un sumidero que acelera el flujo del agua salada hacia el agua dulce, contribuyendo así a una salinización rápida del acuífero. De manera similar al caso A, el agua salada migra hacia la parte inferior del acuífero debido a su mayor densidad, pero con la diferencia de que ahora esta migración se desvía en dirección a los pozos de extracción.

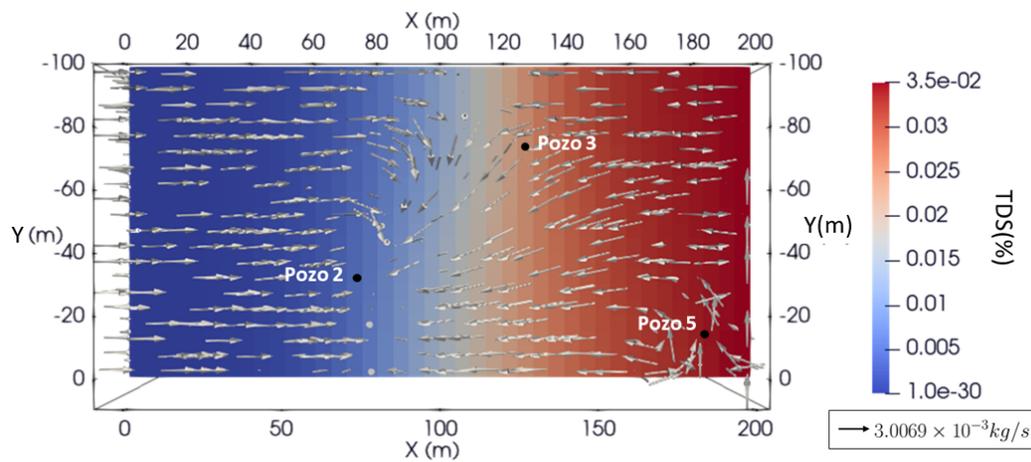
En la figura 16(c), el agua de mar que entra por la frontera derecha se mueve ahora en dirección al pozo de extracción numero 2 ubicado en la posición $x=72.5m$, $z=17.5m$, $y=27.5m$, el cual tiene una descarga de $-0.4589kg/s$. Este pozo tiene la mayor tasa de extracción de entre los cinco pozos (con tasa de extracción de $-0.37898kg/s$, $-0.17898kg/s$, $-0.10898kg/s$, $-0.07898kg/s$) y su efecto se muestra en la figura 17, con una convergencia de flujo de salida hacia este pozo. En general, el flujo hidráulico dentro del acuífero cambia en función de la recarga y extracción del agua. Por lo tanto, como el flujo de extracción es mucho mayor al flujo debido a la recarga de agua dulce ($7.639 \times 10^{-3}kg/s$), la intrusión avanzará de manera mas rápida.

4.2. Aplicación del modelado de datos AMT con UHO3DMT

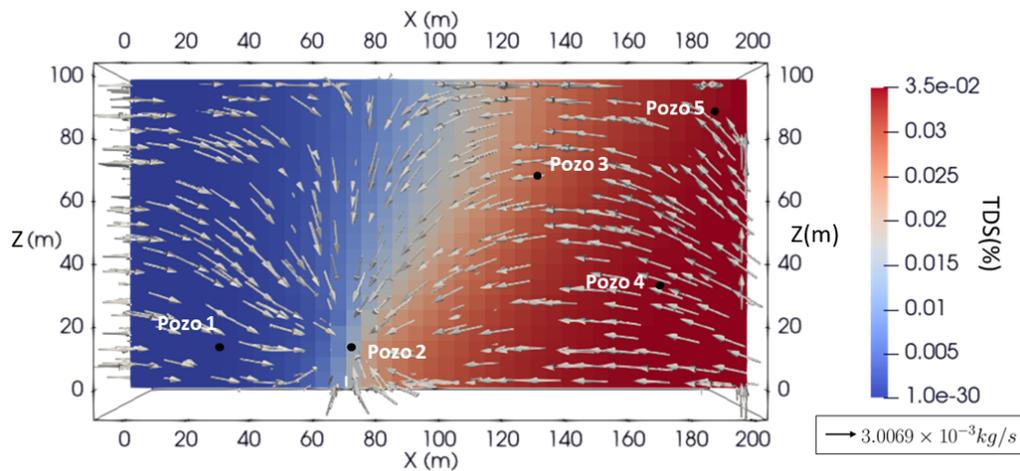
El modelo que se presenta en la figura 18 muestra la conductividad eléctrica obtenida después de haber hecho la conversión de los datos de TDS a conductividad eléctrica (del medio poroso saturado) para el caso B. Se presentan los resultados para el caso B para considerar un modelo más realista con extracción de agua con pozos y porque el algoritmo de inversión usará como modelo sintético el caso B. Para el modelado de datos AMT, la conversión TDS-conductividad consideró un factor de cementación de 0.2 y una porosidad de 0.35. Hecha la conversión a conductividad, se discretizó el modelo de conductividades para ajustar las conductividades a una malla tetraédrica con el fin de aumentar la exactitud al realizar el modelado directo con UHO3DMT. La discretización con sus valores asociados se muestra en la figura 18, la cuál se visualizó en la interfaz GEOVIS (Gallardo-Romero, 2020).



(a) Sección horizontal en $z=0\text{m}$, con los pozos 1 y 2 (ubicados en los planos cercanos de $z=7.5\text{m}$ y $z=17.5\text{m}$ respectivamente) vistos desde el plano $z=0\text{m}$.



(b) Sección horizontal en $z=100\text{m}$, con los pozos 2, 3 y 5 (ubicados en los planos cercanos de $z=17.5\text{m}$, $z=67.5$ y $z=87.5\text{m}$ respectivamente) vistos desde el plano $z=100\text{m}$.



(c) Sección vertical en $y=25\text{m}$, con los pozos 1, 2, 3, 4 y 5 (ubicados en los planos cercanos de $y=57.5\text{m}$, $y=27.5$, $y=77.5$, $y=67.5$ y $y=7.5\text{m}$ respectivamente) vistos desde el plano $y=25\text{m}$.

Figura 16. Secciones horizontales y verticales con vectores de flujo másico del modelo directo para un tiempo de 30 años.

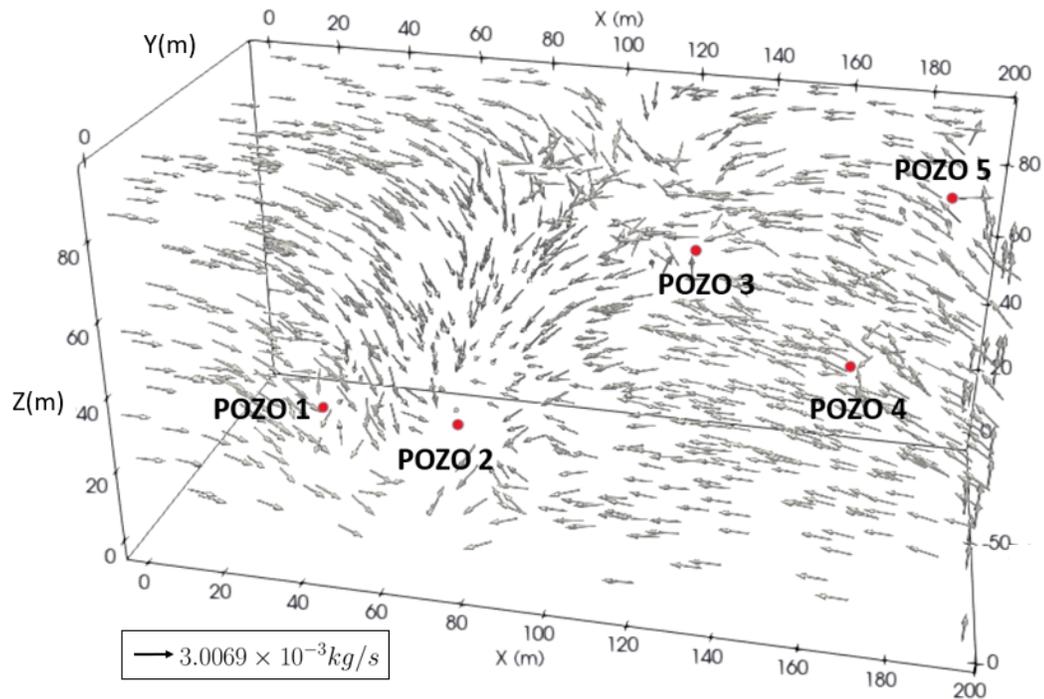


Figura 17. Flujo másico en 30 años para un acuífero con pozos, donde la tasa de extracción y posición de los pozos están definidas en la tabla 5.

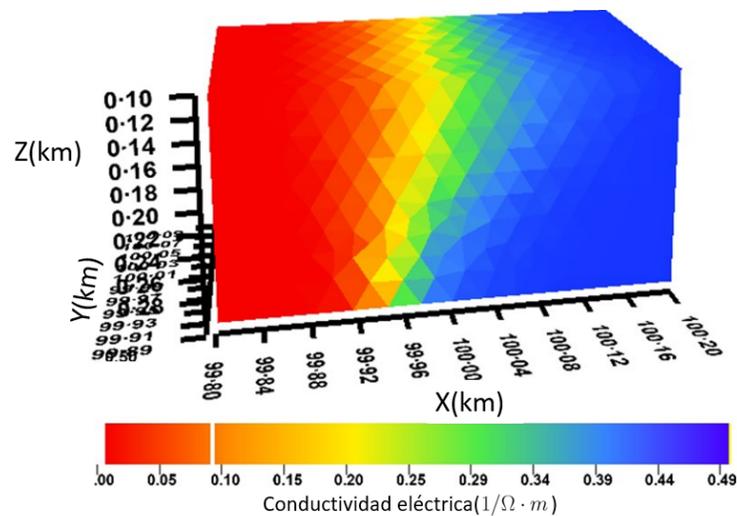


Figura 18. Distribución de la conductividad eléctrica (del medio poroso saturado) a lo largo del acuífero después de 30 años de simulación, donde los ejes se definen según el dominio de $100\text{km} \times 100\text{km} \times 100\text{km}$ de UHO3DMT.

Para visualizar los resultados del modelado de datos AMT para el acuífero con intrusión salina del caso B se hicieron tres gráficas. Se buscó estimar el campo eléctrico y la resistividad aparente para cada punto en la malla. Los resultados se muestran en las figuras 19, 20 y 21. La figura 19 muestra la componente

xz de la resistividad aparente obtenida en la superficie y la figura 20 muestra la resistividad aparente en función del rango de frecuencias AMT. En ambas figuras se observa el avance de la intrusión salina con un menor valor de resistividad en la frontera derecha del acuífero. También en el modelo previamente establecido en la sección 3.3.3 se ubicó el acuífero con intrusión salina a 50 m de profundidad, lo cuál coincide con los resultados obtenidos en las figuras 20 y 21.

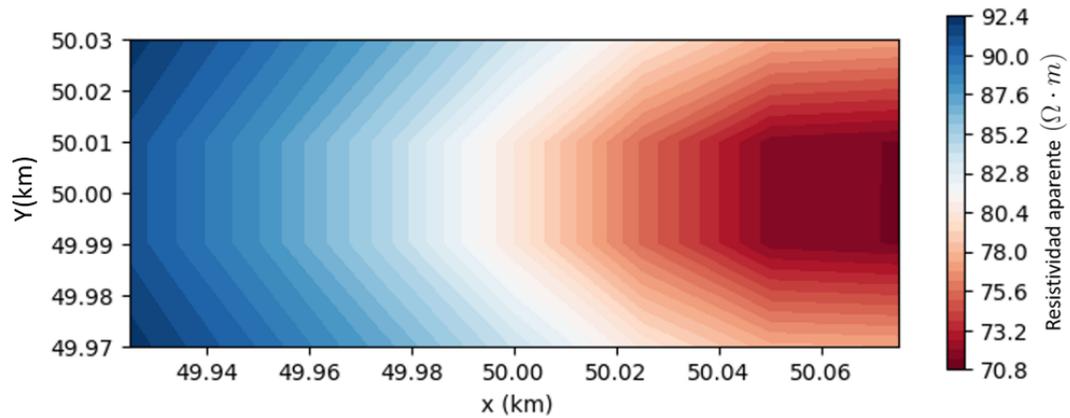


Figura 19. Vista de planta de la resistividad aparente obtenida con UHO3DMT y los datos de conductividad del caso de estudio B, para un corte en la superficie ($z=0$ km) y un tiempo de 30 años. Se muestra la componente xy de la resistividad aparente para una frecuencia de 10 Hz, donde el eje y y x se definen según el dominio de $100\text{km} \times 100\text{km} \times 100\text{km}$ de UHO3DMT.

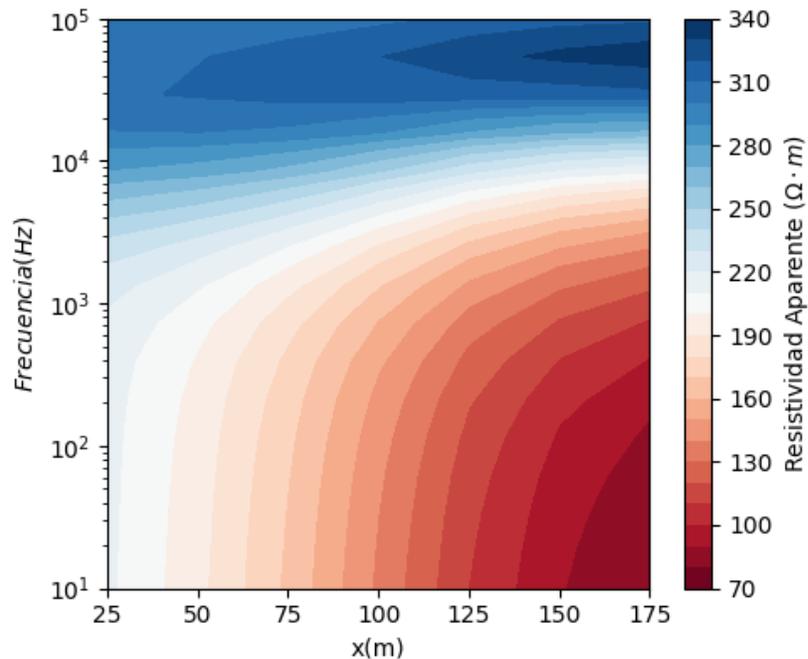


Figura 20. Sección vertical del modelo de TDS en función de la frecuencia obtenida con UHO3DMT y los datos de conductividad del caso de estudio B para un tiempo de 30 años. En el perfil se muestra la componente xy de la resistividad aparente, donde solo el eje x se define según el dominio de TOUGH3.

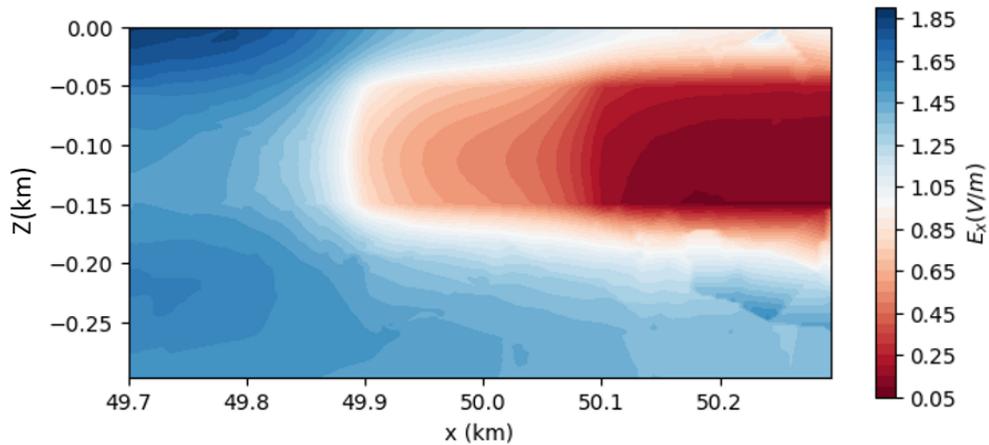


Figura 21. Sección vertical en $y=50$ km de los datos de campo eléctrico para un dominio con profundidad de $300m$ y longitud de $600m$, donde el acuífero se ubica entre $49.9km$ y 50.1 km en el eje x . El tiempo de simulación es de 30 años usando los datos del caso B. En la figura se muestra la componente x del campo eléctrico para una frecuencia de 10 Hz.

En la figura 21 se muestran los valores del componente x del campo eléctrico obtenidos del modelado directo de conductividades. El campo eléctrico es mucho menor en el área donde se encuentra la intrusión ya que decae rápidamente por la conductividad del agua de mar, mientras que en la frontera izquierda este es mayor. También se puede observar un valor constante en el campo eléctrico alrededor del acuífero debido al medio homogéneo de $200\Omega \cdot m$ que rodea el acuífero.

Capítulo 5. Resultados de la inversión de datos hidrogeológicos y de datos AMT

En esta sección se aborda el problema de inversión para un acuífero con intrusión salina. El modelado directo en serie se implementó considerando como datos sintéticos los datos de campo eléctrico y magnético obtenidos del caso B de la sección 4.1. En la sección 5.1.1 se realiza el cálculo de las sensibilidades y en la sección 5.2 se aplica el algoritmo de inversión.

Los experimentos se dividieron en dos etapas. En la primera etapa se hace un análisis previo de sensibilidad a cada uno de los parámetros a invertir y en la segunda etapa se visualizan los resultados del algoritmo de inversión. En ambos casos, los parámetros usados en el modelado directo de TOUGH3 y UHO3DMT vienen dados por las tablas 4 y 6, donde el tiempo usado para crear el perfil de datos observados es de 30 años para validar el progreso del algoritmo de inversión.

5.1. Análisis de sensibilidades

Se realizó un estudio de sensibilidades a los siguientes parámetros a calcular en la inversión: recarga de agua, porosidad, tiempo, factor de cementación y permeabilidad. El análisis de sensibilidad aporta información sobre el comportamiento de las derivadas. Si las variaciones que se eligieron son muy pequeñas, entonces la derivada sería un valor nulo y la matriz del jacobiano no sería invertible. En el caso en que el jacobiano sea invertible, el signo de la derivada nos indica si el algoritmo está avanzando en la dirección correcta, positivo si hay un incremento y negativo si hay un decremento en el valor del parámetro a invertir.

El análisis de sensibilidades se hace partiendo del caso A para disminuir la cantidad de variables que afectan el cálculo de sensibilidades. Así mismo, se considera que el flujo de extracción de agua por pozos es un sumidero con parámetro conocido y por lo tanto no entra en la inversión. Partiendo de esta premisa se realiza un análisis de sensibilidades a los siguientes parámetros:

1. El tiempo $\xi = t$, donde el valor del parámetro inicial es $\xi_{init} = 10$ años, el valor real es $\xi_o = 30$ años y las variaciones son de $\Delta\xi = 0.05$ años.
2. La porosidad $\xi = \phi$, donde el parámetro inicial es $\xi_{init} = 0.1431$, el valor real es $\xi_o = 0.35$ y las variaciones son de $\Delta\xi = 0.02$.

3. El factor de cementación $\xi = m$, donde el parámetro inicial es de $\xi_{init} = 1.5$, el valor real es $\xi_o = 2.0$ y las variaciones son de $\Delta\xi = 0.005$.
4. La permeabilidad $\xi = \varepsilon$, donde el parámetro inicial es de $\xi_{init} = 1.416 \times 10^{-12} m^2$, el valor real es de $\xi_o = 1.18 \times 10^{-12} m^2$ y las variaciones son de $\Delta\xi = 1.18 \times 10^{-14} m^2$.
5. la recarga de agua $\xi = Q$, donde el parámetro inicial es de $\xi_{init} = 2.639 \times 10^{-1} m^3/d$, el valor real es $\xi_o = 7.639 \times 10^{-3} m^3/d$ y las variaciones son de $\Delta\xi = 2 \times 10^{-2} m^3/d$.

Los parámetros que no se especifican, pero fueron usados, se mantuvieron fijos según los valores de la tabla 4.

5.1.1. Cálculo de sensibilidades

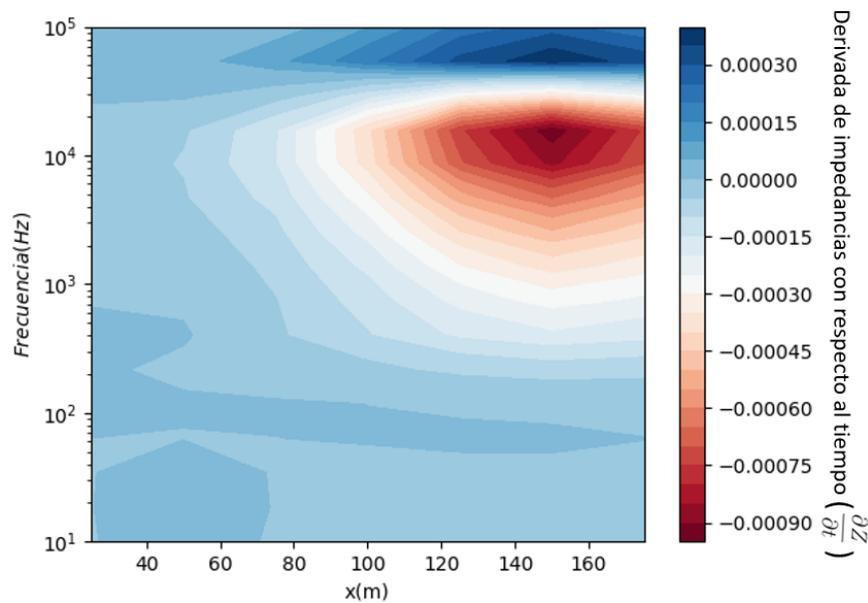


Figura 22. Sensibilidad de un perfil en $z = 25m$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto al tiempo para una variación de 0.05 años.

Los resultados del análisis de sensibilidad se obtuvieron a partir de realizar la derivada del término Z_{xz} , dado por la ecuación 33, con respecto a cada uno de los parámetros a invertir previamente mencionados. Los perfiles fueron obtenidos de un corte en $y = 25m$ del modelo de sensibilidades 3D y se muestran en las figuras 22 a 25.

El perfil de la figura 22, corresponde a la respuesta de sensibilidad del algoritmo a variaciones en el tiempo. En la figura 22 se puede observar la formación de un dipolo, donde hay menor impedancia entre

el rango de frecuencias de 10^3Hz a 10^4Hz y entre las distancias de 100 a 200 m, área donde se encuentra la intrusión salina. En este caso el término negativo de impedancias predomina sobre el área en la que comienza la intrusión salina, lo cual implica un cambio negativo en la diferencia de los datos al usar una variación del tiempo de 0.05 años.

Para corroborar la afirmación se realizaron las siguientes pruebas donde se invirtieron los datos AMT para calcular el parámetro de tiempo, partiendo de un valor inicial $\xi_{init} = 10$ años y del observado $\xi_o = 30$ años.

1. Prueba 1: Se ejecuta una iteración del algoritmo de inversión para calcular el parámetro de tiempo con una variación de 0.05 años.
2. Prueba 2: Se ejecuta una iteración del algoritmo de inversión para calcular el parámetro de tiempo con una variación de 1 año.

En la primera prueba se obtuvo un tiempo final de 67.3 años, alejándose del valor esperado de 30 años, mientras que en la segunda prueba el algoritmo avanzó a un valor de 19.82 años, acercándose mucho mas al valor de 30 años. Por ende, para evitar futuras inconsistencias se eligió una variación de tiempo mayor para futuros experimentos de inversión, donde la variación del parámetro de tiempo es de 1 año.

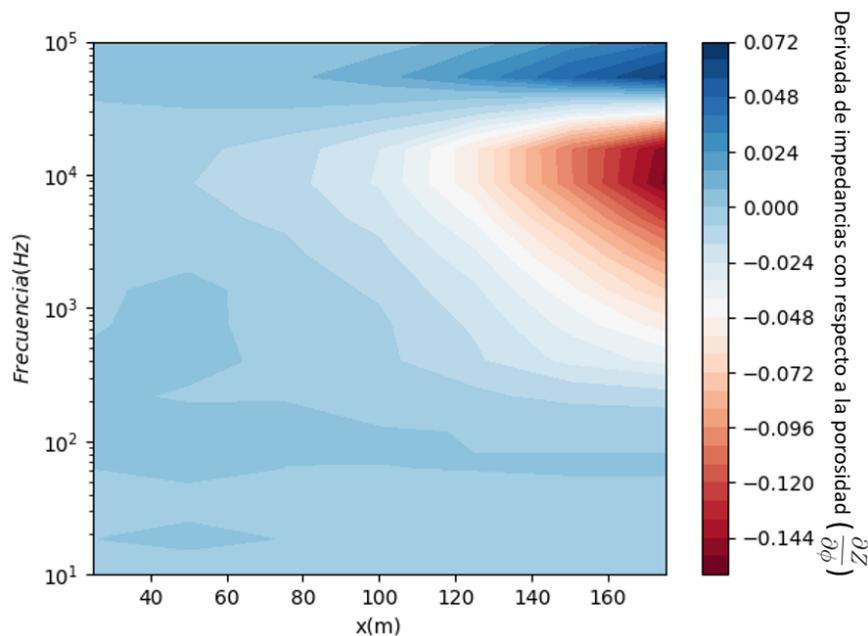


Figura 23. Sensibilidad de un perfil con corte en $y = 25\text{m}$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto a la porosidad para una variación de 0.02.

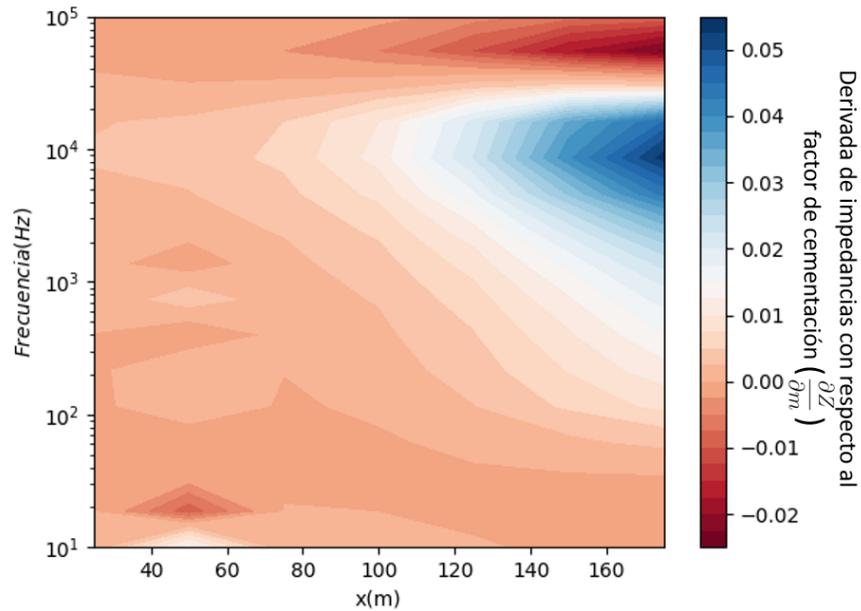


Figura 24. Sensibilidad de un perfil con corte en $y = 25\text{ m}$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto al factor de cementación para una variación de 0.005.

En la figura 23 se presenta el perfil de sensibilidad para el parámetro de la porosidad. En primer instancia se observa una distorsión en la esquina inferior izquierda, similar a la que aparece en la figura 22. También se puede observar un cambio positivo a negativo en la posición donde comienza la intrusión salina. Este comportamiento dipolar también se observa en la figura 24, con la única diferencia que el dipolo se invierte y el artefacto de la esquina inferior izquierda se define un poco más.

Para probar la inversión de los datos AMT para calcular los parámetros de porosidad y factor de cementación con las perturbaciones de 0.02 y 0.005 usadas para calcular las derivadas, respectivamente se realizaron 3 pruebas distintas:

1. Prueba 1: Se ejecuta una iteración del algoritmo de inversión para calcular la porosidad con una variación de 0.02. El valor inicial es de 0.14 y el observado de 0.35.
2. Prueba 2: Se ejecuta una iteración del algoritmo de inversión para calcular el factor de cementación con una variación de 0.005. El valor inicial es de 1.5 y el observado de 2.0.
3. Prueba 3: Se ejecuta una iteración del algoritmo de inversión, buscando calcular de manera simultánea la porosidad y el factor de cementación con una variación de 0.02 y 0.005, respectivamente. El algoritmo inicia con una porosidad de 0.14 y un factor de cementación de 1.5.

En la primera prueba se obtuvo una porosidad de 0.1875, lo cual parece converger lentamente al valor

observado de 0.35, mientras que en la segunda prueba, el factor de cementación avanzó al valor de 1.94, lo que implica que se acerca con mayor rapidez al valor de 2.0. Finalmente, para la tercera prueba, se obtuvo un valor de 4.0 para la porosidad y 1.8 para el factor de cementación, convergiendo por ende a 2.0 en el factor de cementación, pero alejándose del valor esperado de porosidad. Este comportamiento se puede deber al esquema de modelado directo que se usó en el algoritmo, ya que la porosidad, al pasar por los programas de TOUGH3 y UHO3DMT, no registra variaciones lo suficientemente notables como para que el valor del jacobiano sea estable.

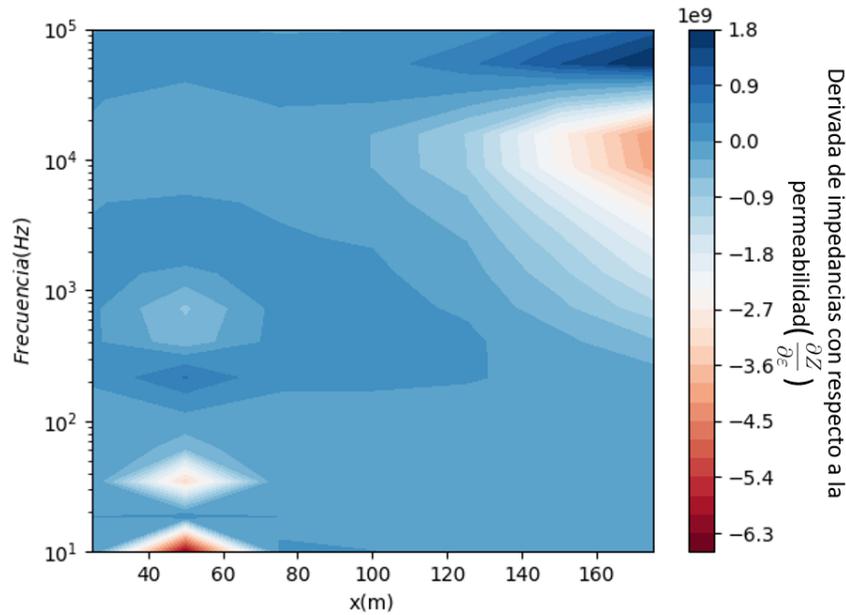


Figura 25. Sensibilidad de un perfil con corte en $y = 25\text{m}$, calculado a partir de la derivada del término real de impedancias Z_{xz} del jacobiano con respecto a la permeabilidad para una variación de $1.18 \times 10^{-14} \text{m}^2$.

En el cuarto experimento se calculó la sensibilidad del algoritmo debido a una variación de la permeabilidad de $1.18 \times 10^{-14} \text{m}^2$. Los resultados se muestran en la figura 25. En este caso se observa un comportamiento dipolar similar a los casos de las figuras 22 y 23, además de que se observó un artefacto a menores frecuencias. El quinto experimento se realizó tomando en cuenta una variación de recarga de agua de $0.02 \text{m}^3/d$, pero en este último experimento no se obtuvo un perfil de sensibilidades debido que los datos eran idénticos. En este caso la ecuación 33 resulta en la expresión,

$$f(\xi_1 + \Delta\xi_1) = f(\xi_1). \quad (35)$$

5.2. Aplicación del algoritmo de inversión

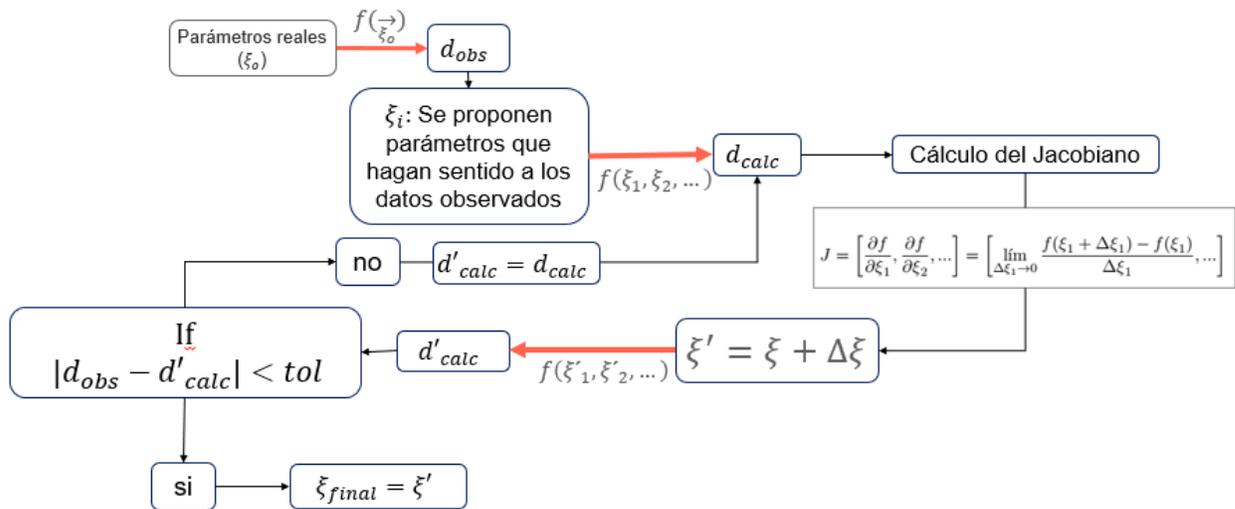


Figura 26. Esquema del algoritmo de inversión usando el método de perturbaciones para el cálculo de las derivadas.

El algoritmo de inversión en serie considera el caso B, es decir el modelado que involucra la extracción de agua dulce y sigue el esquema de inversión de la figura 26. El modelo directo del caso B fue elegido por considerar un acuífero con intrusión salina más realista al incluir pozos de extracción. A continuación se realizaron los siguientes tres experimentos:

- Experimento 1: Se realiza la inversión para calcular el tiempo, el factor de cementación y la permeabilidad $\xi = \{t, m, \varepsilon\}$. Se parte de la suposición inicial de los parámetros $\xi_{init} = \{10, 1.5, 1.416 \times 10^{-12}\}$, con un espaciamiento correspondiente $\Delta \xi = \{1, 0.005, 1.18 \times 10^{-14}\}$ y se usan como datos observados los obtenidos del caso B, que se encuentran basados en los parámetros $\xi_o = \{30, 2.0, 1.18 \times 10^{-12}\}$.
- Experimento 2: Se repite el experimento anterior, pero los datos sintéticos se cambian por un perfil de conductividades interpoladas obtenidas a partir de los valores de conductividad del caso B. Esto se hace con el objetivo de generar datos sintéticos con ruido. Para hacer el perfil interpolado se conservaron solamente los valores de conductividad del caso B que se encontraban en la trayectoria de los pozos y el resto se calculó usando una interpolación lineal en tres dimensiones.
- Experimento 3: Se realiza la inversión para calcular el tiempo y el factor de cementación usando los valores $\xi = \{t, m\}$. Se parte de la suposición inicial $\xi_{init} = \{10, 1.5\}$ usando el perfil interpolado del experimento 2, pero ahora con un espaciamiento de $\Delta \xi = \{1, 0.005\}$.

Para los tres experimentos se generan perfiles de TDS y conductividad eléctrica y se muestra la convergencia de los parámetros mediante tablas que registran el avance de todos los parámetros con cada iteración. Los resultados obtenidos a partir de la implementación del algoritmo de inversión se muestran en la siguiente sección.

5.2.1. Experimento 1: Inversión para calcular el tiempo, la permeabilidad y el factor de cementación

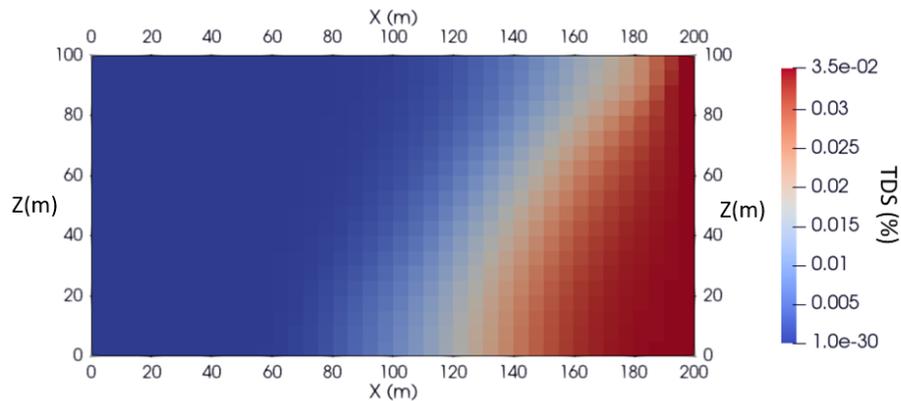


Figura 27. Sección vertical en $y = 0$ del perfil de TDS del modelado directo obtenido en la iteración 1 para el experimento 1. Los parámetros asociados al modelado directo son: $t = 10$ años, $m=2.00$ y $\varepsilon = 1.416 \times 10^{-12}$.

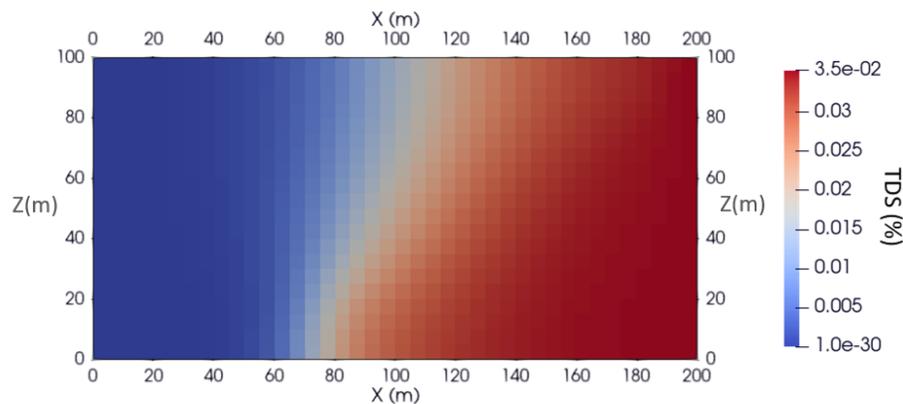


Figura 28. Sección vertical en $y = 0m$ del perfil de TDS del modelado directo obtenido en la iteración 3 para el experimento. Los parámetros asociados al modelado directo son: $t = 31.71$ años, $m=2.00$ y $\varepsilon = 9.3816 \times 10^{-13}$.

Los perfiles de TDS obtenidos del modelado directo que corresponde al caso B se exponen en la figura 16. Por otro lado, se presentan los resultados de la inversión con una sección vertical del modelo de TDS para la primera y tercera iteración en las figuras 27 y 28, respectivamente. En la figura 16(a), del

modelo asociado a los datos observados, se observa una variación en sales TDS en medio de la intrusión debido a la extracción de agua que ocurre a través del pozo (con un flujo de -0.45898 kg/s) en el punto $\{x, y, z\} = \{72.5, 27.5, 17.5\}m$. Por otro lado, desde la sección vertical con corte en $z = 100$ (figura 16(b)) no se observa una variación grande en y .

Tabla 7. Evolución de parámetros por cada iteración del algoritmo de inversión para el experimento 1. La tabla registra el tiempo, el factor de cementación y la permeabilidad.

Iteración	tiempo (años)	factor de cementación	permeabilidad (m^2)	RMS
modelo sintético	30	2.0	1.18×10^{-12}	–
1	10	1.5	1.416×10^{-12}	–
2	19.82	2.074	9.3808×10^{-13}	0.004402
3	31.71	2.082	9.3816×10^{-13}	0.003461

El perfil obtenido a partir de los parámetros resultantes de la inversión se muestra en la figura 27. En este caso la geometría de la parte superior del acuífero todavía no se asemeja al de de la figura 16(c). Los resultados de la tabla 7 señalan una convergencia rápida del factor de cementación ya en la segunda iteración del algoritmo, mientras que parámetros como el tiempo y la permeabilidad avanzan de manera más lenta. Por otro lado, la figura 28 muestra el perfil final obtenido en la tercera iteración. Comparando los cortes del modelo de TDS de la última iteración con respecto a la primera, se identifica un avance en la intrusión salina que se asemeja a los datos observados (figura 16(c)) y una rápida convergencia, llegando a la tolerancia establecida.

En la última iteración el tiempo convergió al valor de 31 años, el factor de cementación a un valor de 2.082 y la permeabilidad a un valor de $9.38 \times 10^{-13}m^2$. La diferencia porcentual entre los parámetros observados y finales de tiempo, factor de cementación y permeabilidad es de 5.7%, 4.1% y 20%, respectivamente. Se debe mencionar que en este caso los parámetros de interés son el factor de cementación y la permeabilidad, ya que el tiempo sirve como un artificio numérico para ajustar el avance de la intrusión. En este sentido se hace énfasis en la convergencia del factor de cementación, pero a un valor lejano al esperado del parámetro de permeabilidad. Esto se puede explicar por la sensibilidad alta del parámetro de permeabilidad estudiada previamente en la sección 5.1.1.

5.2.2. Inversión de un modelo sintético interpolado con pozos

Con el objetivo de probar que la incorporación de datos de conductividad medidos en pozos ayuda a una mejor caracterización de la intrusión salina en el acuífero, se generaron nuevos datos sintéticos. Los nuevos datos se obtuvieron a partir de la interpolación lineal de los valores de conductividad (del caso

B) que se encontraban en la trayectoria de los pozos. En esta interpolación se asume que se conoce el valor de TDS en el plano $x = 200\text{m}$ y $x = 0\text{m}$ para que el ajuste se pueda hacer a lo largo de todo el dominio del acuífero.

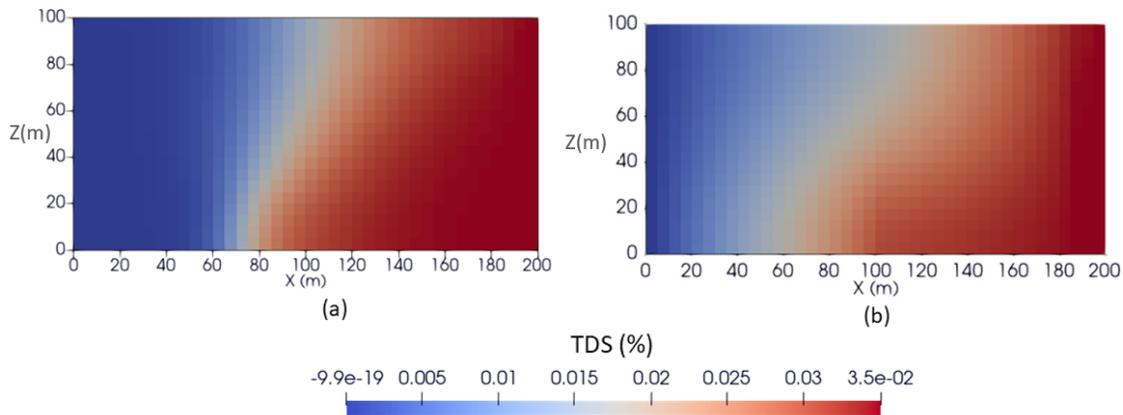


Figura 29. Comparación de las secciones verticales obtenidas del perfil de TDS a partir del modelo sintético del caso B con interpolación (figura de la izquierda) y el modelado sintético del caso B sin interpolación (figura de la derecha). Ambos cortes corresponden a una sección en $y = 0\text{m}$.

El perfil de conductividades asociado a los nuevos datos observados se muestra en la figura 29(b). En este nuevo modelo de conductividades se puede observar una mayor difusión entre la frontera de agua salada y dulce en comparación con el modelo sintético del experimento 1 (figura 29(a)). Este comportamiento difusivo se crea debido al tipo de interpolación lineal que se usa para ajustar los datos.

5.2.2.1. Experimento 2: Inversión para calcular el tiempo, el factor de cementación y la permeabilidad

Este caso de estudio se emplea el mismo perfil de TDS interpoladas como base para generar los datos observados. Los nuevos datos observados se generan a partir de convertir el perfil de TDS en conductividades y luego ejecutar el programa UHO3DMT. Los resultados obtenidos del algoritmo de inversión se muestran en la tabla 8 y los perfiles de TDS final se presentan en las figuras 30(b), 30(d) y 30(f).

Durante el experimento 2 se realizaron dos iteraciones. En la segunda iteración se calculó la diferencia porcentual de los parámetros resultantes con respecto a los parámetros reales, y para el tiempo, factor de cementación y permeabilidad se obtuvo una diferencia porcentual de 35% , 0.8% y -38.5%, respectivamente. De manera similar a la diferencia porcentual calculada del experimento 1, se encontró un valor cercano al esperado en el parámetro de factor de cementación. También cabe señalar que, durante la segunda iteración, la derivada del vector de impedancias con respecto a la permeabilidad dio un valor

de cero. Como resultado, la matriz del jacobiano se volvió singular y no se pudieron invertir los datos a partir de la segunda iteración.

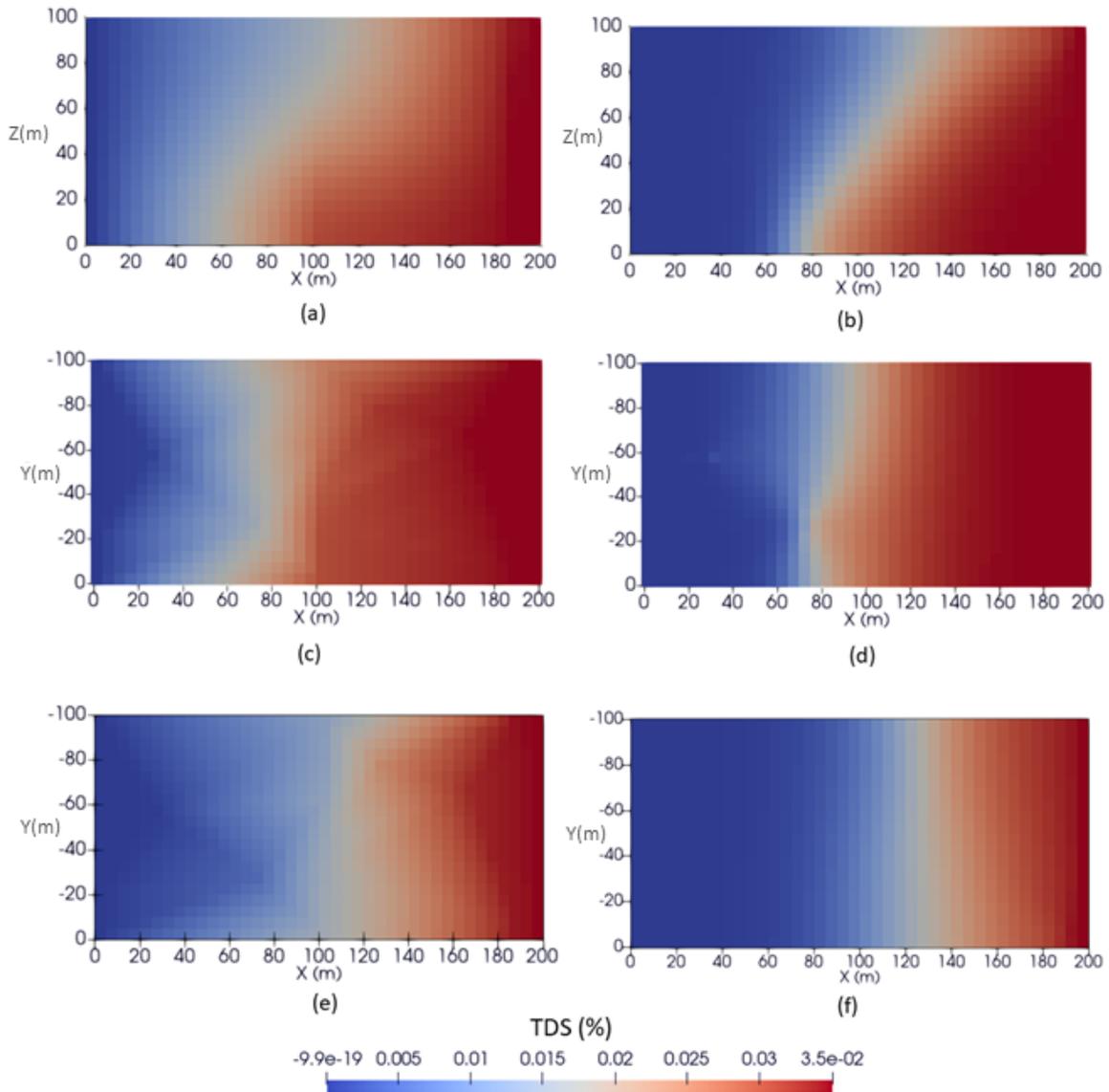


Figura 30. Comparación del perfil de TDS obtenido a partir del modelo sintético interpolado (figura de la izquierda (a), (c) y (e)) y el modelado final asociado a la inversión del experimento 2 (figura de la derecha (b), (d) y (f)). Los perfiles (a) y (b) corresponden a una sección vertical en $z = 0\text{m}$, los perfiles (c) y (d) a una sección horizontal en $y = 0\text{m}$, y (e) y (f) a una sección horizontal en $y = 100\text{m}$.

Comparando el modelo de TDS de los parámetros finales con el modelo de TDS asociado a los datos observados (figura 30), se observó una menor difusión en la interfaz entre el agua dulce y el agua de mar en el primero respecto al segundo. Un rasgo importante del modelo de datos observados es que este efecto de difusión se genera por el ruido generado por la interpolación lineal que suaviza los valores de TDS a lo largo del acuífero. No obstante, el algoritmo de inversión logra corregir el ruido ocasionado por

la medición de los datos observados.

Tabla 8. Evolución de los parámetros del experimento 2 por cada iteración. Se registran los valores de tiempo, factor de cementación y permeabilidad, que se ajustan a los datos observados obtenidos del modelo sintético interpolado de la figura 29(b).

Iteración	tiempo	factor de cementación	permeabilidad	RMS
modelo sintético	30	2.0	1.18×10^{-12}	–
1	10	1.5	1.416×10^{-12}	–
2	19.33	2.016	1.6342×10^{-12}	0.002680

Otra característica a notar es que el avance de la frontera agua-mar del experimento 2 llega aproximadamente a 19 años en la segunda iteración, como sucede en la segunda iteración del experimento 1. No obstante, el valor de la permeabilidad en la iteración 2 se vuelve mucho mayor que la del experimento 1. Este comportamiento se deriva del intento que el algoritmo hace para que la diferencia entre el modelo final y el observado cumpla la tolerancia establecida. Por otro lado, analizando la ubicación de los pozos (dadas por la tabla 5) con el modelo final, se nota que a pesar que el proceso de inversión no logra acercarse a los valores de los parámetros reales, la geometría de la intrusión afectada por los pozos se acerca bastante al modelo observado con interpolación.

En resumen, de las dos iteraciones que pudo hacer el algoritmo, el programa ajustó el tiempo y el factor de cementación en la dirección correcta. No obstante, debido al truncamiento causado por el jacobiano en la segunda iteración, los parámetros de tiempo y factor de cementación no pudieron converger. Para evitar el truncamiento del algoritmo se realizó un tercer experimento con el objetivo de observar el ajuste de los parámetros de tiempo y factor de cementación sin invertir la permeabilidad.

5.2.2.2. Experimento 3: Inversión para calcular el tiempo y el factor de cementación

En este tercer experimento se conserva el tiempo y el factor cementación como parámetros variables, pero se fija la permeabilidad al valor de $1.18 \times 10^{-12} m^2$. Los resultados del tercer experimento se muestran en la tabla 9 y el modelo de TDS asociado a los parámetros del modelo final se muestra en las figuras 31(b), 31(d) y 31(f), junto al modelo observado en las figuras 31(a), 31(c) y 31(e)

En este experimento se realizaron mas iteraciones que las que correspondían, ya que la tolerancia establecida de 0.005 no fue suficiente para que la interfaz entre el agua dulce y el agua de mar se ajustara a los datos observados. El algoritmo de inversión se detuvo en la octava iteración con un valor del tiempo y factor de cementación de 41.15 años y 2.143, respectivamente. Cabe señalar que la convergencia del tiempo no tiene algún significado real, pero que la variación del parámetro de tiempo si afecta el ajuste

de la geometría del modelo calculado de TDS. Es por esto que el algoritmo buscó una solución más avanzada en el tiempo con el fin de recuperar la geometría de los datos observados. Así mismo, las discrepancias generadas por la interpolación de los datos observados varía el modelo final tal que el algoritmo busca compensar el movimiento y el efecto difusivo mediante el parámetro de tiempo.

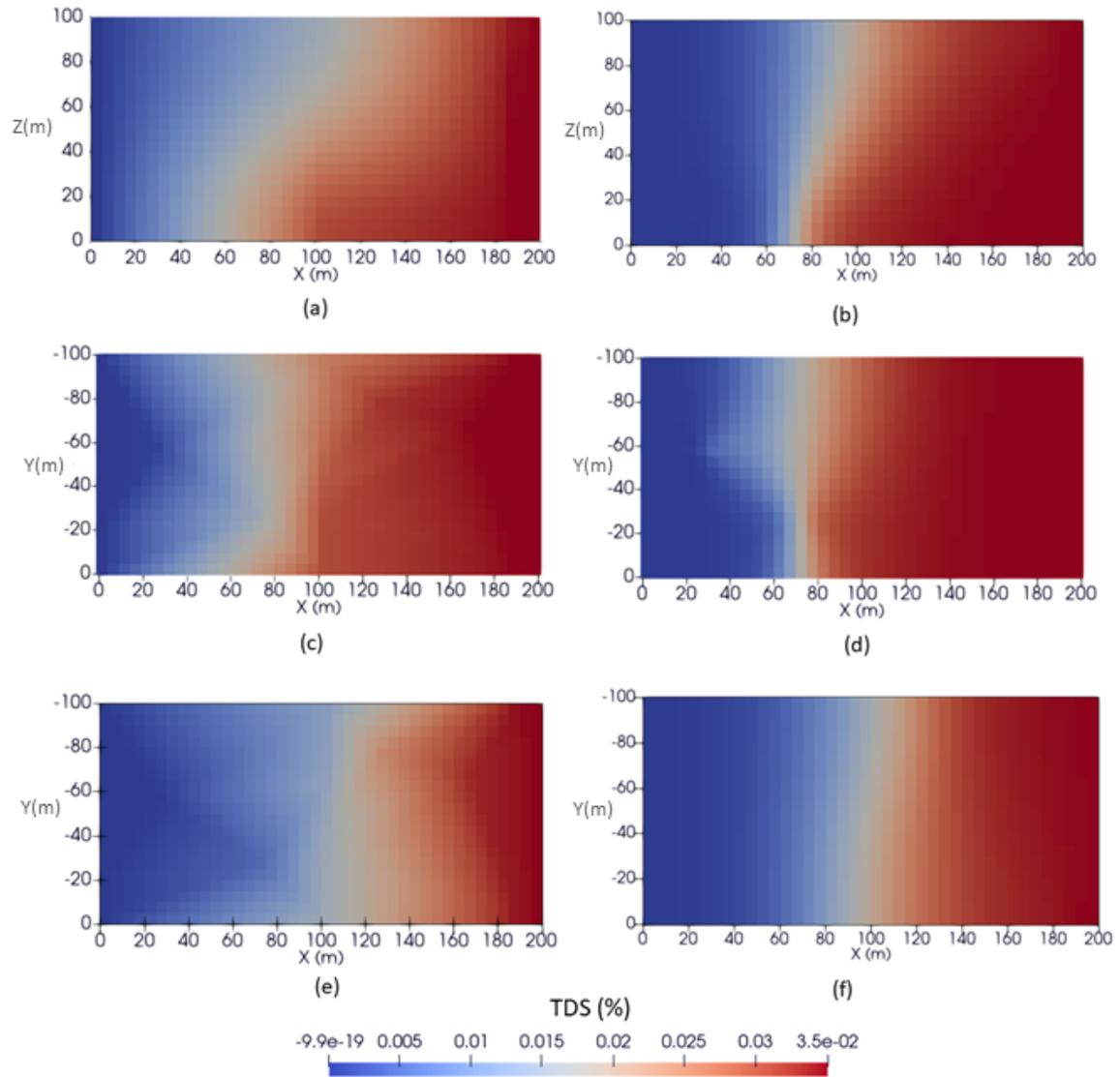


Figura 31. Comparación del perfil de TDS obtenido a partir del modelo sintético interpolado (figura de la izquierda (a), (c) y (e)) y el modelado directo de la iteración 8 del experimento 3 (figura de la derecha (b), (d) y (f)). Los perfiles (a) y (b) corresponden a una sección vertical en $y = 0\text{m}$, los perfiles (c) y (d) a una sección horizontal en $z = 0\text{m}$, y (e) y (f) a una sección horizontal en $z = 100\text{m}$.

Al estudiar la interfaz entre el agua dulce y el agua de mar del modelo final del experimento 3 se destacan algunas diferencias con respecto al perfil del modelo original. Primeramente, el modelo final tiene menor difusión en comparación con el modelo asociado a los datos observados; segundo, el modelo final tiene una similitud con los datos observados no interpolados usados en el experimento 1; y por último, hay

más TDS distribuidos en un menor espacio.

Tabla 9. Evolución de parámetros del experimento 3 por cada iteración. Se registran los valores de tiempo, factor de cementación y permeabilidad, que se ajustan a los datos observados obtenidos del modelo sintético interpolado de la figura 29(b).

Iteración	tiempo (años)	factor de cementación	RMS
modelo sintético	30	2.0	–
1	10	1.5	–
2	19.33	1.976	0.004677
3	30.77	2.147	0.003169
4	38.60	2.140	0.001558
5	40.68	2.140	0.000658
6	41	2.141	0.000608
7	41.10	2.142	0.000608
8	41.15	2.143	0.000608

Capítulo 6. Discusión y conclusiones

6.1. Discusiones

La implementación del modelado directo en serie y del algoritmo de inversión dejó las bases para evaluar el método para caracterizar el fenómeno de intrusión salina. En esta sección se busca analizar con más detalle comportamientos recurrentes vistos en el modelado directo y en el algoritmo de inversión, además de discutir las causas y consecuencias de los resultados. En la sección 6.1.1 se discute sobre los dos casos estudiados en el modelado directo y en la sección 6.1.2 se discuten los resultados de los tres experimentos del algoritmo de inversión.

6.1.1. Discusión sobre el modelado directo en serie

6.1.1.1. Sobre el modelo de Henry

El modelo de Henry (1964) representa el esquema idealizado de un acuífero confinado con intrusión salina y es implementado en varios estudios para estandarizar el problema de intrusión salina (Croucher & OSullivan, 1995; Herckenrath et al., 2011). En esta tesis el modelo de Henry (1964) se implementó con un enfoque similar, buscando estudiar más a fondo la funcionalidad del algoritmo de inversión con el método de modelado directo en serie y estandarizar el método para futuros estudios. Si se quisiera implementar el algoritmo de inversión para un caso real, se debe ajustar el modelo base en función de las dimensiones del dominio de interés. De esta manera se podría considerar un experimento aparte para estudiar su implementación enfocada a aspectos más específicos como la topografía o las mareas.

Otro aspecto relevante a discutir sobre el modelado directo es el uso de la ley de Archie. En la sección 2.2.2 se describió cómo el componente de la conductividad eléctrica se relaciona con la porosidad. Esta ley se cumple para medios que no contienen rocas contaminadas con arcillas o compuestos de limos finos. En general, las propiedades geoelectricas estimadas de los materiales de la Tierra se pueden representar con una conductividad compleja σ^* (Slater, 2007)

$$\sigma^* = \sigma' + \sigma'', \quad (36)$$

donde la parte real σ' (llamada conducción eléctrica) representa la habilidad de la Tierra de transportar cargas vía corrientes de conducción como sucede en los métodos de inducción electromagnética, mientras que la parte imaginaria σ'' representa la habilidad de la tierra para transportar cargas vía polarización. En

rocas no-metálicas la parte real de la conductividad (σ') es asociada a los iones, ocurriendo entre poros con electrolitos y por migración iónica en la doble capa electrolítica en la interfaz grano-fluido. Waxman & Smits (1968) asumen que la conductividad eléctrica se obtiene al sumar en paralelo la conductividad electrolítica σ_{el} con la conductividad inter-facial σ_{int} :

$$\sigma' = \sigma_{el} + \sigma_{int}, \quad (37)$$

donde σ_{el} puede asociarse con el volumen de poro a través de relaciones petrofísicas como la ley de Archie, y σ_{int} puede asociarse con la superficie de poro (Purvance & Andricevic, 2000). En el caso de un acuífero con arcillas o de un tamaño de grano menor a 0.5mm, el término de conducción debido a la interfaz se vuelve considerable. Por lo tanto, la ecuación 21 se vería afectada por un término de conductividad inter-facial sumado a esta.

6.1.1.2. Sobre los resultados del modelado directo

En el caso B de la sección 4.1 se obtuvieron perfiles de TDS para un acuífero con pozos. En este experimento se observó una aceleración en el proceso de intrusión salina debido a los pozos de extracción. Abd-Elhamid et al. (2019) llega a un resultado parecido para el caso de estudio de un acuífero de Quinns Rocks en Perth, Western Australia. En el estudio, a lo largo de un periodo de 19 años el agua de mar avanzó un total de 100 m de la costa, donde la intrusión se hizo ligeramente convexa al llegar a dos pozos de extracción. Por otro lado, los valores de conductividad eléctrica que se obtienen en el acuífero de intrusión salina con pozos al realizar la conversión corresponden a la conductividad eléctrica detectada en artículos donde se analiza la relación entre las conductividades eléctricas de acuíferos con intrusión salina (Purvance & Andricevic, 2000; Friedman, 2005; Thorslund & van Vliet, 2020).

La cantidad de pozos y la tasa de extracción por pozos, así como la ubicación de los puntos de extracción, son variables importantes que evitan o propician el avance de la intrusión salina. A partir del modelado directo del caso B, presentado en las figuras 17 y 16(c), se puede observar cómo la profundidad de un pozo influye en el movimiento del agua de mar a lo largo del subsuelo del acuífero junto con el efecto de advección. Para evitar que estos dos procesos propicien el avance de la intrusión salina se recomendaría realizar pozos a una menor profundidad y en lugares lejanos a la costa. Todd (2009) describe que para un acuífero isotrópico homogéneo con flujo horizontal de agua dulce existe siempre un punto crítico entre el sumidero del pozo y la frontera donde comienza la intrusión salina. Si la punta de la intrusión salina llega a tal punto crítico, se crea una situación que propicia el avance rápido de la intrusión salina, la cual

se detiene cuando se encuentra el equilibrio entre el agua de mar y el agua dulce.

La tasa de extracción asociada al punto crítico se conoce como la tasa de extracción crítica del pozo, y la tasa de extracción del pozo nunca debe superar la tasa crítica para evitar que el agua de mar avance en el acuífero (Todd, 2009). Los parámetros asociados a la tasa de extracción crítica son: la recarga de agua dulce, la profundidad del acuífero y la tasa de extracción. En el modelado directo del caso B se encontró que el flujo del agua se movió en la dirección de mayor extracción, lo que sugiere que la tasa de extracción superó el valor crítico.

El uso del esquema de modelado directo en serie implementado en esta tesis resultó tener tanto ventajas como desventajas. Una de las ventajas de usar este modelo para el esquema de inversión es una rápida convergencia de los parámetros a invertir (con un RMS menor a 0.3%) en menos de tres iteraciones. Por un lado, la implementación del modelado directo en serie facilitó la conversión de datos de TDS a conductividad mediante la ley de Archie, y por otro lado, se aprovechó la flexibilidad del programa de modelado hidrogeológico TOUGH3 para proporcionar perfiles de flujo de agua para estudiar con mayor detalle el modelado directo.

Con respecto a la aplicación del programa UHO3DMT para el modelado directo, el formato de datos de entrada (dado que el programa está escrito en c++) favoreció la sensibilidad de los datos de AMT a pequeñas variaciones de conductividad. Sin embargo, para obtener datos AMT con mayor detalle se optaría por una discretización más fina de la malla sobre el acuífero, además de considerar el dominio cúbico de la malla (figura 13(a)) de solamente 1 km en cada lado para reducir el tiempo de computo del modelado directo de UHO3DMT.

Otro punto a tratar en el modelado de datos AMT es la influencia que tienen los volúmenes exteriores sobre dominio del acuífero y sus respectivos valores de resistividad. Los volúmenes del dominio cúbico de UHO3DMT con sus valores de resistividad vienen dados por la tabla 6 y la influencia de estos volúmenes exteriores sobre los valores de resistividad del acuífero se observa en el perfil de campo eléctrico de la figura 21. El estudio sobre cambios dados por objetos resistivos o conductivos fuera del acuífero y su influencia sobre el acuífero con intrusión salina podría ayudar a comprender la forma de las anomalías en la conductividad del acuífero, en especial si estos datos se recaban con métodos geofísicos.

Una de las ventajas del esquema de modelado en serie implementado fue la capacidad de unir la información recabada de pozos, así como la información hidrogeológica previa, directamente con la conductividad eléctrica del medio. De esta manera se logra asociar un perfil de TDS con datos AMT y crear un programa que pueda usarse como función de modelado directo en un algoritmo de inversión. Algunos

temas de interés para mejorar la caracterización de acuíferos en general, según Vereecken et al. (2006), son el escalado del acuífero a uno real y la caracterización de estructuras y procesos dependientes del espacio-tiempo, como es el caso de la geometría de la intrusión salina.

6.1.2. Sobre los resultados del algoritmo de inversión

El algoritmo de inversión se probó para tres experimentos distintos. En el primero y el segundo se invirtieron los datos AMT para calcular los parámetros de tiempo, factor de cementación y permeabilidad, mientras que en el tercer experimento se omitió el parámetro de permeabilidad para que el algoritmo lograra converger con los datos observados. En cuanto al modelado directo, la permeabilidad fue relevante para definir la cantidad de agua que fluye por segundo en el acuífero. Sin embargo, aplicado al algoritmo de inversión, el impacto de las variaciones de permeabilidad fue inestable. Esto quedó demostrado en la gráfica de sensibilidad alta para el parámetro de permeabilidad en la figura 25 y en los resultados del experimento 2. Como se ha descrito, en el experimento 2 el truncamiento del algoritmo en la segunda iteración indicó que las variaciones en la permeabilidad no eran despreciables. Aunque, en el caso ideal del experimento 1, donde no había ruido en los datos observados, no hubo problema para invertir los tres parámetros de manera simultánea.

Como se menciona en los resultados del experimento 2, los datos observados tienen un cierto grado de ruido, lo que genera problemas durante la inversión. Esta puede ser una de las razones por las cuales el algoritmo se truncó en la segunda iteración y la derivada resultó en un valor nulo. Una posible solución sería cambiar la perturbación del parámetro de permeabilidad a una un poco más grande. De esta manera las perturbaciones generarían una derivada diferente a cero.

Otra de las razones por la cual la perturbación de la permeabilidad en el experimento 2 ocasionó un truncamiento en la inversión fue porque la permeabilidad no afectó la estructura de la intrusión salina. Esto se debe a que una perturbación en la permeabilidad afecta más a la distribución de presión a lo largo del tiempo. Al usar el módulo GENER de TOUGH3 se fija el valor del flujo másico de los sumideros y las fuentes, y por lo tanto al variar la permeabilidad TOUGH3 cambia la distribución de presión para mantener el flujo másico del módulo GENER constante. Por lo tanto, la permeabilidad es un parámetro que se encuentra más afectado por la recarga y extracción de agua en el acuífero.

En la figura 32 se muestra la diferencia porcentual entre el modelo de TDS asociado a los datos observados y el modelo final, y en la figura 33 se muestra la diferencia porcentual entre el modelo interpolado y el modelo final. La mayor diferencia porcentual se obtuvo en el perfil de la figura 32, lo cual explica la

obtención del valor de 30 años, mientras que en la figura 33 disminuyó la diferencia porcentual. Por lo tanto, a pesar de que el parámetro de tiempo no converge al valor de 30 años, sí converge mejor a la geometría del perfil de TDS interpolado. Los parámetros asociados al nuevo modelo lograron reproducir el perfil de con un error porcentual entre -0.28% y 0.0052% (figura 33). Por otro lado, en la figura 32 se puede observar un error porcentual de 0% en la zona de la intrusión salina, que surge de la ausencia de ruido en los datos observados.

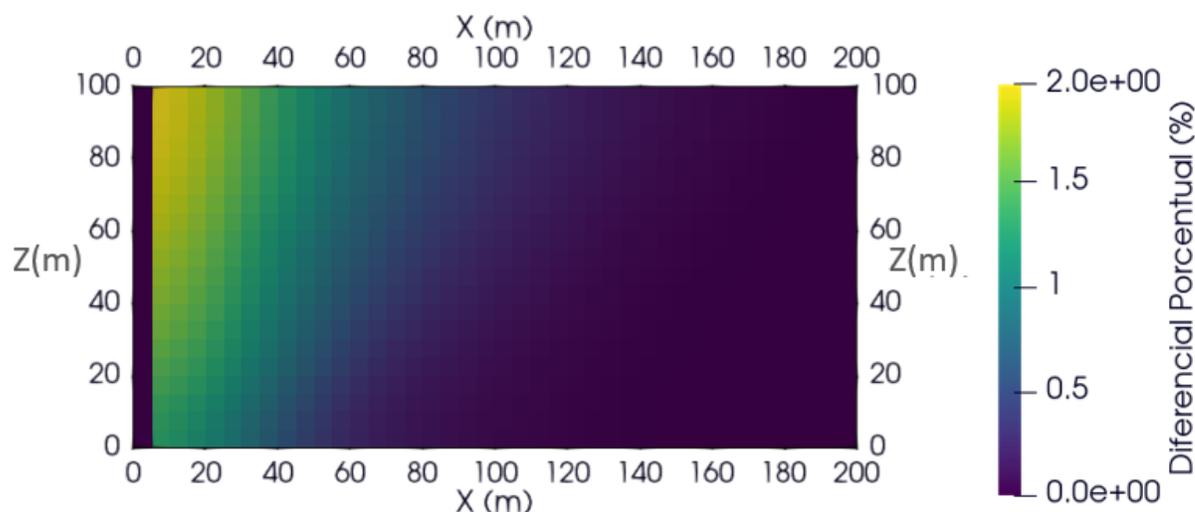


Figura 32. Sección vertical con corte en $y = 0$ m de la diferencia porcentual entre el modelo de TDS asociado a los datos observados sin interpolar y el modelo final del experimento 3.

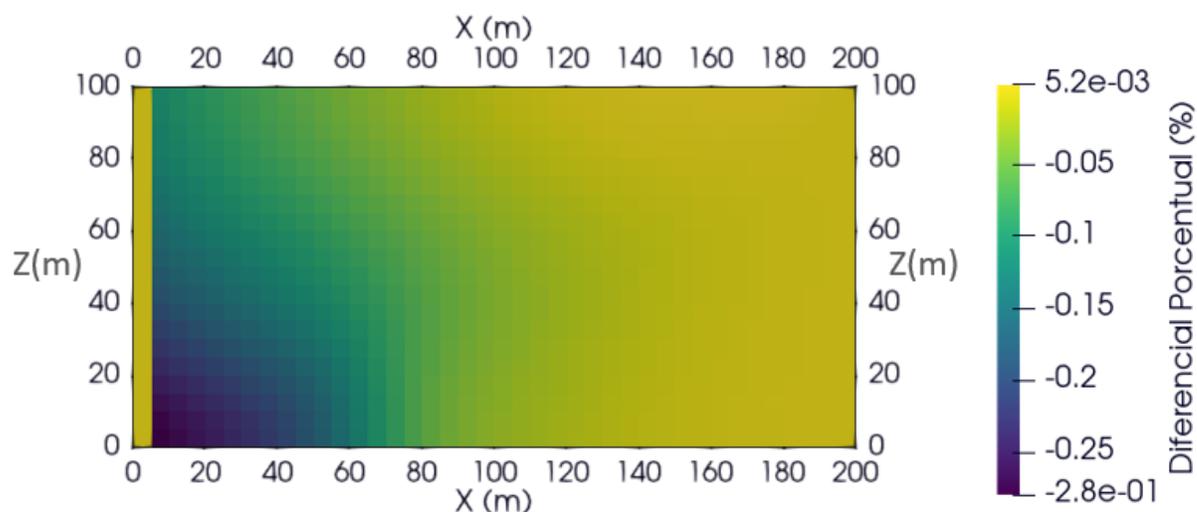


Figura 33. Sección vertical con corte en $y = 0$ m de la diferencia porcentual entre el modelo de TDS con interpolación asociado a los datos observados y el modelo final del experimento 3.

En relación al parámetro de tiempo, la importancia de incluirlo al algoritmo de inversión se ve reflejado en el ajuste del avance de la intrusión salina. En el experimento 3, por ejemplo, se usaron como datos observados los datos asociados a un modelo de TDS interpolados y se encontró que el tiempo se ajustaba mejor a 41 años que a los 30 años de simulación del modelo original. Esto sugiere que el tiempo como valor numérico no tiene ninguna importancia numérica más allá de ajustar de mejor manera la geometría de la intrusión salina.

Para que el parámetro de tiempo se pueda usar como un parámetro a calcular en la inversión, se debe comprender que el objetivo no es estudiar un fenómeno a partir del solo significado numérico del tiempo, sino como un factor que al variar genera un conjunto de cambios en la estructura general de las dos sustancias dentro del acuífero. Esta relación TDS-tiempo también se puede aplicar para relacionar estructuras térmicas con el tiempo, lo cual es de especial interés en el estudio de fenómenos geotérmicos, como el caso de plumas de calor. Otra aplicación sería, por ejemplo, el estudio de la contaminación por derrames químicos en acuíferos, ya que para encontrar la geometría la inversión dependería del desarrollo temporal de la estructura.

Unas de las limitantes del algoritmo de inversión es la dificultad en ubicar la posición del acuífero en el subsuelo y en el costo de cómputo que implicaría invertir más de 3 parámetros. Por un lado, el tiempo depende de las condiciones de frontera y estas delinean el avance de la intrusión salina. Por otro lado, para invertir 2,000 datos de TDS (dadas por la discretización de la malla) después convertidos a datos AMT, el método de modelado directo en serie tendría un costo de cómputo mucho más alto que si se calcula el tiempo con la inversión. Además, al tener más parámetros para calcular en la inversión aumenta la probabilidad de que aparezcan artefactos numéricos o que el programa tenga sensibilidad alta a los parámetros, como sucedió en el experimento 3 con el parámetro de permeabilidad.

El estudio de un fenómeno hidrológico tiene la ventaja de que se puede caracterizar a partir de su simulación en el tiempo, pero solo si parte de la premisa de que se conocen las condiciones iniciales a las cuales se sometió el acuífero y que estas no cambiaron. Pueden darse casos donde otros factores hayan afectado al acuífero, como por ejemplo, un colapso dentro del acuífero o un movimiento grande de tierra debido a un sismo. En tales casos se recomendaría tomar la aproximación de invertir solamente valores de TDS o conductividad con un algoritmo de inversión acoplado. Con este algoritmo de inversión se podría mejorar el tiempo de cómputo para manejar una gran cantidad de variables y tener una mayor sensibilidad del modelado directo hidrológico y geofísico. De esta manera, parámetros como las coordenadas de los pozos de extracción, su tasa de extracción y la ubicación de la frontera por la que entra el agua de mar al acuífero podrían variarse. El método de variaciones para el algoritmo de búsqueda usado en la presente

tesis solo es aplicable para problemas con pocos parámetros de inversión y con un modelado directo en serie.

En cuanto a la porosidad como parámetro a invertir se encontró una sensibilidad alta para una variación de 0.02, pero al implementarla al algoritmo de inversión como único valor a invertir este convergió al valor de 0.18 (sección 5.1). Este comportamiento se puede deber a que la porosidad se usa como dato de entrada en el modelado directo hidrológico en TOUGH3, así como en parte de la conversión TDS-conductividad en la ley de Archie. Un estudio con más detalle sobre la inversión del factor de porosidad para cada punto en la malla a partir de datos de TDS y de AMT en conjunto ayudaría a una mejor caracterización geofísica de las propiedades geológicas del acuífero.

El algoritmo de inversión se podría mejorar mediante la realización de un programa independiente que incorpore el modelado directo hidrogeológico y geofísico. De esta manera, se podrían incorporar aspectos como la inversión de las dimensiones del acuífero, así como invertir los parámetros de porosidad, recarga de agua, saturación y tiempo de manera simultánea. Un programa independiente ayudaría a optimizar el tiempo de inversión para calcular varios parámetros en un acuífero de varias capas.

En cuanto al diseño de los experimentos, se podrían realizar modelos de mayor complejidad. Así se podrían considerar estudios de acuíferos de mayor volumen o escalados a un caso real, o con condiciones de frontera distintas para que no se limite a un acuífero semi-confinado solamente. Otros aspectos a experimentar en el modelo del acuífero podrían incluir la topografía, el movimiento de las mareas o la existencia de barreras físicas para detener temporalmente el avance de la intrusión (Todd, 1974).

6.2. Conclusiones

Los resultados obtenidos a partir del algoritmo de inversión se obtuvieron a través de la implementación del método de mínimos cuadrados con un modelado directo en serie para calcular las derivadas. Esta aproximación al problema de intrusión salina aplicado al esquema de Henry (1964) permitió caracterizar la estructura de la intrusión salina para un acuífero confinado mediante la generación de perfiles de TDS, usando la inversión de datos AMT y datos hidrogeológicos para calcular los parámetros de tiempo, permeabilidad y factor de cementación. Asimismo, la incorporación de datos de TDS en pozos como información a priori logró corroborar la convergencia de la geometría de la intrusión salina.

Para generar un algoritmo de inversión se logró crear un modelado directo en serie con los programas TOUGH3 y UHO3DTMT y se obtuvieron datos AMT partiendo de perfiles de TDS. Se generaron modelos de TDS y se generó una visualización del flujo másico. De los resultados se logró (a) observar el flujo

másico debido a la diferencia de densidades entre el agua de mar y el agua dulce y (b) se encontró que la relación entre la extracción de agua mediante pozos y la recarga de agua definen la dirección promedio en la que fluye el agua a lo largo del acuífero. Por otro lado, al convertir los perfiles de TDS en conductividad la geometría se conservó y se lograron obtener los datos AMT correspondientes al modelado directo. Además, la interfaz de agua de mar reportada por Sun et al. (2017) resulta similar a la calculada en la presente tesis para un tiempo de 30 años.

El algoritmo de inversión de datos AMT se probó con tres experimentos distintos y en todos la geometría de la intrusión salina convergió con el modelo sintético observado. Entre las observaciones que se notaron fue que el parámetro de permeabilidad no afectó la estructura de la intrusión salina, pero sí afectó la distribución de presión a lo largo del tiempo. También se observó que el factor de cementación no generó una mayor diferencia en la geometría de la intrusión salina. En cuanto al parámetro de tiempo, este resultó ser eficaz para converger de manera rápida a la solución correcta, sin la necesidad de tomar mucho tiempo de cómputo.

En general, se encontró que el parámetro de tiempo como parámetro para controlar la forma de la intrusión salina en un acuífero logró caracterizar de manera eficiente la composición del agua de mar dentro del acuífero, pero solo si se consideran unas condiciones iniciales y de frontera estables en el acuífero. Un tema de estudio a futuro sería (a) el estudio de la variación de las fronteras del acuífero tal que se pueda recuperar la forma del acuífero y la geometría de la intrusión y (b) la inversión de parámetros como la porosidad y la recarga de agua de manera simultánea. El algoritmo de inversión además tiene el potencial de ser aplicado a un acuífero con porosidad variable, así como para simular fenómenos similares como el caso de una pluma de calor.

En conclusión, el algoritmo de inversión creado logra modelar los valores de TDS de un acuífero semi-confinado definido por Henry (1964) y calcula el valor de parámetros hidrogeológicos como el factor de cementación y la permeabilidad a partir de datos AMT. Consecutivamente, existe el potencial de ampliar el algoritmo para experimentar con un acuífero de mayor tamaño y complejidad. Dicho lo anterior, los resultados obtenidos de este estudio permitieron valorar las ventajas y desventajas de la aplicación del algoritmo de inversión propuesto para caracterizar el fenómeno de intrusión salina y abren la posibilidad de que el método pueda aplicarse a diferentes tipos de acuíferos con información de pozos, así como a problemas similares con estructuras variables en el tiempo.

Literatura citada

- Abd-Elhamid, H. F., Abd-Elaty, I., & Sherif, M. M. (2019). Effects of aquifer bed slope and sea level on saltwater intrusion in coastal aquifers. *Hydrology*, 7(1):5. <https://doi.org/10.3390/hydrology7010005>.
- Archie, G. (1942). The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. *Transactions of the AIME*, 146(01):54–62. <https://doi.org/10.2118/942054-G>.
- Aunay, B. & Dörfliger, N. (2006). Hydro-socio-economic implications for water management strategies: the case of roussillon coastal aquifer. *Environmental Science*, 1:1–9. <https://hal.science/hal-00468031>.
- Barlow, P. (2003). Ground water in freshwater-saltwater environments of the atlantic coast. *US Geological Survey Circular*, 1262:1–113. <https://doi.org/10.3133/cir1262>.
- Binley, H., Susan S., Huisman, J. A., & A., R. (2015). The emergence of hydrogeophysics for improved understanding of subsurface processes over multiple scales. *Water Resources Research*, 51(6):3837–3866. <https://doi.org/10.1002/2015WR017016>.
- Bjorck, A. (1996). *Numerical Methods for Least Squares Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, USA, (1era ed.). <https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9781611971484>.
- Burke Mena, G. (2016). Modelo hidrogeofísico de intrusión salina en el acuífero costero de punta chame, panamá oeste. *Investigación y Pensamiento Crítico*, 4(2):26–41. <https://doi.org/10.13140/2.1.3961.9522>.
- Capaccioni, B. & Didero (2005). Saline intrusion and refreshing in a multilayer coastal aquifer in the catania plain (sicily, southern italy): dynamics of degradation processes according to the hydrochemical characteristics of groundwaters. *Journal of Hydrology*, 307(1):1–16. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2004.08.037>.
- Chave, A. D., Jones, A. G., Mackie, R., & Rodi, W. (2012). *The Magnetotelluric Method: Theory and Practice*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Commer, M., Kowalsky, M. B., Doetsch, J., Newman, G. A., & Finsterle, S. (2014). MPiTOUGH2: A parallel parameter estimation framework for hydrological and hydrogeophysical applications. *Computers & Geosciences*, 65:127–135. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2013.06.011>.
- CONAGUA (2022). Reporte de acuíferos. subdirección general técnica. <http://sina.conagua.gob.mx/sina/tema.php?tema=acuiferos&ver=reporte&o=1&n=nacional>.
- Costall, A. R., Harris, B. D., Teo, B., Schaa, R., Wagner, F. M., & Pigois, J. P. (2020). Groundwater throughflow and seawater intrusion in high quality coastal aquifers. *Scientific Reports*, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-020-66516-6>.
- Croucher, A. E. & OSullivan, M. J. (1995). The henry problem for saltwater intrusion. *Water Resources Research*, 31(7):1809–1814. <https://doi.org/10.1029/95WR00431>.
- De Montety, V. & Radakovitch (2008). Origin of groundwater salinity and hydrogeochemical processes in a confined coastal aquifer: Case of the rhône delta (southern france). *Applied Geochemistry*, 23(8):2337–2349. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2008.03.011>.
- Friedman, S. P. (2005). Soil properties influencing apparent electrical conductivity: a review. *Computers and Electronics in Agriculture*, 46(1):45–70. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2004.11.001>.

- Gallardo, L. (2004). *Joint two-dimensional inversion of geoelectromagnetic and seismic refraction data with cross-gradients constraint*. Tesis de doctorado, Lancaster University Department of Environmental Science.
- Gallardo-Romero, E. U. (2020). Modelado de datos magnetoteluricos con elementos finitos. Tesis de maestría, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, B.C.
- Harbaugh, A. W. (2005). Modflow-2005: The u.s. geological survey modular ground-water model, the ground-water flow process. <https://doi.org/10.3133/tm6A16>.
- Henry, Harold, C. (1964). Sea water in coastal aquifers. *Geological Survey, Water Supply Paper*, 70–82. <https://doi.org/10.3133/WSP1613C>.
- Herbert, A. W., Jackson, C. P., & Lever, D. A. (1988). Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent upon concentration. *Water Resour. Res.*, 24(10):1781–1795. <https://doi.org/10.1029/WR024i010p01781>.
- Herckenrath, D., Langevin, C. D., & Doherty, J. (2011). Predictive uncertainty analysis of a saltwater intrusion model using null-space monte carlo: Analysis of a saltwater intrusion model. *Water Resour. Res.*, 47(5). <https://doi.org/10.1029/2010WR009342>.
- Himi, M., Salhi, A., Rivero, L., & Pinto, V. (2007). Estudio comparativo del rendimiento y la resolución de diferentes técnicas geofísicas para el control de la intrusión salina en el acuífero de oued laou. *Publicaciones del Instituto Geológico y Minero de España*, 23:317–326. <http://hdl.handle.net/2445/185544>.
- Himmelblau, D. M. & Riggs, J. B. (1997). *Principios básicos y cálculos en ingeniería química*. Prentice Hall-Hispanoamericana, México.
- Hinnell, A. C., Ferre, T. P. A., & Vrugt (2010). Improved extraction of hydrologic information from geophysical data through coupled hydrogeophysical inversion. *Water Resources Research*, 46. <https://doi.org/10.1029/2008wr007060>.
- Hinsby K., E. W. M., Loosli H. H., M. M., & F., B. (2001). The modern water interface: recognition, protection and development. 189(1):271–288. <https://doi.org/10.1144/GSL.SP.2001.189.01.16>.
- Huyakorn, P. S., Springer, E. P., Guvanasen, V., & Wadsworth, T. D. (1986). A three-dimensional finite-element model for simulating water flow in variably saturated porous media. *Water Resources Research*, 22(13):1790–1808. <https://doi.org/10.1029/WR022i013p01790>.
- IMTA (2019). Reporte general sobre aguas subterráneas del 2019. *Secretaría del medio ambiente y recursos naturales*. <https://doi.org/10.24850/i-imta-2019-01>.
- Isdale, J., Spence, C., & Tudhope, J. (1972). Physical properties of sea water solutions: viscosity. *Desalination*, 10(4):319–328. [https://doi.org/10.1016/S0011-9164\(00\)80002-8](https://doi.org/10.1016/S0011-9164(00)80002-8).
- Join, J.-L., Folio, J.-L., & Robineau, B. (2005). Aquifers and groundwater within active shield volcanoes. evolution of conceptual models in the piton de la fournaise volcano. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 147(1):187–201. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2005.03.013>.
- Kouzana, L. & Benassi, R. (2010). Geophysical and hydrochemical study of the seawater intrusion in mediterranean semi arid zones. case of the korba coastal aquifer. *Journal of African Earth Sciences*, 58(2):242–245. <https://doi.org/10.1016/j.jafrearsci.2010.03.005>.

- Kowalsky, M. B., Finsterle, S., Williams, K. H., Murray, C., Commer, M., Newcomer, D., Englert, A., Steefel, C. I., & Hubbard, S. S. (2012). On parameterization of the inverse problem for estimating aquifer properties using tracer data. *Water Resources Research*, 48. <https://doi.org/10.1029/2011wr011203>.
- Luján, V. & Romo, J. M. (2010). Audiomagnetotelluric investigation of seawater intrusion using 2-d inversion of invariant impedances. *Geologica Acta: an international earth science journal*, 8(1):16. <https://doi.org/10.1344/105.000001515>.
- McDonnell, M., Águila, J., & Hamill, G. (2023). Four-dimensional electrical resistivity imaging for monitoring pumping-induced saltwater intrusion in a coastal aquifer. *Science of The Total Environment*, 867. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.161442>.
- Micallef, A., Person, M., & Haroon (2020). 3d characterisation and quantification of an offshore freshened groundwater system in the canterbury bight. *Nat Commun*, 11(1):1372. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-14770-7>.
- Narasimhan, T. N. & Witherspoon, P. A. (1976). An integrated finite difference method for analyzing fluid flow in porous media. *Water Resources Research*, 12(1):57–64. <https://doi.org/10.1029/WR012i001p00057>.
- Newman, G. A. & Alumbaugh, D. L. (1995). Frequency-domain modelling of airborne electromagnetic responses using staggered finite differences1. *Geophysical Prospecting*, 43(8):1021–1042. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2478.1995.tb00294.x>.
- Nocedal, J. & Wright, S. (2006). *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer New York.
- Ouhamdouch, S. & Bahir (2021). Seawater intrusion into coastal aquifers from semi-arid environments, case of the alluvial aquifer of essaouira basin (morocco). *Carbonates Evaporites*, 36(1):5. <https://doi.org/10.1007/s13146-020-00663-9>.
- Pruess, K., Oldenburg, C., & Moridis, G. (1999). TOUGH2 users guide, version 2.0. 210.
- Purvance, D. T. & Andricevic, R. (2000). On the electrical-hydraulic conductivity correlation in aquifers. *Water Resources Research*, 36(10):2905–2913. <https://doi.org/10.1029/2000WR900165>.
- Renard, P., M. E. (2004). Geochemical characterization methodologies. monitoring, modeling and management of coastal aquifers. 12(5):325–336. <https://doi.org/10.3390/app12157944>.
- Rubin, Y. & Hubbard, S. S. (2005). *Hydrogeophysics - Opportunities and Challenges*, volume 5 of *Hydrogeophysics*. Springer, Dordrecht, The Netherlands, (1era ed.).
- Simpson, F. & Bahr, K. (2005). *Practical magnetotellurics*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Slater, L. (2007). Near surface electrical characterization of hydraulic conductivity: From petrophysical properties to aquifer geometries - A review. *Surveys in Geophysics*, 28(2-3):169–197. <https://doi.org/10.1007/s10712-007-9022-y>.
- Sun, D., Niu, S., & Zang, Y. (2017). Impacts of inland boundary conditions on modeling seawater intrusion in coastal aquifers due to sea-level rise. *Nat Hazards*, 88(1):145–163. <https://doi.org/10.1007/s11069-017-2860-0>.
- Thorslund, J. & van Vliet (2020). A global dataset of surface water and groundwater salinity measurements from 1980–2019. *Sci Data*, 7(1):231. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-0562-z>.

- Todd, D. K. (1974). Salt-water intrusion and its control. *Journal AWWA*, 66(3):180–187. [https://doi.org/ 10.1002/j.1551-8833.1974.tb01999.x](https://doi.org/10.1002/j.1551-8833.1974.tb01999.x).
- Todd, D. K. (2009). *Groundwater hydrology*. John Wiley & Sons, (2a ed.).
- Tran, A. P., Dafflon, B., Hubbard, S. S., Kowalsky, M. B., Long, P., Tokunaga, T. K., & Williams, K. H. (2016). Quantifying shallow subsurface water and heat dynamics using coupled hydrological-thermal-geophysical inversion. *Hydrology and Earth System Sciences*, 20(8):3477–3491. [https://doi.org/ 10.5194/hess-20-3477-2016](https://doi.org/10.5194/hess-20-3477-2016).
- V., B. (2015). Conference: Workshop “estudio, aprovechamiento y gestión del agua en terrenos e islas volcánicas” at: Las palmas de gran canaria, contribución de los estudios electromagnéticos aeroportados (htem) a la caracterización hidrogeológica de islas volcánicas: revisión de las últimas investigaciones. <http://hdl.handle.net/10553/12736>.
- Vereecken, H., Kemna, A., & Tillmann, A. (2006). Aquifer characterization by geophysical methods. *Encyclopedia of hydrological sciences*. [https://doi.org/ 10.1002/0470848944.hsa154b](https://doi.org/10.1002/0470848944.hsa154b).
- Walton, N. (1989). Electrical conductivity and total dissolved solids—what is their precise relationship? *Desalination*, 72(3):275–292. [https://doi.org/ 10.1016/0011-9164\(89\)80012-8](https://doi.org/10.1016/0011-9164(89)80012-8).
- Waxman, M. & Smits, L. (1968). Electrical Conductivities in Oil-Bearing Shaly Sands. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 8(02):107–122. [https://doi.org/ 10.2118/1863-A](https://doi.org/10.2118/1863-A).
- Yee, K. (1966). Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(3):302 – 307. [https://doi.org/ 10.1109/TAP.1966.1138693](https://doi.org/10.1109/TAP.1966.1138693).

Anexo

Anexo A. Modelado con TOUGH3 de un acuífero con porosidad variable

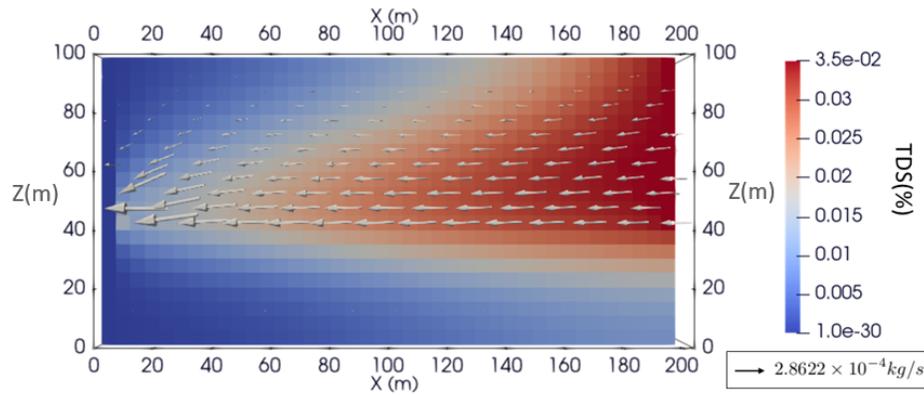
En este experimento se consideró un acuífero estratificado de tres capas con espesores de 60 m, 20 m y 20 m. El experimento se corrió para un tiempo de 12 y 16 años, sin considerar pozos de extracción y difusión. Esto último se considera con el propósito de obtener un perfil en dos dimensiones para estudiar solamente la propagación del agua de mar en un medio estratificado, además de que el modelo deja de variar a partir de los 20 años de la simulación. Los parámetros se ajustaron a los de la tabla 4 y los parámetros de densidad, porosidad y permeabilidad fueron variados según los datos de la tabla 10.

Tabla 10. Valores de parámetros hidrogeológicos para el modelado directo con TOUGH3.

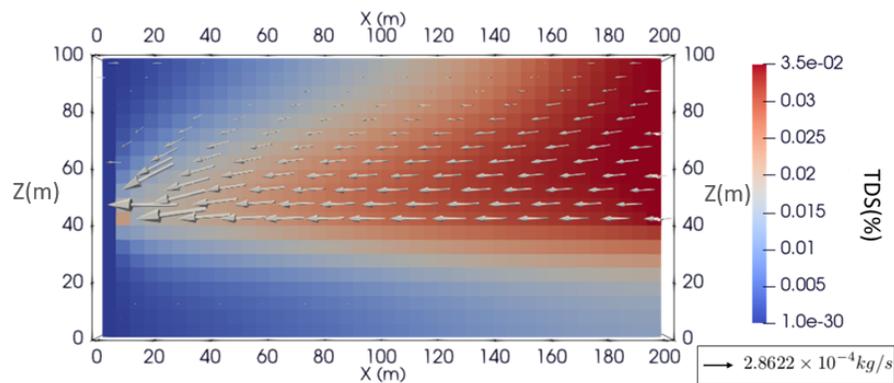
No.	$z(m)$	Densidad de la roca (kg/m^3)	Porosidad	Permeabilidad x, y, z (m^2)
1	$40 < z \leq 100$	2300	0.35	1.18E-11
2	$20 < z \leq 40$	2500	0.25	1.18E-12
3	$0 < z \leq 20$	2600	0.15	1.18E-14

El perfil de concentraciones en TDS que se obtuvo a partir del modelado de TOUGH3 se presenta en la figura 34, donde la densidad de la roca aumenta con la profundidad, mientras que la permeabilidad y la porosidad disminuyen con la profundidad. Las figuras 34(a) y 34(b) muestran un corte en $y = 0$ m del modelo de concentraciones en TDS con vectores de flujo de agua para 12 y 16 años respectivamente. Por otro lado, la figura 34(c) muestra el mismo perfil de concentraciones en TDS que la figura 34(b), pero con vectores de flujo sin magnitud variable, de tal manera que se pueda observar la orientación del flujo de agua en zonas de flujo lento.

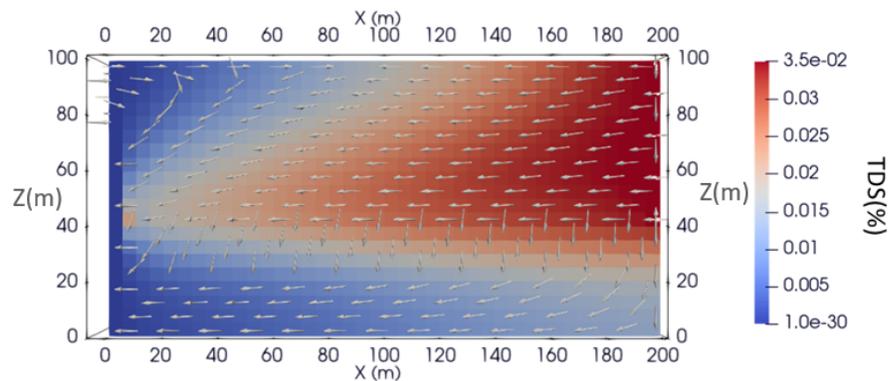
Con respecto a la interfaz salina de la capa 1, se observa en las figuras 34(a) y 34(b) una distribución de concentración total de sales disueltas similar a la figura 15, la cual sigue un comportamiento de advección debido a la diferencia de densidad entre el agua salada y dulce. La similitud se debe a que en la capa 1 los parámetros hidrogeológicos son iguales a los del modelo de acuífero homogéneo de la figura 34(c). Sin embargo, a diferencia del experimento 1, la capa 1 del modelo estratificado muestra un flujo de izquierda a derecha. Además de esto se observa que en la capa 1 hay un mayor flujo másico con magnitud constante a lo largo del acuífero. El comportamiento puede deberse al espacio limitado que tiene la intrusión para difundirse a largo del eje z en el acuífero.



(a) Sección vertical del modelo de TDS para un tiempo de 12 años, donde los vectores indican la magnitud y orientación del flujo de agua.



(b) Sección vertical del modelo de TDS para un tiempo de 16 años, donde los vectores indican la magnitud y orientación del flujo de agua.



(c) Sección vertical del modelo de TDS para un tiempo de 16 años, donde los vectores indican solamente la orientación del flujo de agua con el fin de observar la dirección de flujo en las capas 1 y 3.

Figura 34. Cortes en vertical de un modelo de TDS para un acuífero heterogéneo con intrusión salina. El modelo inicial considera un medio de tres capas, con porosidades, densidades de roca y permeabilidades dadas por la tabla 10.

Otra característica que se observa en las tres figuras es que el flujo de agua ocurre en dirección de

derecha a izquierda, que coincide con el sentido de la migración de la intrusión salina. De la misma manera, el efecto de advección se observa mejor en la figura 34(c), donde se observa cómo la recarga de agua entra en la esquina inferior de la capa 1 y baja hasta la esquina inferior izquierda. La concentración salina alta que existe en la punta de la intrusión salina es causada por la acumulación de agua de mar en la frontera antes de salir de la frontera izquierda. La frontera izquierda por donde entra la recarga de agua va mayormente en dirección opuesta al sentido del valor inicial, lo cuál explica el avance rápido de la intrusión en comparación con los experimentos 1 y 2.

Analizando el comportamiento del flujo de agua entre las capas 1 y 2 se puede notar una disminución en la magnitud de flujo másico que pasa entre ambas capas. Este cambio de orientación y magnitud sucede a causa del valor bajo de porosidad y permeabilidad que hay en la segunda capa. Como se muestra en la figura 15, el agua siempre buscará el camino que oponga una menor resistencia al flujo. En los casos de las figuras 34(a) y 34(b), la disminución de la porosidad con la profundidad causa una menor magnitud de flujo másico de la capa 1 hacia la capa 2.

En la segunda y tercer capa del modelo hay una menor permeabilidad, por lo que el agua de mar encuentra mas difícil moverse hacia la tercer capa del modelo. En especial, desde la segunda capa la diferencia de densidad entre el agua de mar y agua dulce hace que el agua de mar se traslade lentamente hacia la capa 2. La magnitud del flujo másico en la capa 3 es casi nula y, en consecuencia, la intrusión salina llena completamente la capa 1 a los 17 años de simulación, mientras que en las capas 2 y 3 el agua de mar apenas comienza a permear.

Tomando lo anterior en cuenta, el estudio de un acuífero estratificado con porosidad variable podría usarse para caracterizar las zonas donde es menos probable que ocurra la intrusión salina y, por ende, definir la profundidad adecuada de perforación. Una desventaja de usar este método es que al perforar de la capa 1 hacia la capa 3 es posible que se facilite la intrusión salina hacia las capas inferiores.

La porosidad como parámetro variable en el eje z del acuífero resultó ser un parámetro que generó cambios grandes en la magnitud y dirección de flujo másico. Al ser este parámetro más relevante a la conversión de concentración de sales a conductividad, la porosidad aplicada al algoritmo de inversión afectaría de manera notable al modelo de conductividades en comparación con los parámetros de factor de cementación y permeabilidad. Sin embargo, esta alta sensibilidad también puede ocasionar mayores errores al momento de calcular las derivadas en la inversión, mientras que variables como la densidad del medio tendrían un impacto despreciable si se invierten en un algoritmo de inversión. Durante la realización de este experimento también se ponderó la posibilidad de implementar un algoritmo de inversión en el

que se pueda invertir tanto el parámetro de porosidad como el de permeabilidad. No obstante, invertir para un acuífero de tres capas con porosidades y permeabilidades distintas requeriría un mayor tiempo de cómputo (algo que la implementación de un algoritmo de inversión acoplado podría solucionar).