



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Modelos de Red de Poros para la
Obtención de Propiedades
Efectivas de Flujo y Transporte
en Yacimientos Petroleros**

TESIS

Que para obtener el título de
Ingeniero Petrolero

P R E S E N T A

Edgar Giovani Martínez Mendoza

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Martín Alberto Díaz Viera



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2016

Resumen

La motivación principal de este trabajo fue desarrollar un enfoque metodológico para la caracterización de medios porosos a escala de poro, con el propósito de predecir el comportamiento de propiedades efectivas de flujo. La Modelación de Red de Poros es una técnica que ha tenido gran auge en los últimos años, la cual varios autores la han empleado para obtener propiedades como permeabilidad absoluta, permeabilidades relativas y presión capilar, las cuales son regularmente obtenidas por pruebas de laboratorio y/o correlaciones experimentales.

El objetivo de los Modelos de Red de Poros es el de representar el espacio poroso de una roca en rangos por debajo de milímetros (escala de poro), mediante una red digital a la que se le asignan propiedades geométricas y topológicas, para conseguir un mayor acercamiento a la estructura original. Luego, se establecen modelos matemáticos y numéricos para simular el flujo y transporte de fluidos, con el fin de obtener predicciones de propiedades efectivas referentes a estos procesos.

De forma breve, se revisa la literatura en la Modelación de Red de Poros, dejando ver la versatilidad y el auge de aplicación que ha obtenido este enfoque en las últimas décadas. De esta misma manera, se mencionan las formas en las cuales se obtiene o formula un Modelo de Red de Poros, la descripción de los principales elementos y características que lo conforman, y la repercusión que brindan éstos en las propiedades efectivas que se desean estimar. Así mismo, se establecen los fundamentos y leyes físicas que permiten a los Modelos de Red de Poros simular procesos de flujo y transporte, y las técnicas empleadas para poder reproducir procesos de desplazamiento de fluidos inmiscibles en medios porosos.

Finalmente, se desarrollan tres casos de estudio que permiten aplicar parte del flujo de trabajo de los Modelos de Red de Poros. Esto permite estudiar fenómenos de flujo para condiciones generales y fases fluidas homogéneas (agua, aire y mercurio), así como recrear procesos de drene primario; especialmente, pruebas de porosimetría (sistemas mercurio-aire). Mediante estos procesos, se estiman valores de permeabilidad, curvas de presiones capilares y curvas de permeabilidades relativas.

Abstract

The principal motivation of this work was to develop a methodological approach for characterization of porous media at pore scale, in order to predict the behavior of effective flow properties. Pore network modeling is a technique that has been booming in recent years, and several authors have used it to compute properties such as absolute permeability, relative permeability, and capillary pressure, which are regularly obtained by either laboratory tests or experimental correlations.

The goal of pore network modeling is to mimic the rock's pore space at ranges below millimeters (pore scale), through a digital network with geometrical and topological properties to achieve greater approach to the original structure. Afterwards, mathematical and numerical models are set to simulate flow and transport, in order to obtain predictions of effective properties concerning these processes.

Briefly, the pore network modeling literature is reviewed, showing the rising application and versatility that has acquired in recent decades. Similarly, the ways to obtain a pore network model are mentioned, describing their main elements and characteristics, and the impact that provide these in the desired estimations. Further, fundamentals and physical laws that allow pore network models simulate flow, transport, and immiscible fluid displacements through porous media are established.

Finally, three study cases allowing the pore network workflow application are developed. This allows to study flow phenomena for general conditions and homogeneous fluid phases (water, air and mercury), and to recreate primary drainage; especially, porosimetry tests (air-mercury systems). Through these processes, permeability, capillary pressure curves and relative permeability curves are estimated.

Índice general

	Página
Resumen	I
Abstract	III
Índice general	VII
Lista de figuras	X
Lista de tablas	XII
Nomenclatura	XIII
1. Introducción	1
1.1. Modelos de medios porosos	1
1.2. ¿Por qué modelación a escala de poro?	3
1.3. Enfoque a escala de poro	3
2. Estado del arte	5
3. Descripción de los elementos de un Modelo de Red de Poros	9
3.1. Red	10
3.2. Geometría	12
3.3. Fases	14
3.4. Física a escala de poros	14
3.5. Métodos	15
3.5.1. Modelo de flujo tipo Stokes	15
3.5.1.1. Permeabilidad absoluta	17
3.5.2. Modelo de desplazamiento inmisible	17

3.5.2.1. Curva de presiones capilares	18
3.5.3. Permeabilidad relativa	19
3.6. Modelo computacional	19
4. Metodología para la obtención de propiedades efectivas	21
4.1. Flujo de trabajo	21
4.2. Ejemplo de aplicación	25
4.3. Permeabilidad	29
4.4. Presión capilar	30
5. Caso de estudio 1	33
5.1. Descripción del caso de estudio	33
5.2. Análisis exploratorio de los datos	33
5.3. Modelo de Red de Poro	36
5.4. Permeabilidad	38
5.5. Permeabilidades relativas	39
5.6. Discusión de resultados	41
6. Caso de estudio 2	43
6.1. Descripción del caso de estudio	43
6.2. Análisis exploratorio de los datos	44
6.3. Modelo de Red de Poro	46
6.4. Presión capilar	48
6.5. Discusión de resultados	52
7. Caso de estudio 3	53
7.1. Descripción del caso de estudio	53
7.2. Análisis exploratorio de los datos	54
7.3. Modelo de Red de Poro	60
7.4. Permeabilidad	61
7.5. Presión capilar	62
7.6. Permeabilidades relativas	66
7.7. Discusión de resultados	67
8. Conclusiones	69
A. Relación Hagen-Poiseuille	71
A.1. Relación de Hagen-Poiseuille	73

<i>Índice general</i>	VII
B. Teoría de la Percolación	75
B.1. Enfoques de percolación	76
B.2. Variables básicas y descripciones cualitativas	77
B.3. Percolación de invasión	78
B.4. Tipos de percolación de invasión	80
Bibliografía	87

Índice de figuras

3.1. Relación nodo-conector	11
3.2. Principales redes consideradas en un Modelo de Red de Poros	11
3.3. Número de coordinación	12
3.4. Red de un medio poroso	12
3.5. Geometrías regulares de poros y gargantas	13
3.6. Intersección poro-garganta.	14
3.7. Esquema poro-garganta-poro	16
4.1. Imágenes micro-CT de carbonatos	22
4.2. Representación tridimensional de carbonatos	23
4.3. Comparación de reconstrucciones del espacio poroso para una arenisca Fontainebleau	23
4.4. Modelo de Red de Poros para carbonatos	24
4.5. Flujo de trabajo para los Modelos de Red de Poros	25
4.6. Red de dimensión $3 \times 3 \times 3$	26
4.7. Nodo con número de coordinación seis en color naranja.	26
4.8. Geometría regular de un Modelo de Red de Poros	27
4.9. Flujo tipo Stokes: presión en la red al término de la simulación	29
4.10. Presión en la red	30
4.11. Curva de presión capilar	31
5.1. SGL Sigracet [®] 10BA	34
5.2. Histogramas de los diámetros de poros	35
5.3. Histograma de los diámetros de gargantas	35
5.4. Geometría del Modelo de Red de Poros	37
5.5. Geometría del Modelo de Red de Poros	37
5.6. Geometría del Modelo de Red de Poros	38
5.7. Presiones debidas al flujo tipo Stokes	39
5.8. Curva de permeabilidades relativas	40

6.1.	Histogramas de los diámetros de poros	45
6.2.	Histogramas de los diámetros gargantas	46
6.3.	Geometría del Modelo de Red de Poros	48
6.4.	Curva de presiones capilares	49
6.5.	Esquema de desplazamiento	50
6.6.	Perfil de invasión	51
7.1.	Sandstone_S1	53
7.2.	Histograma de los diámetros de poro	55
7.3.	Ajuste de distribución para los diámetros de poro	56
7.4.	Histograma de los diámetros de garganta	57
7.5.	Ajuste de distribución para los diámetros de garganta	58
7.6.	Histograma de los diámetros de poro y garganta	58
7.7.	Histograma del número de coordinación	59
7.8.	Modelo de Red de Poros	61
7.9.	Presiones debidas al flujo tipo Stokes	62
7.10.	Curva de presiones capilares	63
7.11.	Esquema de desplazamiento	64
7.12.	Perfil de invasión	65
7.13.	Curva de permeabilidades relativas para la arenisca S1_Sandstone	66
A.1.	Flujo de Hagen-Poiseuille.	73
B.1.	Comparación de percolación continua y discreta	76
B.2.	Modelo de percolación discreta	77
B.3.	Secuencia de percolación de invasión	79
B.4.	Comparativa entre enfoques de percolación.	81

Índice de tablas

3.1. Elementos que constituyen un Modelo de Red de Poros	10
4.1. Características de la red	26
4.2. Distribución Weibull para el diámetro de poros y gargantas	27
4.3. Descripción de las fases fluidas	28
4.4. Relación entre la física a escala de poro y los algoritmos	28
4.5. Resultados de la simulación flujo tipo Stokes	29
4.6. Resultados de la simulación de desplazamiento	30
5.1. Descripción estadística	34
5.2. Descripción del Modelo de Red de Poros	36
5.3. Resultados de la simulación flujo tipo Stokes	39
6.1. Parámetros de distribuciones Weibull	44
6.2. Principales datos experimentales de una muestra arenisca <i>Clear Creek</i> . (P_c^0 : presión capilar de entrada, a la que la fase no mojante empieza a invadir el medio.)	44
6.3. Descripción estadística	45
6.4. Descripción del Modelo de Red de Poro	47
6.5. Resultados de la simulación de desplazamiento	49
7.1. Descripción general de la muestra S1_Sandstone	54
7.2. Descripción estadística de los diámetros de poro	54
7.3. Ajuste de distribución para los diámetros de poro	55
7.4. Descripción estadística de los diámetros de garganta	56
7.5. Ajuste de distribución para los diámetros de garganta	57
7.6. Descripción estadística del número de coordinación	59
7.7. Descripción del Modelo de Red de Poro	60
7.8. Resultados de la simulación flujo tipo Stokes	61
7.9. Resultados de la simulación de desplazamiento	63

Nomenclatura

Subíndices

- ∞ ... Enlaces/sitios activos (percolación)
- θ Componente azimutal
- c Capilar; crítica (percolación)
- def .. Fase defensora
- eff . Efectiva
- i Índice de poro
- in ... Entrada
- inv .. Fase invasora
- j Índice de poro
- out .. Salida
- r Componente radial
- r Relativa
- t Garganta
- z Componente vertical

Símbolos griegos

- β Parámetro de forma en distribución tipo Weibull
- χ Longitud de correlación
- η Concentración de volumen (percolación)
- η Parámetro de escala en distribución tipo Weibull
- γ Parámetro de localización en distribución tipo Weibull
- κ Conductancia hidráulica
- λ Relación de aspecto
- ρ Densidad de volumen
- Σ Salto o discontinuidad un sistema continuo

σ Tensión interfacial
 τ Lo que entra o sale a través de la frontera de un sistema continuo
 θ Ángulo de contacto
 $\underline{\underline{\sigma}}$ Tensor de esfuerzos

Símbolos

\mathfrak{M} ... Momento lineal
 \mathfrak{R} ... Resistencia
 μ Viscosidad
 A Área de la sección transversal del Modelo de Red de Poros
 B ... Dominio de un sistema continuo
 d Diámetro; dimensionalidad (percolación)
 FF .. Factor de formación
 g Término fuente o sumidero
 K ... Permeabilidad absoluta
 L Longitud del Modelo de Red de Poros
 l Longitud
 M ... Masa
 N ... Dimensión de la red
 n Total de poros
 P ... Fracción o probabilidad
 p Presión
 Q ... Gasto total
 q Flujo
 r Radio
 S Saturación
 s Elementos interconectados
 t Tiempo
 v Velocidad
 z Número de coordinación

Superíndices

α Fase fluida
 a Aire
 m ... Mercurio
 w Agua

Introducción

Los fenómenos de flujo y transporte en medios porosos (suelos, rocas, madera, etc.), así como matrices porosas sintéticas (concretos y tejido artificiales), surgen en diversos campos de la ciencia y la tecnología, que van desde la agricultura, biomédica, construcción, cerámica, química y la ingeniería petrolera, a ciencias de la alimentación y del suelo. En todos estos campos, los procesos son estudiados a diferentes escalas de tiempo y espacio. Cada escala incorpora variables que intervienen en el estudio de los fenómenos físicos (Roof y Hassanizadeh, 2010), de ahí que se necesiten metodologías de estudio para la estimación de propiedades del medio. Cualquier modelo para el estudio de fenómenos de flujo y transporte en un medio poroso debe incluir, como primer elemento, una descripción realista del medio. Sin embargo, la selección del modelo dependerá del tipo de medio que se desee estudiar y el cálculo de propiedades, así como las limitaciones computacionales que se tengan. En general, los modelos deben ser lo suficientemente simples para la simulación computacional y contener las características esenciales del medio poroso de interés.

1.1. Modelos de medios porosos

Debido a que el modelado en medios porosos implica la transferencia de datos entre varias escalas de longitud, los efectos del intercambio entre escalas son de gran importancia. De hecho, muchos estudios de flujo y transporte en medios porosos fueron motivados por una prerrogativa central: ¿Cómo es que los procesos en una escala de estudio influyen en la escala mayor siguiente? Como consecuencia, el desarrollo de modelos, que reflejan la amplia gama de escalas de una manera sistemática y coherente, es un problema abierto con enorme complejidad. Por lo regular, la jerarquía de escalas en medios porosos se divide en: *(i)* escala molecular, *(ii)* micro o escala de poro, *(iii)* meso o escala de laboratorio, *(iv)* macro o escala de campo y *(v)* mega o escala regional. Ya que los medios porosos no son ni homogéneos o uniformes, las mediciones de parámetros constitutivos pueden denotar un significado en cada escala de estudio.

A través de los años, muchos modelos de medios porosos se han desarrollado, la mayoría de los cuales han sido motivados bajo las características de ciertos fenómenos. Aunque un modelo podría ser utilizado para estudiar un fenómeno particular y predecir algunas de sus propiedades, no es suficientemente general para el estudio de otros tipos de fenómenos. Además, estos modelos a menudo consideran parámetros que, o bien se han definido muy vagamente o no tienen significado físico alguno. La única finalidad de tales parámetros es la de establecer una congruencia entre las predicciones de los modelos y los datos experimentales de un fenómeno particular (Sahimi, 2011). De acuerdo a la forma en la que se conceptualiza o discretiza el medio poroso, los principales modelos de estudio son: escala de poro, medio efectivo y del continuo.

Escala de poro. Investigan los efectos de la estructura, conectividad y forma del medio poroso en las propiedades de flujo, transporte y otras características dinámicas del medio. El objetivo deseado de estos modelos es encontrar una relación entre el medio poroso y los fenómenos bajo estudio.

- Unidimensionales
- Periódicos espaciales
- Redes ramificadas (*Branching networks*)
- Redes de poros

Medio efectivo. La principal característica de estos modelos es que son capaces de representar medios porosos heterogéneos. En términos generales, existen al menos tres clases diferentes de modelos: *(i)* los que están hechos de una distribución de formas sobre otro dominio uniforme, *(ii)* los que se basan en la teselación del espacio mediante funciones de correlación y *(iii)* aquellos en los que se distribuyen líneas con una relación de aspecto o extensión determinadas.

- Empaque de esferas
- Distribución de partículas y funciones de correlación
- Densidad de probabilidad de n-partículas
- Distribución de partículas del mismo tamaño
- Distribución de esferas dispersas

Continuo. Requiere el uso de técnicas y herramientas especiales, que en conjunto se conocen como geoestadística, para manipular propiedades experimentales que por lo general están incompletas o varían en gran medida sobre diferentes escalas de longitud. Estos modelos por lo general requieren técnicas estocásticas para describir las propiedades del medio en términos de cantidades estadísticas, y posteriormente desarrollar ecuaciones estocásticas de flujo y transporte.

- Conductividad hidráulica aleatoria
- Fractales
- Multifractales
- Reconstrucciones

1.2. ¿Por qué modelación a escala de poro?

La verificación de soluciones a escala de poro se tornan difíciles debido a que la mayoría de la instrumentación está disponible para escalas mayores. Una forma de superar esta situación, es definir variables macroscópicas mediante el promedio de propiedades microscópicas sobre un Volumen Elemental Representativo (*REV* por sus siglas en inglés) (Bear, 1972). El enfoque de modelado del continuo determina ecuaciones de balance, que gobiernan los procesos físicos, con variables definidas a través un volumen elemental representativo. De esta manera, las ecuaciones de gobierno pueden describir un sistema homogéneo equivalente. Sin embargo, estas ecuaciones no contienen información referentes a propiedades macroscópicas, lo que las hace insuficientes al menos que nuevas ecuaciones sean proporcionadas. Estas nuevas relaciones son conocidas como ecuaciones constitutivas, las cuales dependen de la estructura interna del medio considerado.

A pesar de que el enfoque del continuo es una práctica usual, existen ciertas dificultades y desventajas involucradas. Desarrollar experimentos que reflejen una relación constitutiva es complejo y costoso. Además, aunque las relaciones constitutivas tienen un impacto crucial en la exactitud de los modelos de flujo y transporte, son soluciones aproximadas y a menudo inciertas. Por lo tanto, aunque las relaciones constitutivas de tales modelos sean calculadas mediante una amplia variedad de técnicas, estos cálculos son todavía complejos para el uso rutinario en la investigación de muchos fenómenos importantes en medios porosos.

Para estas situaciones, la modelación a escala de poro ofrece una herramienta importante para desarrollar relaciones constitutivas que son difíciles e incluso imposibles de obtener a través de pruebas experimentales. Además, esta escala de estudio permite una mayor versatilidad en la selección de parámetros, una mayor variedad de datos cuantitativos, frecuencia de observación, diseños de experimentos numéricos más sencillos y la incorporación de la morfología del medio; siendo esta última la característica que ha detonado un mayor interés en este enfoque.

1.3. Enfoque a escala de poro

El modelado a escala de poro comprende tres aspectos: *(i)* la conceptualización de la geometría y estructura, *(ii)* la formulación y solución de las ecuaciones físicas a escala de poro y *(iii)* la definición de parámetros macroscópicos (Roof y Hassanizadeh, 2010). De esta manera, es posible incluir ciertas propiedades del medio, que en escalas más grandes son subestimadas. En este enfoque el medio poroso es representado por espacios *vacíos* distribuidos heterogéneamente, con fases fluidas y/o sólidas presentes. La heterogeneidad de esta escala, así como también la complejidad de los sistemas saturados, conllevan a desarrollos de teorías fundamentales de flujo y transporte.

A pesar del gran número de estudios de flujo y transporte en una y varias fases que se han hecho, el estudio de estos procesos a escala de poro está todavía en una etapa temprana. Sin embargo, la

evolución computacional nos ofrece oportunidades para la simulación en dominios más grandes y el modelado de un rango de procesos más amplio. Esto hace que los enfoques de modelado a escala de poro sean potencialmente atractivos como herramientas de medición de propiedades referentes a un fenómeno; ejemplo de esto, los Modelos de Red de Poros.

El Modelado de Red de Poros es un enfoque para el estudio de fenómenos de flujo y transporte a escala de poro, que aunque tiene más de cinco décadas de su propuesta, hoy en día son pocos los grupos de investigación que continúan con el desarrollo de estos modelos. A pesar de esto, los grupos que han seguido esta técnica de modelado tienen gran dominio del tema, permitiéndoles representar fenómenos de flujo y transporte para diferentes sistemas, e involucrar varias disciplinas de ciencias exactas y aplicadas. La principal aplicación de los Modelos de Red de Poros es el estudio de propiedades efectivas en procesos de flujo y transporte, tales como curvas de presión capilar, permeabilidades efectivas, coeficiente de difusión efectiva, entre otras; las cuales, regularmente son obtenidas por pruebas de laboratorio y/o correlaciones experimentales.

Estado del arte

Los primeros trabajos de Modelos de Red de Poros fueron realizados por Irving Fatt en 1956, con los que estudió la importancia de las fuerzas capilares en procesos de flujo de fluidos. Demostró que con el empleo de redes con geometrías simples, tal y como lo hizo con su modelo de tubos capilares, se es posible modelar propiedades dinámicas de flujo y establecer una relación con los tamaños de los capilares (Fatt, 1956; Lenormand y Boris, 1980; Silin y Patzek, 2009). Una característica del modelo de Fatt, y que aún prevalece en la mayoría de los trabajos recientes, es el de considerar al modelo como una red de resistores para la solución de los modelos matemáticos de flujo y transporte. Esta particularidad permite a la ecuación de gobierno -presión, difusividad-incorporar implícitamente la geometría de los elementos de la red.

Debido al desarrollo computacional, los trabajos de la época fueron para esquemas bidimensionales. Ejemplo de ello son los estudios de Lenormand y Boris (1980), en los cuales se consideraron redes conformadas por ductos con intersecciones rectangulares, característica que permitió estudiar el comportamiento de diferentes mecanismos de desplazamiento entre dos fluidos, describiendo estos fenómenos en las uniones entre los ductos.

Una cuestionante en esos años, y en que aún prevalece, es la de describir el avance de un fluido en un medio y relacionar este evento con cualidades propias del sistema. Para estas condiciones, Lenormand *et al.* (1983) y Chandler *et al.* (1982) incorporaron conceptos de la teoría de percolación, la cual toma en cuenta discriminantes que describen la ruta de los fluidos en procesos de desplazamiento inmisible (procesos de drene primario y de imbibición) (Berkowitz y Ewing, 1998; Broadbent y Hammersley, 1957; Dias y Wilkinson, 1986; Hunt y Ewing, 2009).

En el periodo de 1991-1994, varios temas de estudio emergieron. Los temas más prominentes fueron: 1) la estructura de poro y el papel de las correlaciones espaciales; 2) la influencia de diferentes mecanismos de imbibición y el papel de las películas de fase mojantes; 3) procesos de desplazamiento miscibles; 4) sistemas de flujo trifásico; 5) identificación de estructuras porosas

(Celia y Reeves, 1995).

Después de haber obtenido fuertes bases en la descripción los principales procesos que dominan al flujo y transporte, surgió la tarea de optimizar los respectivos modelos numéricos, y con ello la implementación computacional. Propuestas posteriores, como la de Aker *et al.* (1998), involucraban modelar la dinámica del flujo en procesos de drene, a través de cálculos para la evolución en tiempo de la presión. Esto permitió considerar fuerzas capilares y viscosas en los fenómenos sin aumentar, en términos de rendimiento de cómputo, la complejidad de la simulación. Este mismo interés se aplicó en la discretización del medio poroso; sin embargo, al depender los modelos matemáticos de la geometría de los elementos y la topología de la red, la resolución de estos se puede tornar más compleja si la la geometría/topología es más detallada (Larson *et al.*, 1981b; Sahimi y Tsotsis, 1982). La evolución de la discretización fue de lo más simple a lo mas complejo; de un conjunto de capilares a formas regulares, las que a su vez pasarían a ser irregulares. El objetivo principal es que la representación sea lo más cercana posible al medio poroso real. Las investigaciones iniciales que contemplaban estas situaciones, asignaban valores geométricos a cada elemento de la red a partir de distribuciones obtenidas de estudios estadísticos; pero manteniendo topologías regulares (Ioannidis y Chatzis, 1993).

Un progreso en la discretización del medio poroso en el Modelado de Red de Poros, consistió en el desarrollo de un método de reconstrucción de muestras de rocas, mediante un empaque de esferas de diferentes tamaños y con topologías irregulares. Esta vertiente permitió simular drene primario e inyección de agua en escenarios con cambio de mojabilidad, lo que a su vez permitió derivar relaciones entre la estructura de poro, la mojabilidad y la presión capilar (Blunt *et al.*, 2002; Oren *et al.*, 1998). Posteriormente, Man y Jing (2000) presentaron un modelo de red de poros tridimensional para la predicción de propiedades petrofísicas de yacimientos de hidrocarburos (presión capilar, resistividad eléctrica, exponente de cementación y permeabilidad absoluta). Incorporaron atributos geométricos de los poros en su modelo, para simular la distribución de fluido y la conductividad eléctrica bajo el control de la presión capilar y alteraciones de mojabilidad (Man y Jing, 2000).

Los Modelos de Red de Poros pueden también ser usados para el estudio de procesos avanzados como estructuras de carbón (Tomeczek y Mlonka, 1998) o combustión *in-situ* (Lu y Yortsos, 2001). Tomeczek y Mlonka (1998) representaron capas de carbón tanto con poros cilíndricos y no cilíndricos. Mediante el uso de la porosidad experimental, llegaron a la conclusión de que poros esféricos pueden contribuir en la representación. Mientras tanto, Lu y Yortsos (2001) estudiaron los efectos de la microestructura en el frente de combustión. En su modelo, el flujo y transporte de la fase gaseosa es convectiva y ocurre en el espacio poroso, mientras que la transferencia de calor es conductiva y se lleva a cabo en la fase sólida.

En años recientes, Silin y Patzek (2009) presentaron un modelo de flujo implementando una red de poros, denominada *maximal ball*, para poder albergar el método numérico de compresión

bilidad artificial. Las curvas de permeabilidades relativas que obtuvieron fueron muy cercanas a las realizadas en laboratorios. En los trabajos de Dong y Blunt (2009) se modifica este método para desarrollar un algoritmo eficiente en la extracción de redes de poros a partir microtomografía computarizada. Con este algoritmo se pueden establecer pequeñas gargantas de poro, aún cuando la resolución de la imagen es insuficiente.

Los Modelos de Red de Poros contemplan varios campos de estudio, tales como geoestadística, técnicas de imagen, modelación matemática, entre otras; los cuales coadyuvan en la representación de los fenómenos deseados. Ejemplo de ello son los trabajos de Blunt *et al.* (2013, 2002). Sus investigaciones se enfocan en técnicas especializadas de imagen de medios porosos y sus reconstrucciones tridimensionales. Después generan modelos para observar los efectos de diferentes factores en flujo de fluidos newtonianos y no newtonianos, para varios tipos de roca.

Descripción de los elementos de un Modelo de Red de Poros

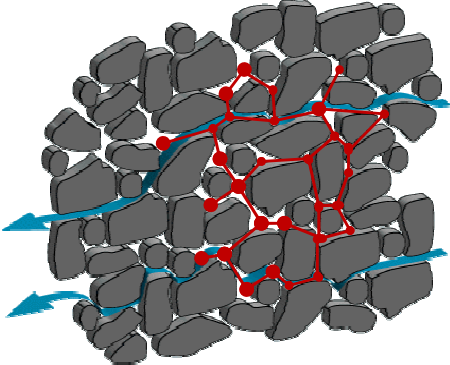
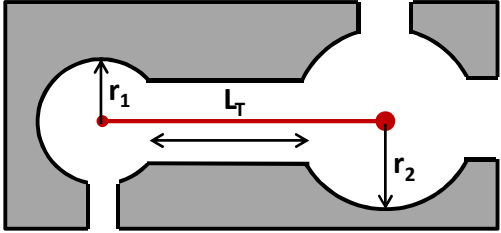
Un Modelo de Red de Poros es un enfoque a escala de poro que permite el estudio de las fuerzas capilares y de la mojabilidad en los parámetros de flujo y transporte. El Modelo de Red de Poros discretiza la morfología del medio, la cual se conforma por *(i)* la geometría que describe la estructura interna y *(ii)* la topología que cuantifica la forma en la que el medio está conectado (Sahimi, 2011). En principio, la estructura interna del medio representa la porosidad, la cual se constituye de poros y gargantas. Los poros se definen como los espacios vacíos más grandes del medio que son conectados por caminos más estrechos llamados gargantas. Esto permite que las simulaciones de los procesos físicos dependan tanto de la geometría como de la conectividad del medio. La capacidad y alcance de un Modelo de Red de Poros para describir un fenómeno deseado, dependen principalmente de las propiedades geométricas y físicas que le sean asignadas; entre más complejas sea la geometría y la conectividad, será mejor la representación del medio poroso. Sin embargo, la complejidad del Modelo de Red de Poros complicará los modelos matemáticos, numéricos y computacionales del fenómeno. Por lo cual, en todo momento se debe de buscar una proporción entre éstos elementos.

En general, las partes fundamentales de los Modelos de red de Poros son la estructura o discretización del medio y los modelos de fenómenos físicos acordes a la escala de estudio. El primer elemento es conocido comúnmente como geometría del Modelo de Red de Poros, el cual consiste en expresar la conectividad del medio y la de representar geoméricamente los poros y gargantas. El segundo elemento, no son más que las expresiones matemáticas que describen el comportamiento de procesos físicos a través del medio poroso, tomando en cuenta la geometría del Modelo de Red de Poros. El óptimo acoplamiento de estos elementos permitirá realizar estimaciones admisibles de los fenómenos bajo estudio.

En el presente trabajo, se descomponen los dos elementos principales de un Modelo de Red de

Poros para tener un mejor entendimiento del modelo en general. Los elementos que se producen son: (i) Red, (ii) Geometría, (iii) Fases, (iv) Física y (v) Métodos. La extensión y capacidad de estos cinco elementos mejorará el alcance del Modelo de Red de Poros, de ahí la importancia que existan líneas de estudio para cada uno de ellos.

Tabla 3.1: Elementos que constituyen un Modelo de Red de Poros

Geometría del Modelo de Red de Poros	Modelos
<ul style="list-style-type: none"> •Red → conectividad •Geometría de poros y gargantas → forma 	<ul style="list-style-type: none"> •Fases •Física a escala de poros •Métodos
	

3.1. Red

Una red es el conjunto de sitios o nodos localizados en el espacio, los cuales se pueden entrelazar mediante enlaces (Roof *et al.*, 2013). En esta abstracción, se consideran tres principios: el primero, dos nodos pueden comunicarse solamente por un enlace en sus extremos; el segundo, un enlace siempre se conecta a dos nodos, es decir, no existen enlaces aislados o conectados a un solo nodo; por último, no existen nodos aislados. La red es el elemento del modelo que denota la conectividad del medio, sustenta la geometría del modelo y funge como malla de simulación.

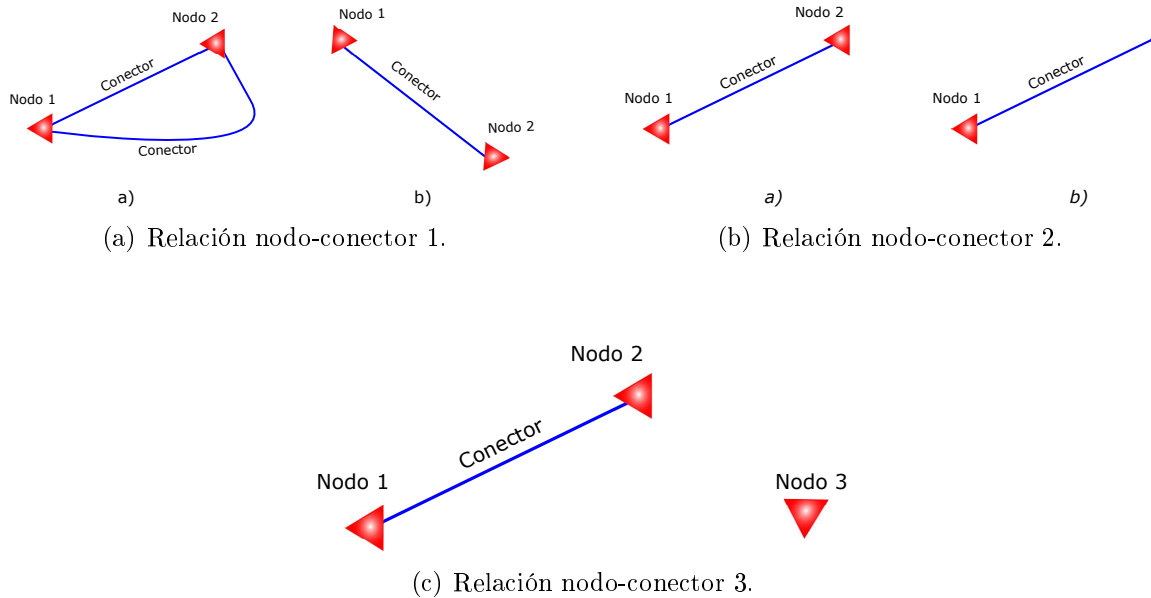


Figura 3.1: Relación nodo-conector. Red en la que los nodos son representados por triángulos y los conectores por líneas azules. (a) Para establecer la conexión entre dos nodos, sólo se podrá hacer mediante un solo conector. (b) Los conectores siempre deberán unirse a dos nodos o sitios. (c) Nodos aislados o no comunicados con otros entes, serán eliminados de la red.

Las condiciones y características de conectividad entre nodos y enlaces ofrecen un patrón representativo de la red. El patrón de la red define a su vez la similitud con la cual se representa al medio poroso; pero, también es factor clave para la resolución de los modelos matemáticos del sistema. Las dos principales formas de clasificar las redes de los Modelos de Red de Poros son como regulares e irregulares. Las redes regulares se caracterizan por tener un patrón definido y que se repite a lo largo de toda la red, ejemplos de estas redes tenemos las cúbicas, triangulares, hexagonales, entre otras. En las redes irregulares el patrón es indefinido, tales como las tipo Delaunay. De acuerdo a la naturaleza de los medios porosos, las redes irregulares son las que garantizan una mejor recreación del medio; sin embargo, las redes regulares bajo ciertas reglas de conectividad pueden realizar la misma función.

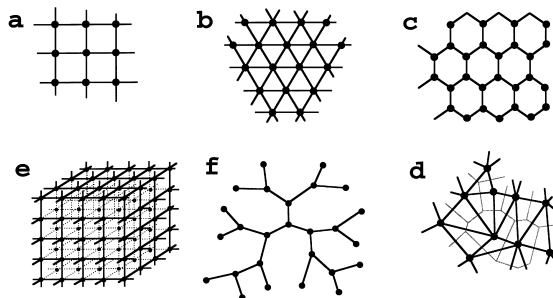


Figura 3.2: Principales redes consideradas en un Modelo de Red de Poros.

La conectividad entre nodos y enlaces está descrita por el número de coordinación z , el cual describe el número de enlaces conectados a un nodo. Para la mayoría de las redes regulares, el número de coordinación es un valor entero; mientras que, para irregulares, es un número fraccionario. Por ejemplo, si el número de coordinación para una red es de $z = 8$, significa que un nodo tendrá 8 enlaces y por ende estará conectado con 8 nodos diferentes (Fig. 3.3). El número de coordinación es la principal propiedad repercusiva de la red sobre el Modelo de Red de Poros, ya que denota los “caminos” formados en el medio (Arns *et al.*, 2004).

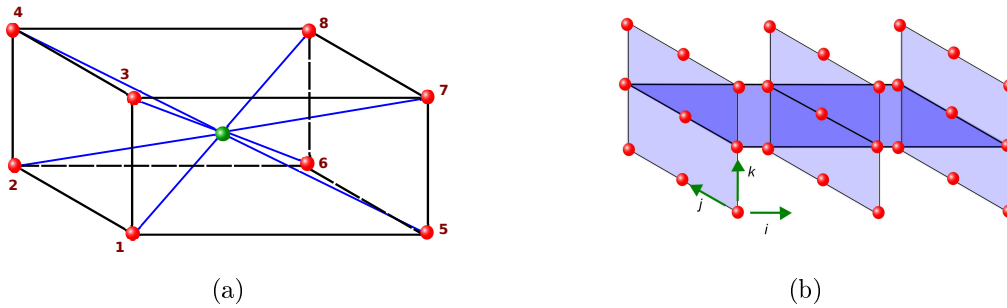


Figura 3.3: (a) Ejemplo de una red con $z = 8$, donde los nodos o sitios son representados por esferas y los conectores por líneas azules. El poro ubicado en el centro de la red (color verde), se conecta con 8 entes distintos. (b) Red con dimensión $N_i = 3$, $N_j = 3$ y $N_k = 3$.

3.2. Geometría

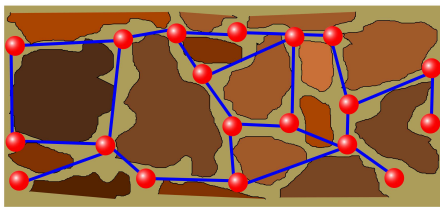


Figura 3.4: Red de un medio poroso. Una red de poros asigna nodos a los “cuerpos de poro” y enlaces a las “gargantas de poro” de una roca.

Una ventaja de los Modelos de Red de Poros es la tomar en cuenta la geometría de los medios porosos en los fenómenos físicos. Para ello, se emplean entes geométricos localizados en la red del Modelo de Red de Poros. En medios porosos, los nodos sustentan elementos geométricos que representan a los cuerpos de poro; mientras que, en los enlaces existen elementos que representan a las gargantas de poro. De esta forma, se discretiza el espacio poroso de un medio, cuya semejanza con la del medio real dependerá de la complejidad geométrica de los poros y gargantas. Estos elementos pueden tener tanto formas regulares como irregulares, siendo las primeras quienes ofrecen una facilidad para describir el comportamiento de los procesos físicos; pero, las formas irregulares permiten ampliar el campo de estudio sobre factores que en escalas mayores son despreciables. Por ejemplo, supongamos que un sistema poro-garganta-poro es representado por esferas y cilindros, y se desea el estudio de desplazamiento de una fase fluida por otra. Para estas condiciones existen leyes físicas que describen

el fenómeno en las geometrías regulares asignadas. Si la representación del sistema poro-garganta-poro pasa a conformarse por elementos irregulares, las leyes físicas del fenómeno deben de sufrir ciertas modificaciones para regir sobre el nuevo dominio. Aunque la redefinición de leyes pueda complicarse, la ventaja que ofrecen los entes irregulares es la de contemplar factores inherentes a la escala de estudio; por ejemplo, la angularidad del medio.

La selección de elementos regulares o irregulares depende del enfoque y alcance de estudio que tendrá el Modelo De Red de Poros. Independientemente del tipo de elementos seleccionados para la representación de los poros y gargantas, debe existir una amplia descripción geométrica de ellos, siendo las principales propiedades aquellas que la naturaleza del fenómeno demande.

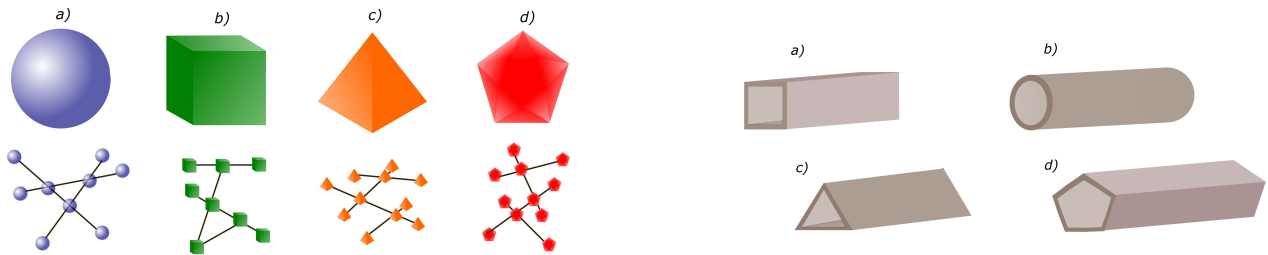


Figura 3.5: Principales geometrías regulares para la representación de poros y gargantas.

Las técnica de imagen es una línea de investigación que ofrece la reconstrucción tridimensional del espacio poroso de una muestra. Esta técnica discretiza a los poros y gargantas con figuras totalmente amorfas; como lo son en la naturaleza. Una vez obtenida la estructura interna de la muestra, existen métodos que permiten ajustar y extraer una red y geometría distintivas de la muestra. Sin embargo, una alternativa para evitar esta operación consiste en un análisis estadístico de las propiedades geométricas y así ajustar distribuciones, la cuales posteriormente pueden generar valores con un comportamiento similar al de la muestra.

Las propiedades geométricas que habitualmente se reportan son:

- **Área:** medida de la superficie del elemento.
- **Perímetro:** longitud del contorno en un corte seccional.
- **Diámetro inscrito:** diámetro de una máxima esfera contenida en el elemento.
- **Vértices:** punto que denota la unión de los lados.
- **Longitud:** mayor dimensión lineal en un corte longitudinal.
- **Ángulos internos:** ángulos formados por la unión de dos o más lados.
- **Volumen:** extensión en el espacio.
- **Intersección:** sección transversal que denota la unión entre el poro y la garganta.

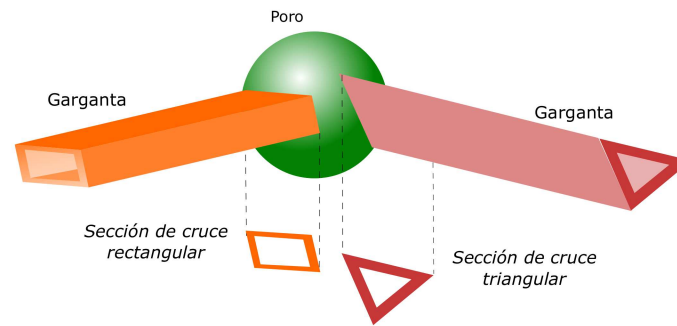


Figura 3.6: Intersección poro-garganta.

La red y geometría de un Modelo de Red de Poros representan la conectividad y estructura interna del medio poroso. Aunque se decida generar estos elementos a partir de reconstrucción de imágenes o recreaciones basadas en distribuciones, la conectividad y estructura son particulares a la muestra bajo estudio. Sin embargo, la muestra, la cual se encuentra a escala de poro, no es representativa de todo el medio. Por tanto, se recomiendan incorporar técnicas estocásticas para producir vertientes de red y geometría, y así generar una gama de modelos referentes a una sola muestra.

3.3. Fases

Las fases que se recreen en el Modelo de Red deben de ser caracterizadas física y químicamente, a través de ecuaciones o correlaciones. El modelo puede considerar tanto fases fluidas como sólidas; por consiguiente, el Modelo de Red de Poros puede simular procesos en una fase y varias fases. Las propiedades que se recomiendan establecer son las siguientes:

- Densidad
- Viscosidad
- Tensión superficial
- Conductividad térmica
- Conductividad eléctrica
- Presión de vapor
- Masa molar
- Entre otras

3.4. Física a escala de poros

Para establecer el comportamiento de las fases a escala de poro, se debe combinar la geometría de poros y gargantas con definiciones, leyes y ecuaciones físicas de las fases; de esta forma, se

describen expresiones apropiadas para el Modelo de Red de Poros. A esto último, se le conoce como física a escala de poro.

3.5. Métodos

Es la parte matemática del Modelo de Red de Poros, en la que a partir de la física a escala de poro y las consideraciones generales del modelo, se establecen expresiones que denotan la naturaleza de los eventos deseados. Los fenómenos de interés para este trabajo son flujo y desplazamiento inmiscible, por lo que se derivan las ecuaciones que constituyen el modelo matemático para cada caso. De la misma manera se denotan las expresiones que permiten obtener las propiedades efectivas de flujo y desplazamiento inmiscible.

3.5.1. Modelo de flujo tipo Stokes

El movimiento de fluidos usuales, como el agua, aire o el aceite, representa un modelo básico y esencial en el estudio de diferentes ciencias. La ecuación que describe la dinámica de un fluido viscoso fue establecida de forma clara y matemáticamente convincente en 1845 por George Gabriel Stokes. Una solución exacta, al modelo de Stokes, es para flujo incompresible dentro de una tubería circular, caso que fue estudiado por G. Hagen en 1939 y J.L. Poiseuille en 1840. La relación de Hagen-Poiseuille describe el flujo laminar de un fluido newtoniano incompresible, a través de una tubería cilíndrica con sección transversal constante, bajo la acción de un gradiente de presión aplicado a los extremos de la tubería.

Hipótesis generales

1. Fluido newtoniano e incompresible con propiedades constantes
2. Flujo laminar con simetría axial
3. Tubería circular uniforme (sección transversal más larga que su diámetro)
4. Flujo estacionario
5. El fluido no presenta aceleración
6. Gradiente de presión constante aplicado en los extremos de la tubería
7. El fluido no reacciona con el medio
8. No hay puntos fuente/sumidero
9. Las paredes de la tubería son rígidas
10. No hay reacción entre la pared y las fases contenidas
11. No hay aporte de finos

Derivación de las ecuaciones

El cálculo de flujo a través del Modelo de Red de Poros considera la relación Hagen-Poiseuille

$$q = -\frac{\pi r^4 \Delta p}{8\mu l} \quad (3.1)$$

Donde r es el radio y l la longitud de un conducto, μ es la viscosidad del fluido y p presión. De esta expresión, se define la conductancia hidráulica κ de un fluido como:

$$\kappa = \frac{\pi r^4}{8\mu l} \quad (3.2)$$

Realizando un balance de masa para cada poro en la red, se tiene

$$\sum_{j=1}^n q_{ij} = 0 \quad (3.3)$$

Donde q_{ij} es el flujo entre los poros i y j .

Sustituyendo la relación Hagen-Poiseuille en el balance de masa

$$\sum_{j=1}^n \kappa_{ij} (p_i - p_j) = 0 \quad (3.4)$$

Donde κ_{ij} es la conductancia hidráulica total de flujo que conecta a los poros i y j . Esta expresión denota el modelo de flujo tipo Stokes para un Modelo de Red de Poros.

La conductancia hidráulica total es calculada como la conductancia hidráulica a través de la mitad del poro i , la garganta conectora y la mitad del poro j . La conductancia hidráulica de cada elemento es calculada empleando la Ec. 3.2. La conductancia hidráulica total para el ensamble poro-garganta-poro se obtiene considerando la teoría de resistores, para resistores en serie.

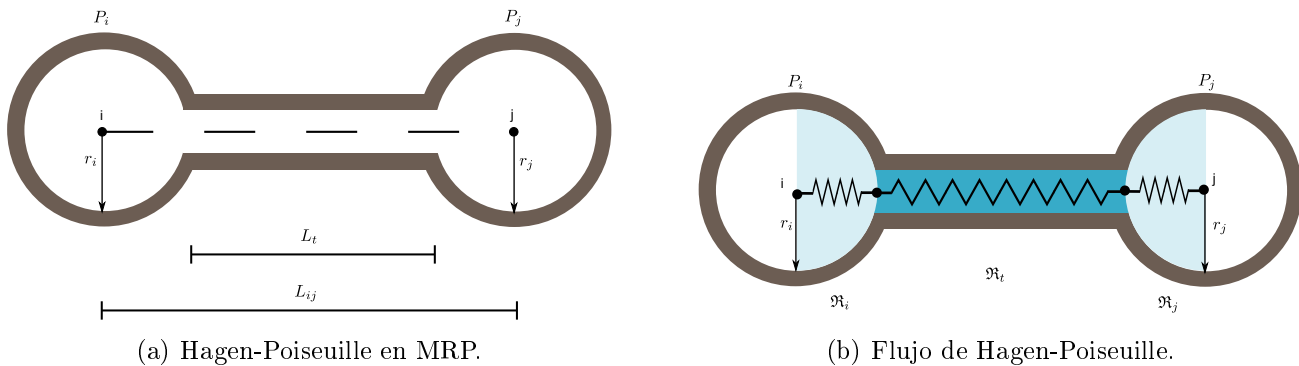


Figura 3.7: Esquema garganta-poro-garganta que sustenta el modelo de flujo tipo Stokes.

$$\mathfrak{R} = \mathfrak{R}_i \frac{1}{2} + \mathfrak{R}_t + \mathfrak{R}_j \frac{1}{2} \quad (3.5)$$

Donde \mathfrak{R} es la resistencia eléctrica.

$$\frac{1}{\kappa_{ij}} = \frac{1}{2\kappa_i} + \frac{1}{\kappa_t} + \frac{1}{2\kappa_j} \quad (3.6)$$

3.5.1.1. Permeabilidad absoluta

Esta propiedad describe la capacidad de un medio poroso para permitir el flujo de una fase fluida a través de él, cuando es saturado completamente por la fase. La permeabilidad absoluta para el Modelo de Red de Poros se obtiene mediante la Ley de Darcy.

$$K = \frac{\mu Q L}{A(p_{in} - p_{out})} \quad (3.7)$$

Donde Q es el gasto total de la fase a través de la red, A es el área de la sección transversal de la red, L en la longitud del modelo en la dirección del flujo, μ la viscosidad del fluido, p_{in} es la presión en la entrada y p_{out} la presión en la salida.

Considerando el modelo de flujo para un Modelo de Red de Poros (Ec. 3.4), obtenemos:

$$K = \frac{\mu \sum \kappa_{ij} (p_i - p_j) L}{A(p_{in} - p_{out})} \quad (3.8)$$

Los subíndices i y j son los poros del Modelo de Red de Poros.

3.5.2. Modelo de desplazamiento inmiscible

Los desplazamiento de un fluido por otro fluido inmiscible en un medio poroso son conocidos en la literatura de ingeniería de yacimientos petroleros como procesos de drene e imbibición. Un gran número de factores afectan a esta clase de fenómenos, tales como: fuerzas capilares y de gravedad, las viscosidades de los fluidos, la tensión interfacial que los separa, las propiedades físicas del medio, así como su conectividad (Sahimi, 2011). La presente investigación se enfoca solamente a pruebas de drene, en el cual un fluido mojante que inicialmente satura al medio es desplazado por un fluido no mojante.

Hipótesis generales

1. Se consideran dos fases inmiscibles: invasora y defensora
2. Inicialmente, la fase defensora ocupa totalmente al medio
3. La fase invasora desplaza a la defensora del medio

4. Las fases no reaccionan entre ellas, ni con el medio
5. La presión de la fase defensora es cero y se mantiene así durante todo el proceso
6. Inicialmente, la presión de la fase invasora es cero
7. No se consideran fuerzas viscosas y de gravedad
8. El medio poroso es una fase sólida
9. No hay reacción del medio con las fases que alberga
10. No hay aporte de finos

Algoritmo

El modelo de desplazamiento considera fundamentos de la teoría de percolación, ya que permite representar el avance de la fase de forma sistemática (Sahimi, 2011), siendo la presión capilar el discriminante para el proceso de invasión. El cálculo de este parámetro depende tanto de la forma geométrica del conducto como de las características de la fase. Para este trabajo, al ser las gargantas del Modelo de Red de Poros representadas por cilindros, se considera la ecuación de Young-Laplace.

$$p_c = \frac{-2\sigma \cos \theta}{r} \quad (3.9)$$

Donde p_c es la presión capilar, σ la tensión interfacial, θ el ángulo de contacto y r el radio de garganta.

Incorporando la ecuación de Young-Laplace en el modelo de desplazamiento inmiscible, genera una secuencia de las gargantas y poros que son ocupados por la fase invasora. Esto representa el avance de la fase a través del medio poroso. El algoritmo de drene primario comienza con el incremento de la presión de la fase invasora en una fuente establecida (entrada) hasta que ésta exceda la presión de entrada. La presión de entrada la define la garganta con el mayor diámetro, perteneciente a la cara de la red definida como entrada. Debido a que el diámetro de un poro es mayor al de una garganta, el elemento que controla el desplazamiento es la garganta. Así que, cuando la presión es suficiente para invadir una garganta, la fase invasora ocupará el poro conectado a la garganta. Si no hay más poros que sean ocupados a esta presión, la presión de la fase invasora se incrementará y nuevos poros serán ocupados por la fase invasora. El proceso de drene continua hasta que las últimas gargantas objetivo (salida) sean ocupadas.

3.5.2.1. Curva de presiones capilares

Teniendo la secuencia de invasión y la presión a la cual se lleva a cabo, se puede realizar el cálculo de las saturaciones para el proceso de drene y con ello obtener un gráfico de presiones capilares. Para el Modelo de Red de Poros, la saturación de la fase invasora se describe como

$$S_{inv} = \frac{\sum \text{Volumen de poros y gargantas invadidos}}{\sum \text{Volumen de todos los elementos de la red}} \quad (3.10)$$

Y la de la fase defensora

$$S_{def} = 1 - S_{inv} \quad (3.11)$$

3.5.3. Permeabilidad relativa

Los métodos de desplazamiento inmiscible y de flujo tipo Stokes permiten estimar un comportamiento de las permeabilidades relativas de dos fases, ya que el primer método obtiene una configuración estática de las fases y del segundo la permeabilidad. La permeabilidad relativa, la cual relaciona la permeabilidad efectiva a una fase y la permeabilidad absoluta, manifiesta la fase dominante en un flujo multifásico.

$$K_r^\alpha = \frac{K_{eff}^\alpha}{K} \quad (3.12)$$

Donde K_{eff}^α es la permeabilidad efectiva a una fase α , la cual es la permeabilidad del medio cuando una fase no lo satura totalmente ($S < 100\%$). Esta propiedad expresa la preferencia del flujo de una fase en presencia de otro ente inmiscible. Para flujo de dos fases se considera la ley de Darcy.

$$K_{eff}^\alpha = \frac{\mu_\alpha Q_\alpha L}{A(p_{in} - p_{out})}, \quad S_\alpha < 100\% \quad (3.13)$$

Al considerar dos fases en el modelo de red de poros se debe de resolver la presión separadamente, y calcular el flujo total referente a cada fase.

3.6. Modelo computacional

La implementación computacional de los Modelos de Red de Poros fue realizada a través de *OpenPNM*[®], en su versión 1.3. Este programa es *software* libre de código abierto y desarrollado bajo el paradigma de orientación a objetos. Se puede consultar más detalles del software en open-pnm.org.

Esta plataforma permitió generar modelos bajo condiciones deseadas y manipular sus propiedades. Además, se desarrollaron parte de los modelos presentados y se modificaron algunos propios del software. En las implementaciones hechas con *OpenPNM*, se siguió la metodología propuesta del siguiente capítulo.

Metodología para la obtención de propiedades efectivas

En esta sección, se presentan los principales procedimientos para la investigación de fenómenos de flujo y desplazamiento inmiscible mediante los Modelos de Red de Poros. Para cada campo de estudio, se explica brevemente su importancia y trascendencia. En la literatura, no se llegó a encontrar una línea de trabajo para la aplicación estos modelos; no obstante, se reconocieron prácticas recurrentes en varios trabajos revisados. Tras esta revisión, se seleccionaron los procedimientos fundamentales, junto con prácticas que mejoran la aplicación de los Modelos de Red de Poros. Siguiendo el flujo de trabajo propuesto, se emplea un Modelo de Red de poros elemental para simular procesos de flujo de una fase y desplazamiento inmiscible. El objetivo es ilustrar la metodología propuesta y verificar que conforma una base suficiente para este enfoque de estudio. Cabe mencionar que cada componente del flujo de trabajo puede dividirse en más disciplinas, permitiendo así un mejor alcance de estudio. Sin embargo, se debe procurar una misma proporcionalidad de desarrollo en cada uno de los elementos del Modelo de Red de Poros; el avance debe ser integral.

4.1. Flujo de trabajo

Los procedimientos propuestos demandan trabajo multidisciplinario, esto garantiza la eficiencia de los fenómenos bajo estudio. El siguiente flujo de trabajo permite conocer la manera en la cual un Modelo de Red de Poros estima ciertas propiedades físicas, así como los factores que explícita e implícitamente intervienen en los resultados. El seguimiento y la buena práctica de esta línea de trabajo garantizan una reducción en la incertidumbre sobre los Modelos de Red de Poros.

El flujo de trabajo recomendable, para el enfoque de Modelos de Red Poros, consiste en los siguientes puntos:

Estudio de la estructura del medio. Implica analizar el espacio poroso a altas resoluciones de detalle, siendo lo ideal obtener una reconstrucción tridimensional de la estructura. Esto es una herramienta para adquirir información, discernir entre las propiedades medio-fases que tienen impacto en los fenómenos y conocer la morfología del medio. En la actualidad, las técnicas de imagen permiten analizar los medios porosos en una variedad de escalas, siendo las más empleadas: microtomografía computarizada, sincrotrón de rayos X, haz de iones focalizados (*Focused Ion Beams*), microscopio electrónico de barrido y combinaciones de estas. También, es recomendable emplear reconstrucciones estocásticas a partir de la información de imágenes, ya que permite rangos espaciales mayores que cualquier otra tecnología de imagen directa por sí sola.

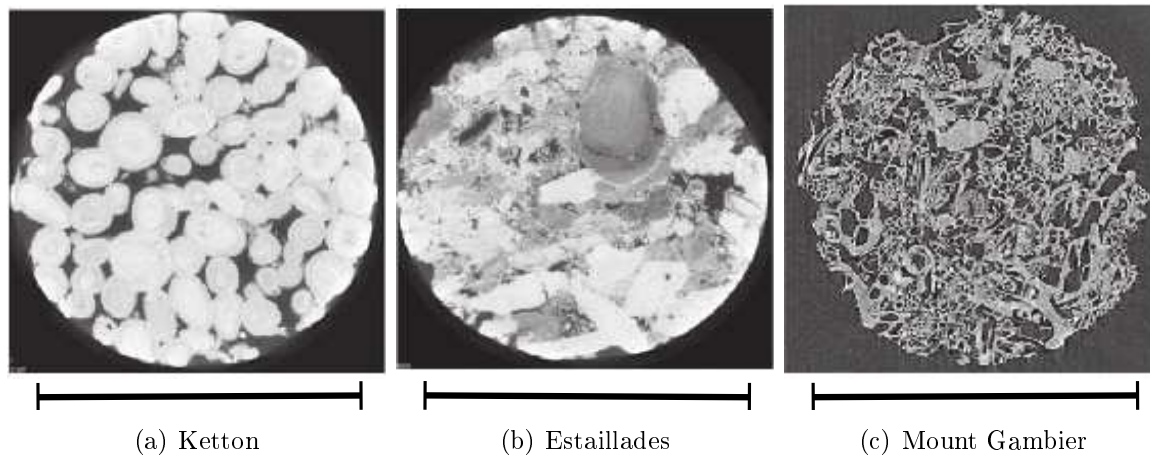


Figura 4.1: Imágenes micro-CT de tres muestras diferentes de carbonatos en escala de grises; la escala denota $5 \mu\text{m}$. Tomado de (Blunt *et al.*, 2013).

Estadística del medio poroso. En este campo se establecen descripciones y resúmenes del comportamiento geométrico de los principales elementos que conforman el medio. Posteriormente, se ajustan distribuciones que recreen la tendencia de las propiedades seleccionadas, esto con el fin de que sean generadas posteriormente para medios análogos al original. De la misma manera, se deben analizar los principales parámetros de conectividad del medio poroso, siendo el número de coordinación el más importante, ya que es determinante para la generación de la red del modelo. Los valores de estas propiedades pueden ser determinadas a partir de las técnicas de imagen o pruebas experimentales como porosimetría, siendo esta última la que ofrece una mayor gama de propiedades para estudio, tales como: diámetros de poro y garganta, longitud de garganta, área superficial de poros y gargantas, entre otras.

Mount Gambier: roca del Oligoceno proveniente del sur de Australia

Ketton: roca oolítica del Jurásico

Estailades: roca carbonato

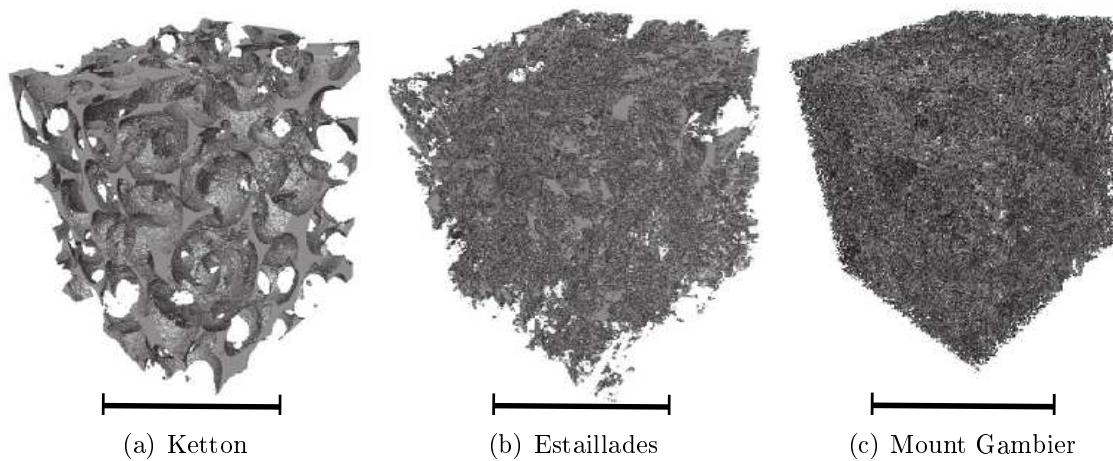


Figura 4.2: Representación tridimensional del espacio poroso de las muestras de carbonatos; la escala denota $2 \mu\text{m}$. Tomado de Blunt *et al.* (2013).

Reproducción de los datos. Tras medir la variabilidad de los datos, se obtiene un comportamiento particular de la estructura del medio. No obstante, esto no representa un comportamiento general en la familia de la muestra. Esto se puede resolver con técnicas estocásticas, las cuales permiten generar variantes de los datos que ya se conocen, bajo reglas de probabilidad establecidas.

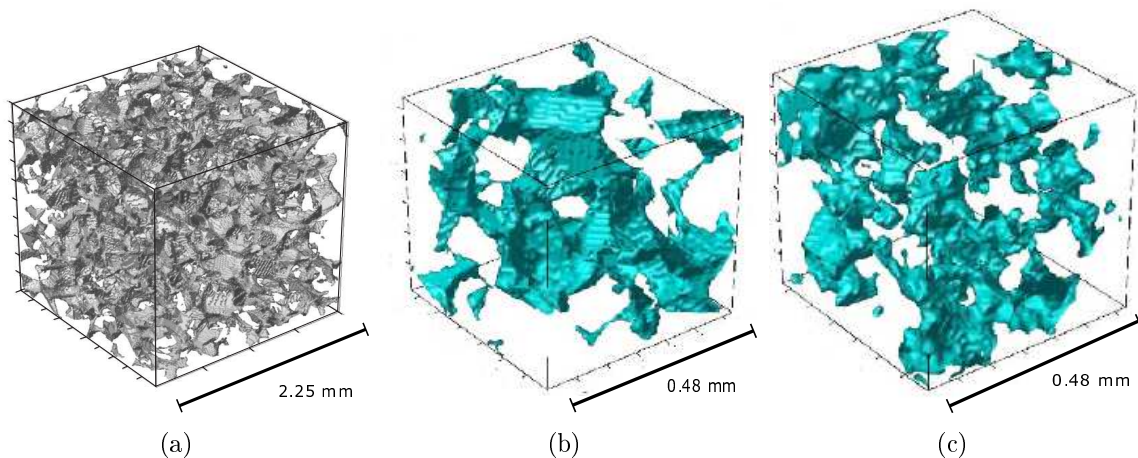


Figura 4.3: a) Representación tridimensional de una arenisca Fontainebleau en escala de grises, generada por micro-CT. c) Subsección de la muestra con una porosidad de 0.1379 b) Reconstrucción estocástica con una porosidad de 0.1380. Tomado de Okabe y Blunt (2004).

Modelo de Red de Poros. Comprender la información del medio a representar proporciona un marco óptimo para generar el modelo con la conectividad y características geométricas lo más cercanas posibles al medio real. Esta selección repercutirá directamente en la física a escala de poro

y por ende en los procesos que sean modelados. El Modelo de Red de Poros puede ser obtenido directamente de una reconstrucción tridimensional de la muestra, ajustando geometrías regulares para los poros y gargantas o incluso emplear las formas irregulares originales. Aunque esta opción es la más deseable, no siempre se puede contar con la información necesaria; en estas situaciones son cuando las distribuciones tienen un papel fundamental en el modelo.

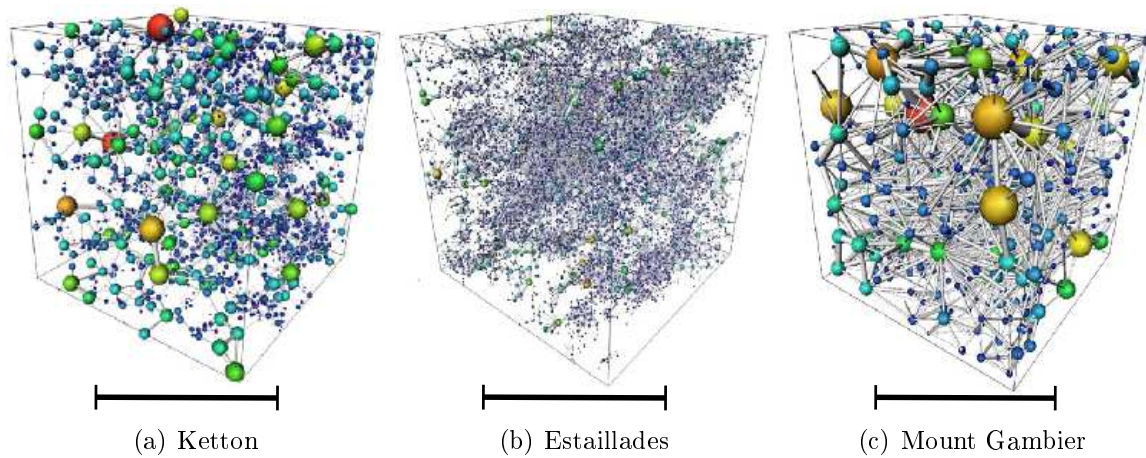


Figura 4.4: El espacio poroso de las muestras se representa como un Modelo de Red de Poros de esferas y cilindros; la escala denota $2 \mu\text{m}$. Tomado de Blunt *et al.* (2013).

Estimación de propiedades. Se deben de establecer métodos que describan los fenómenos deseados, lo que involucra definir leyes constitutivas acordes a la escala de estudio y que involucren la morfología del medio. De la misma manera, el interés que se tenga sobre la influencia de una o varias propiedades (tanto del medio como de las fases) sobre el proceso en general, será un factor en la complejidad que tengan los métodos generados. Los resultados obtenidos deben compararse contra valores publicados o con pruebas de laboratorio, esto con el fin de verificar, ajustar y garantizar que la implementación del Modelo de Red de Poros sea representativa de la naturaleza de los fenómenos.

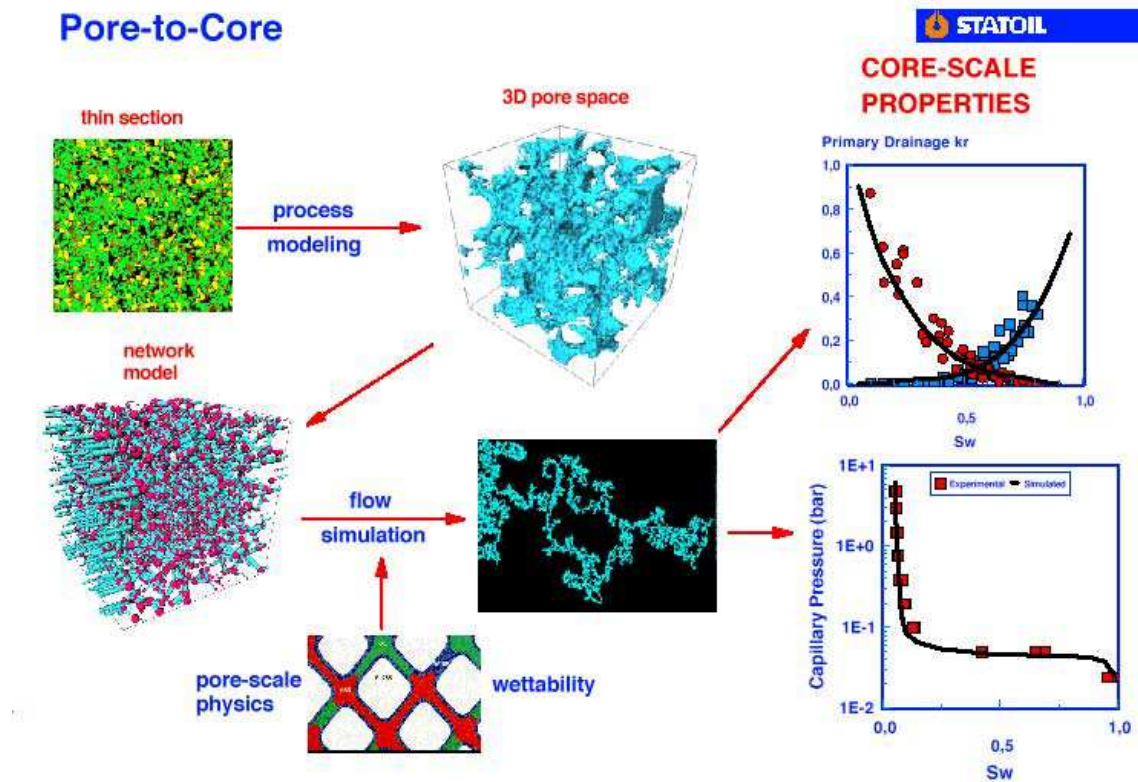


Figura 4.5: Flujo de trabajo para los Modelos de Red de Poros. Tomado de Blunt (2001).

4.2. Ejemplo de aplicación

Siguiendo la metodología propuesta, se realizan procesos de flujo y desplazamiento inmisible, para así obtener valores de permeabilidad absoluta y curva de presiones capilares. El Modelo de Red de Poros posee una red regular, cuya dimensión propuesta es con fines ilustrativos. La información de la estructura de poros proviene de fotomicrografía y porosimetría realizada por Ioannidis y Chatzis (1993), quienes emplearon esta información para simular drene primario en un Modelo de Red de Poros.

Red

Por cuestiones prácticas, se considera una red cúbica regular de dimensión $N_i = 3$, $N_j = 3$ y $N_k = 3$. El espaciado en las tres direcciones cartesianas es de $92.3 \mu m$ (escala de poro). Cada nodo de la red se conectará con seis entes diferentes; aunque, por el valor de la dimensión, solamente el nodo interno logrará completar el número de conexiones.

Tabla 4.1: Características de la red

Propiedad	Valor
Total de poros	27
Total de gargantas	54
Número de coordinación	6
Espaciado	$92.3 \mu m$

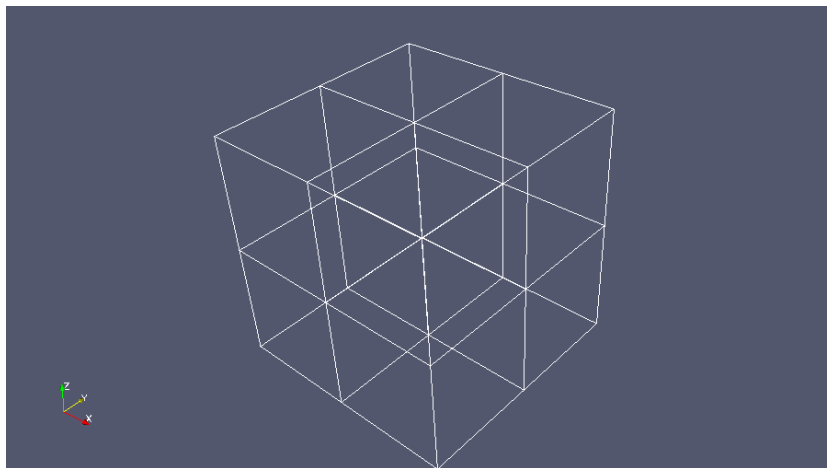
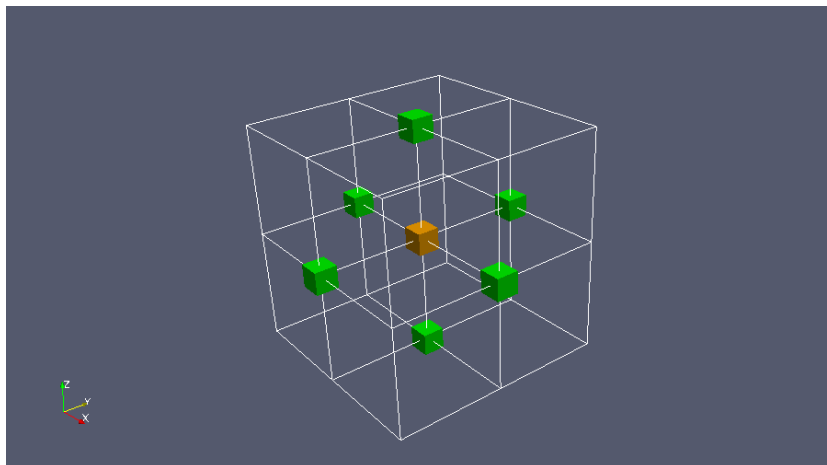
Figura 4.6: Red de dimensión $3 \times 3 \times 3$.

Figura 4.7: Nodo con número de coordinación seis en color naranja.

Geometría

El análisis estadístico de Ioannidis y Chatzis (1993), para una muestra arenisca, obtuvo que la función de probabilidad tipo Weibull recrea el comportamiento de los tamaños de poros y gargantas. Por lo cual, el Modelo de Red de Poros considera esta distribución, para que así, los diámetros del modelo se encuentren en el orden de los de la muestra real. Las gargantas de poros del modelo son cilindros regulares con secciones transversales circulares, definido por un radio proveniente de una distribución de tamaños. De la misma manera, los poros son representados por esferas y su radio es generado por una distribución.

$$f(r) = \frac{\beta}{\eta} \left(\frac{r - \gamma}{\eta} \right)^{\beta-1} e^{-\left(\frac{r-\gamma}{\eta}\right)^\beta} \quad (4.1)$$

Donde r es radio, β el parámetro de forma, λ el parámetro de escala y θ el parámetro de localización.

Tabla 4.2: Distribución Weibull para el diámetro de poros y gargantas

Parámetro	Poros	Garganta
Forma	1.18	0.536
Escala	3.856 μm	0.78 μm
Localización	21.1 μm	0.20 μm

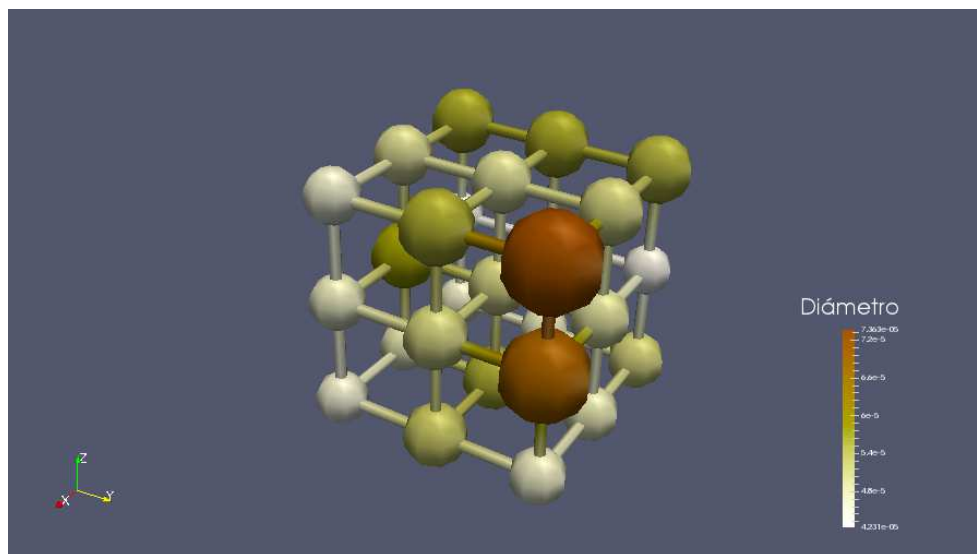


Figura 4.8: Geometría regular para el Modelo de Red de Poros. Los poros y gargantas son representados por esferas y cilindros.

Para este ejemplo, los diámetros de poro y garganta son los parámetros más importantes; son las propiedades que permiten la representación del espacio poroso. La generación de estos valores debe tener una precisión y exactitud similares a las del medio real bajo estudio.

Fases

Se consideran dos fases fluidas en el Modelo de Red de Poros. Para el proceso de flujo se toma en cuenta la fase agua; mientras que, para desplazamiento inmisible (drene) se consideran agua y aire. En la simulación de desplazamiento, la fase aire es la fase defensora y la fase agua la invasora.

Tabla 4.3: Descripción de las fases fluidas

Propiedad	Agua	Aire	Unidad
Viscosidad	8.93x10 ⁻⁴	1.8444x10 ⁻⁵	kg/m.s
Tensión superficial		0.0719	N/m
Ángulo de contacto		100	°
Presión crítica	22064000	3786000	Pa
Temperatura crítica	647.1	132.5	K
Densidad	996.9522	1.1843	kg/m ³
Peso molecular	0.01802	0.02896	kg/mol
Temperatura	298	298	K

Física y Algoritmos

El flujo es determinado por la conductancia hidráulica (Ec. 3.2) de la red y el modelo de flujo tipo Stokes (Ec. 3.4). De este algoritmo se calcula la permeabilidad absoluta del Modelo de Red de Poros. Las presiones capilares, para el proceso de drene, son determinadas por la ecuación de Young-Laplace (Ec. 3.9).

Tabla 4.4: Relación entre la física a escala de poro y los algoritmos

Propiedad	Ecuación física	Algoritmo
Viscosidad	Conductancia hidráulica	Flujo tipo Stokes
Tensión superficial		
Ángulo de contacto	Presión capilar	Drene

4.3. Permeabilidad

El flujo de la fase agua es en dirección de la frontera entrada a salida, esto sobre el eje y del modelo. La frontera entrada tiene un valor de $0.6 [Pa]$ y el conjunto salida $0.4 [Pa]$.

Tabla 4.5: Resultados de la simulación flujo tipo Stokes

Propiedad	Valor	Unidad
Longitud	18.46×10^{-5}	m
Área	6.22×10^{-8}	m^2
Gasto	1.62×10^{-16}	m^3/s
Permeabilidad absoluta	2.15×10^{-15}	m^2
	2.18	mD

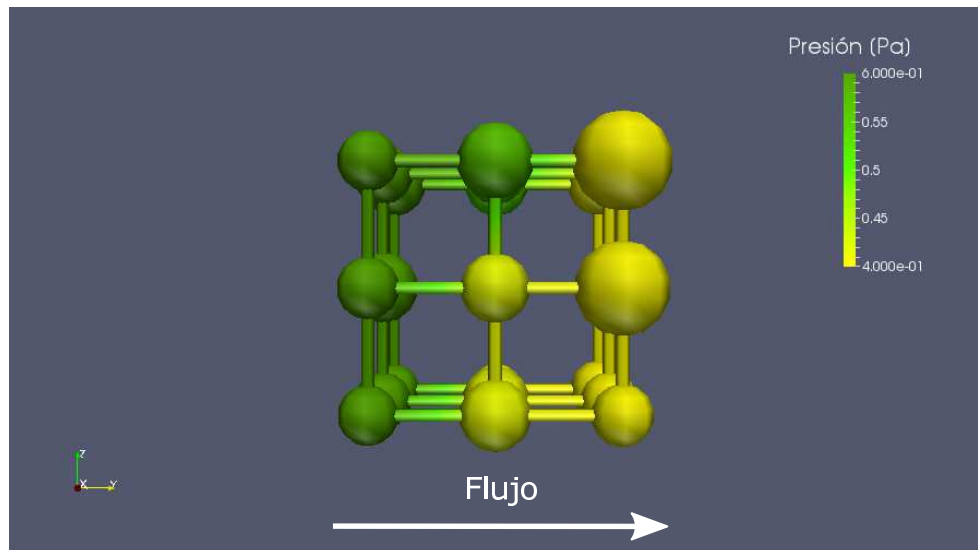


Figura 4.9: Presión en la red después de terminar la simulación de flujo tipo Stokes.

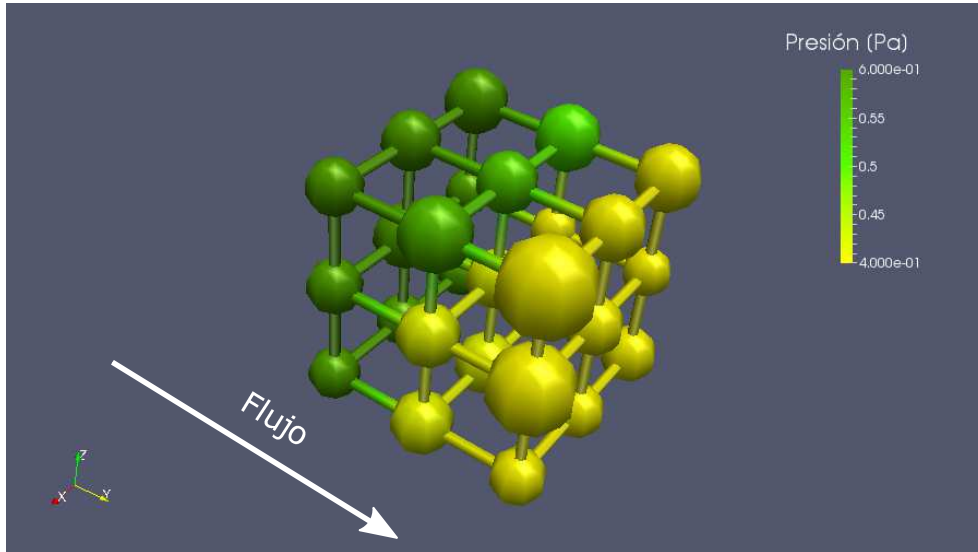


Figura 4.10: Presión en la red después de terminar la simulación de flujo tipo Stokes.

4.4. Presión capilar

El desplazamiento consideró como fase defensora al aire, mientras que al agua como la fase invasora. La dirección del desplazamiento fue en el eje y del modelo, a través del plano $x-z$.

Tabla 4.6: Resultados de la simulación de desplazamiento.

Secuencia de invasión	12 <i>tiempos</i>
Saturación de aire irreductible	14.11 %
Secuencia de invasión en la ruptura	4 <i>tiempos</i>
Poros invadidos	41
Gargantas invadidas	37
Saturación de la fase invasora en la ruptura	30.30 %
Saturación de la fase defensora en la ruptura	69.70 %

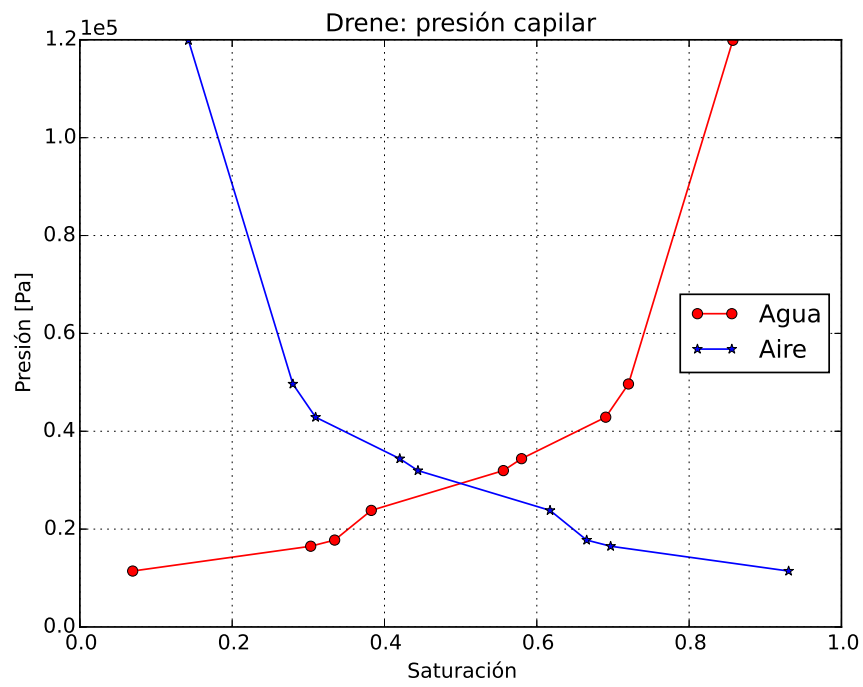


Figura 4.11: Curva de presión capilar.

Caso de estudio 1

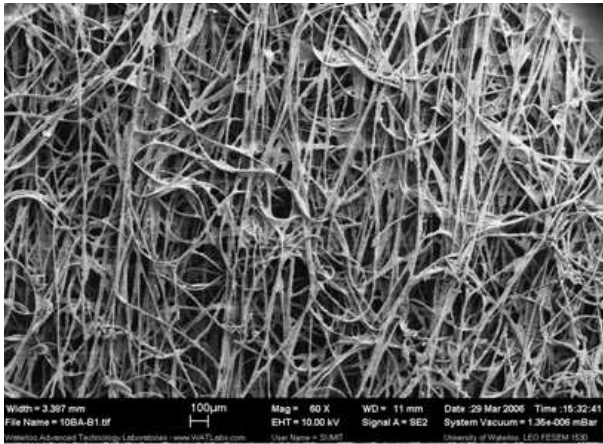
El caso de estudio 1 tiene como objetivo validar el flujo de trabajo propuesto, mediante la recreación de una publicación que emplea un Modelo de Red de Poros, para capas de difusión gaseosa (*GDL* por sus siglas en inglés) en una celda de combustible de membrana electrolítica de polímero (*PEM*). Aunque el medio bajo estudio no es un medio poroso natural (roca), los métodos presentados son capaces de representar fenómenos de flujo y transporte en ambos campos.

5.1. Descripción del caso de estudio

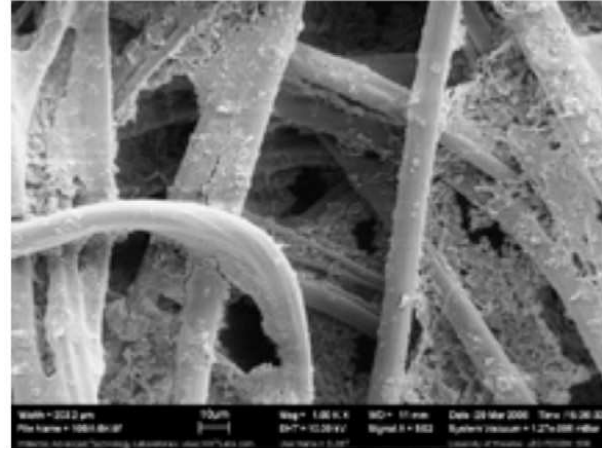
El modelo representa papel carbón SGL Sigracet[®] 10BA, el cual presenta una estructura tridimensional de fibras entrelazadas. Para tomar en cuenta estos aspectos geométricos únicos, el modelo se idealiza por poros y gargantas cúbicas que son calibradas por mediciones experimentales de porosimetría y permeabilidad.

5.2. Análisis exploratorio de los datos

Gostick *et al.* (2006) determinaron las distribuciones de los tamaños de poros y gargantas para este medio a partir de porosimetría de intrusión de mercurio (*MIP* por sus siglas en inglés). A los histogramas experimentales de radio le ajustaron una distribución Weibull, ya que esta función es altamente versátil y matemáticamente simple. En principio, se emplea los mismos parámetros de la función Weibull (forma=3.07, escala=16 μm y localización=19.97 μm) para los tamaños de poros y gargantas. Sin embargo, para denotar la anisotropía característica del medio, se establecen reducciones a los diámetros de gargantas en direcciones específicas. En general, se reducen las gargantas con dirección *y* y *z* en un 5-10 %, respecto a su tamaño original. Después de generar y modificar los diámetros, se realizaron histogramas de estos datos para así compararlos con la función de distribución original, esto con el fin de observar la exactitud entre los datos.



(a) 100x



(b) 1000x

Figura 5.1: Microfotografías en Microscopio Electrónico de Barrido (*SEM* por sus siglas en inglés) del medio SGL Sigracet® 10BA.

La siguiente tabla presenta la estadística descriptiva de los tamaños de poros y gargantas, mientras que, la Fig. 5.2 y Fig. 5.2 muestran el comportamiento de los mismos.

Tabla 5.1: Descripción estadística de los diámetros de poros y gargantas

Estadígrafo	Poros	Gargantas
N	6760	19084
Mínimo	19.64	19.64
Primer cuartil	29.16	27.08
Mediana	32.31	29.79
Media	32.07	29.7
Tercer cuartil	35.34	32.32
Máximo	39.49	39.37
Rango	19.85	19.73
Rango intercuartil	6.18	5.24
Varianza	17.26	13.29
Desviación estándar	4.15	3.64
Asimetría	-0.28	-0.04
Curtosis	-0.60	-0.49

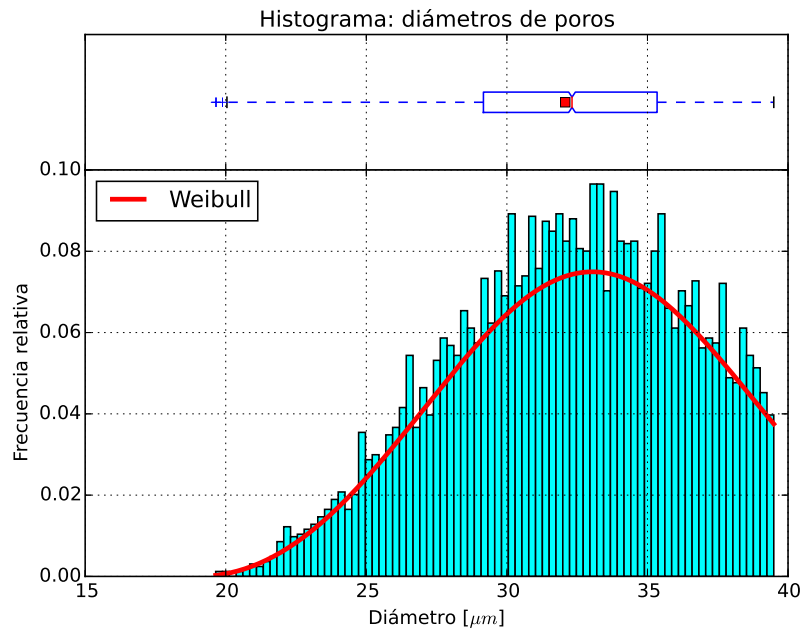


Figura 5.2: Histogramas de los diámetros de poros

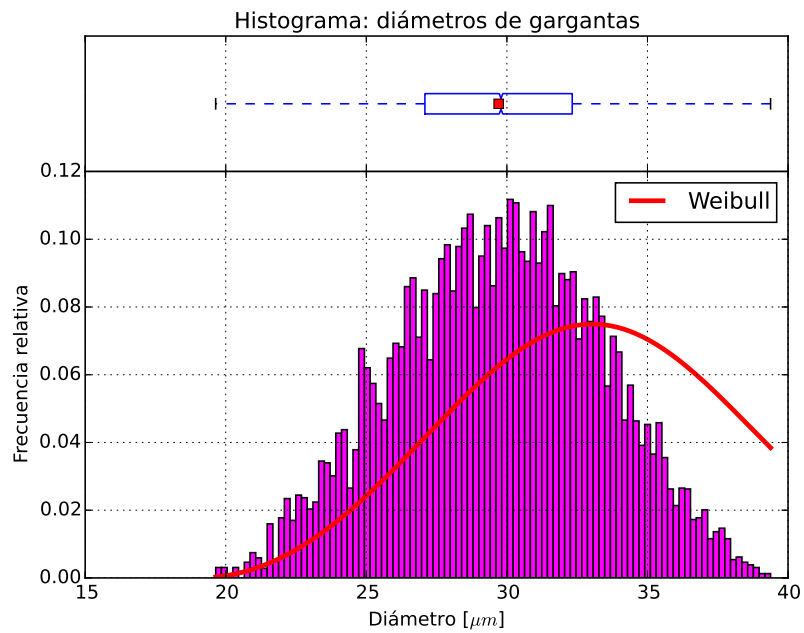


Figura 5.3: Histograma de los diámetros de gargantas. El comportamiento de los datos muestra de la reducción de su tamaño original.

5.3. Modelo de Red de Poro

La red es cúbica regular con número de coordinación igual a 6. Los poros se representan como cubos; mientras que, las gargantas por cilindros rectangulares. La sección transversal en la unión poro-garganta es rectangular. El uso de poros cuadrados es conveniente para lograr suficientemente altas porosidades y describir cualitativamente la presencia de vértices y fisuras del medio. El Modelo de Red de Poros contempla la anisotropía del medio SGL Sigracet® 10BA, a través de la manipulación y modificación de los diámetros de gargantas. El general, se logró imitar las condiciones geométricas y de conectividad del trabajo de Gostick *et al.* (2007). La Tabla 5.2 presenta las principales características del modelo.

Tabla 5.2: Descripción del Modelo de Red de Poros

	Gostick <i>et al.</i> (2007)	Recreación
Red	Red cúbica	
	Dimensión	26×26×10
	Espaciado	40.6 μm
Geometría	Poros: Prismas rectangulares	Poros: Prismas rectangulares
	Gargantas: Prismas rectangulares	Gargantas: Prismas rectangulares
	Distribución de radios de poros: Weibull	
	Parámetro	Valor (cte)
	Forma	3.07
	Escala	16
	Localización	1.97
	Distribución de radios de gargantas: Weibull	
	Parámetro	Valor (cte)
	Forma	3.07
Escala	16	
Localización	1.97	
Fases	Fase mojante	aire
	Fase defensora	aire
	Fase no mojante	agua
	Fase invasora	agua
Física	Presión capilar: Young-Laplace	
	Propiedad	Valor
	σ^w	0.0719 [N/m]
	θ^w	100°
	r_t	variable conocida
Conductividad hidráulica		
	Para cubos y cilindros rectangulares	Para esferas y cilindros

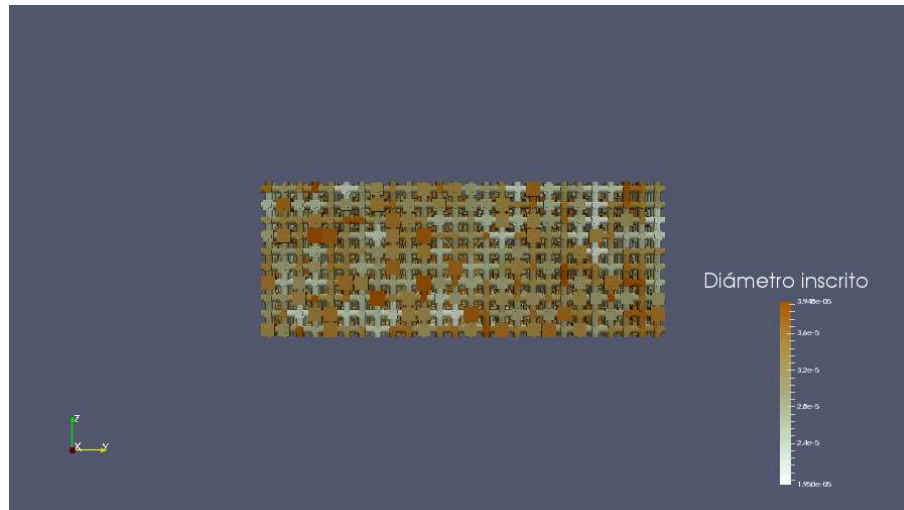


Figura 5.4: Geometría del Modelo de Red de Poros

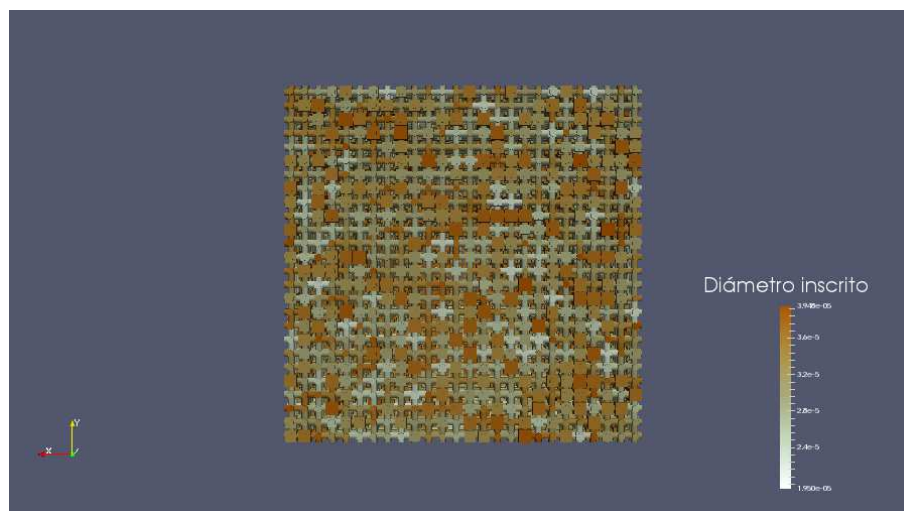


Figura 5.5: Geometría del Modelo de Red de Poros

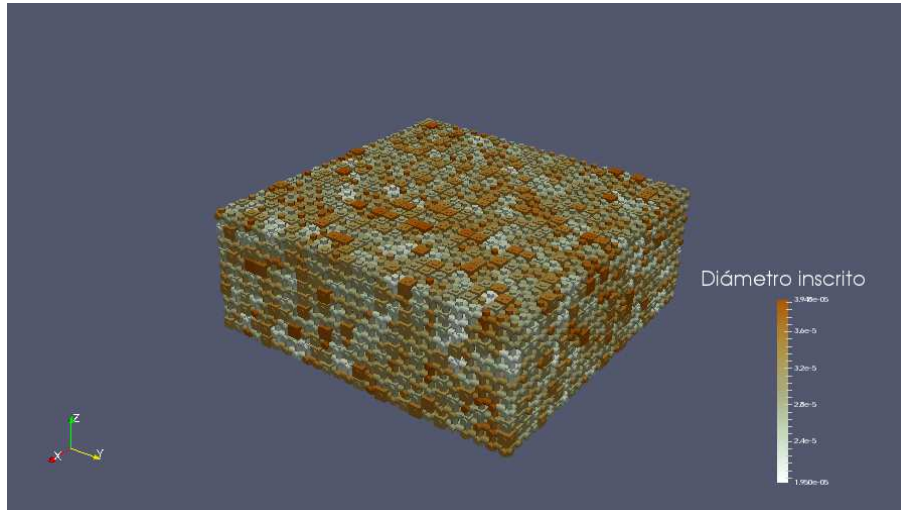


Figura 5.6: Geometría del Modelo de Red de Poros

5.4. Permeabilidad

La ventaja de tener establecida la estructura del medio, es que se pueden realizar diferentes simulaciones del fenómeno, con la simple modificación de la dirección del flujo. El Modelo de Red de Red de Poros sustenta tres procesos de flujo tipo Stokes, correspondientes a las direcciones en x - y - z , en la que la fase agua es la que circula por la red. En cada dirección, las condiciones de presión para la entrada y salida, de acuerdo al modelo de flujo, son de 0.6 y 0.2 [Pa] respectivamente. Los resultados se presentan en la Tabla 5.3, en la que se incluyen los valores que obtuvieron Gostick *et al.* (2007) con su modelo y los provenientes de pruebas experimentales, que realizaron previamente (Gostick *et al.*, 2006)

Tabla 5.3: Resultados de la simulación flujo tipo Stokes

Dirección	Propiedad	Experimento	Gostick <i>et al.</i> (2007)	Recreación
X	Longitud	-	-	
	Longitud	-	-	$1.01 \times 10^{-3} [m]$
	Área	-	-	$4.26 \times 10^{-7} [m^2]$
	Gasto	-	-	$1.13 \times 10^{-11} [m^3/s]$
	K_x	57	54	60
Y	Longitud	-	-	
	Longitud	-	-	$1.01 \times 10^{-4} [m]$
	Área	-	-	$4.26 \times 10^{-7} [m^2]$
	Gasto	-	-	$9.44 \times 10^{-11} [m^3/s]$
	K_y	45	48	50
Z	Longitud	-	-	
	Longitud	-	-	$3.64 \times 10^{-4} [m]$
	Área	-	-	$1.10 \times 10^{-6} [m^2]$
	Gasto	-	-	$4.60 \times 10^{-11} [m^3/s]$
	K_z	37	39	34

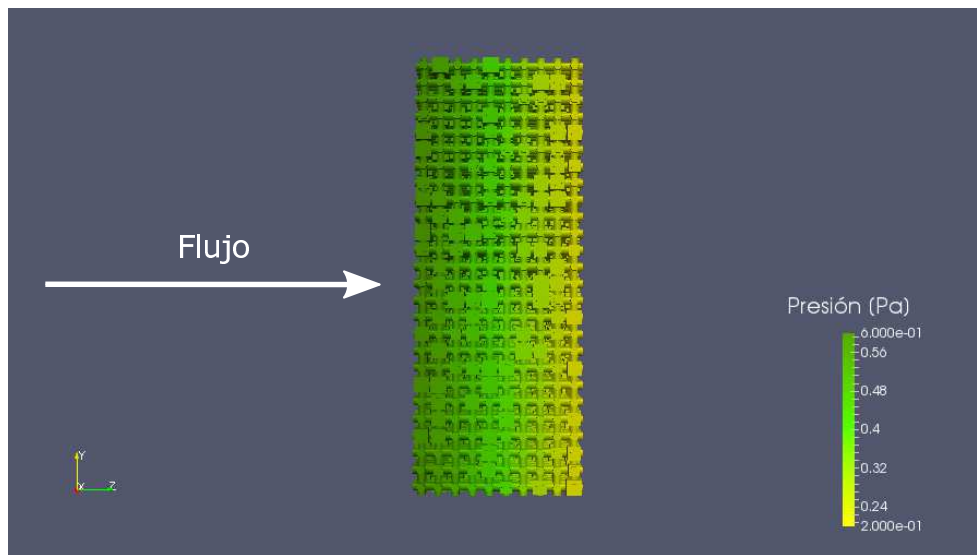


Figura 5.7: Esquema de las presiones en el Modelo de Red de Poros

5.5. Permeabilidades relativas

Los cálculos de permeabilidad relativa consideran que la ocupación del fluido está dictada exclusivamente por fuerzas capilares. Para examinar el efecto de la anisotropía de las capas de difusión de gas, la permeabilidad absoluta se calculó en los ejes x , y y z a través de la red. La invasión del fluido fue siempre en la dirección perpendicular de estos planos.

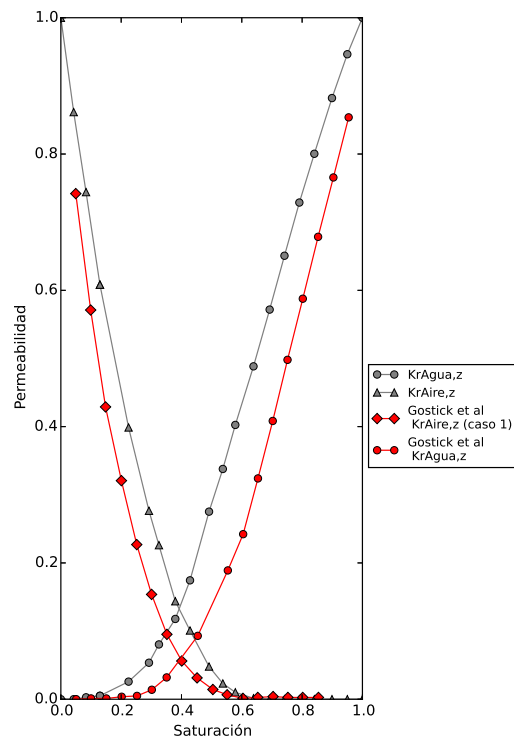
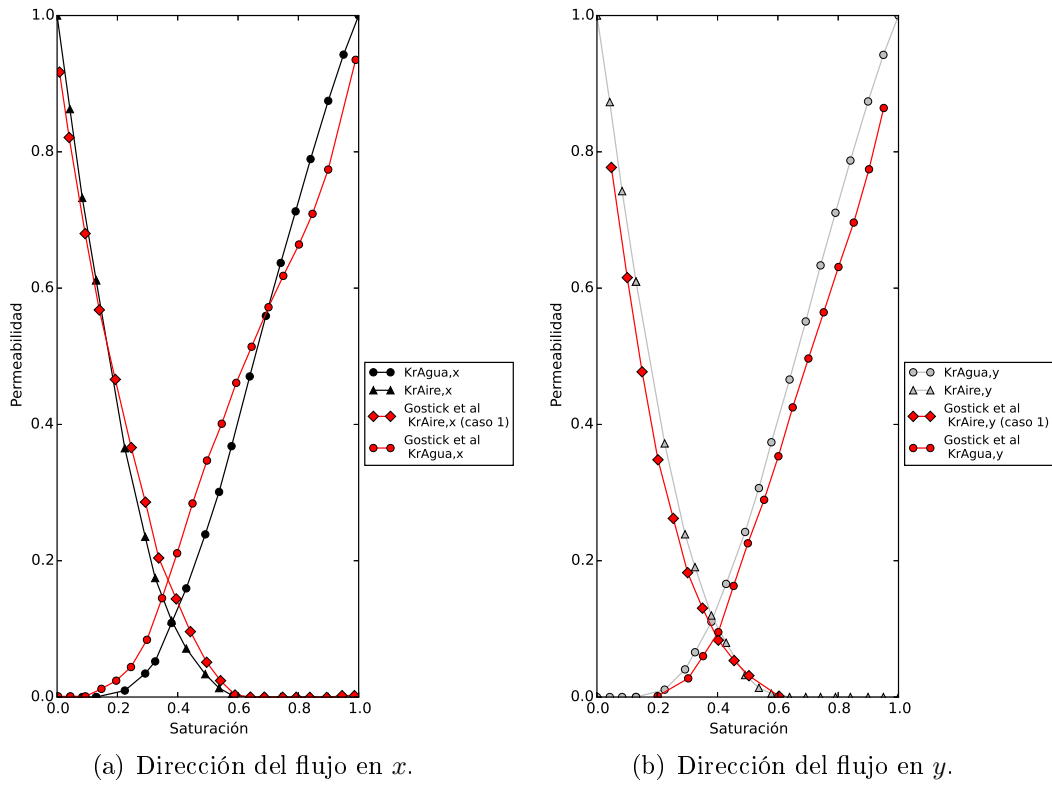


Figura 5.8: Curva de permeabilidades relativas.

Los resultados muestran que no existe conductividad del gas por encima de una saturación de agua crítica de 70 %; una cantidad significativa de gas todavía existe en la red a esta saturación, pero está completamente rodeada o atrapada por la fase invasora y se desconecta hidráulicamente desde la cara de entrada o de salida.

5.6. **Discusión de resultados**

El modelo propuesto considera las mismas características geométricas que las de Gostick *et al.* (2007): la distribución de diámetros y la geometría para poros y gargantas. Estas condiciones permiten que las curvas de permeabilidades relativas presenten un comportamiento similar a las del trabajo original (Gostick *et al.*, 2007). No obstante, Gostick *et al.* (2007) emplean una ecuación de presión capilar que contempla la geometría rectangular de las gargantas; mientras que, el modelo propuesto trabaja con una ecuación para conductos circulares. Las curvas mantienen un comportamiento similar debido a que los volúmenes de los poros y gargantas se calculan tomando en cuenta geometrías cúbicas y rectangulares. El Caso 1 permitió observar la relación entre la geometría y los métodos de un Modelo de Red de Poros; es decir, la importancia entre la física a escala de poro y la geometría de los poros y gargantas.

Caso de estudio 2

Las pruebas de desplazamiento de un fluido por otro, a través de un medio poroso, son procesos que permiten observar principalmente los efectos de las fuerzas capilares y viscosas sobre el comportamiento de los fluidos involucrados. Estas pruebas, por lo general, se realizan en laboratorio y a condiciones controladas, siendo el principal objetivo obtener expresiones matemáticas que describan propiedades efectivas del fenómeno. Sin embargo, las pruebas de laboratorio no garantizan que los valores obtenidos sean totalmente representativos; errores de ejecución y medición siempre están presentes. A pesar de esto, las pruebas de laboratorio permiten verificar el rango de la exactitud que tienen los Modelos de Red de Poros en la recreación de los fenómenos físicos. En el Capítulo 5 se presentó un caso de estudio enfocado en las curvas de permeabilidades relativas y su comparación con las de un Modelo de Red de Poros, que aunque la exactitud y precisión entre los valores fue relativamente aceptable, faltó contrastar con resultados experimentales. Por lo tanto, la inclusión del siguiente caso de estudio tiene como fin estimar una curva de presiones capilares y compararla con una prueba experimental registrada en la literatura de los Modelos de Red de Poros.

6.1. Descripción del caso de estudio

Ioannidis y Chatzis (1993) propusieron una metodología para la predicción simultánea de la permeabilidad absoluta, los factores de formación de resistividad y las curvas de presión capilar debido a drenaje en areniscas mediante el empleo de un Modelo de Red de Poros. El trabajo evalúa una metodología para la estimación de las distribuciones de tamaño de poros y gargantas de una gran clase de muestras de rocas, para su uso en la simulación de propiedades de transporte y desplazamiento inmiscible. El modelo propuesto captura las características cualitativas más importantes de la estructura del medio y del proceso de desplazamiento inmiscible a través del tipo de arenisca empleada.

6.2. Análisis exploratorio de los datos

En su trabajo, Ioannidis y Chatzis (1993) consideran una relación de aspecto λ para las gargantas y los poros de la red, la cual es la proporción entre el ancho y la altura de los elementos. Estas características son descartadas de la recreación. No obstante, se consideran las mismas distribuciones para los diámetros de poros y gargantas; funciones tipo Weibull. Los autores realizaron la descripción de los tamaños de poros y gargantas, a partir de análisis de estereología para microfotografías y pruebas experimentales de presión capilar, de una arenisca denominada *Clear Creek*. Los parámetros obtenidos se presentan en la siguiente tabla.

Tabla 6.1: Parámetros de distribuciones Weibull

Parámetro	Poros	Gargantas
Forma	1.18	0.536
Escala	3.856 μm	0.78 μm
Localización	21.1	0.20
Mínimo	21.1 μm	0.20 μm
Máximo	42.3 μm	26.3 μm

Tabla 6.2: Principales datos experimentales de una muestra arenisca *Clear Creek*. (P_c^0 : presión capilar de entrada, a la que la fase no mojante empieza a invadir el medio.)

	P_c^0 [psi]	Poros. [%]	Perm. [mD]	Resist.	Rporo mín [μm]	Rporo máx [μm]
<i>Clear Creek</i>	16.6	19.1	95	13.2	21.1	42.3

Después de la generación de los diámetros de poros y gargantas del modelo de recreación, se realizó una breve descripción estadística de los valores obtenidos. Esto permite verificar la naturaleza de los datos y su relación con los de Ioannidis y Chatzis (1993). Así mismo, se graficaron las distribuciones de frecuencia de los datos generados (Fig 6.1 y Fig 6.2).

Tabla 6.3: Descripción estadística de los diámetros de poros y gargantas

Estadígrafo	Poros	Gargantas
N	1000	2700
Mínimo	42.21	0.40
Primer cuartil	45.13	0.55
Mediana	48.11	1.16
Media	49.78	2.92
Tercer cuartil	52.81	3.09
Máximo	81.90	48.05
Rango	39.69	47.65
Rango intercuartil	7.68	2.53
Varianza	38.89	21.61
Desviación estándar	6.23	4.64
Asimetría	1.38	3.99
Curtosis	2.33	21.87

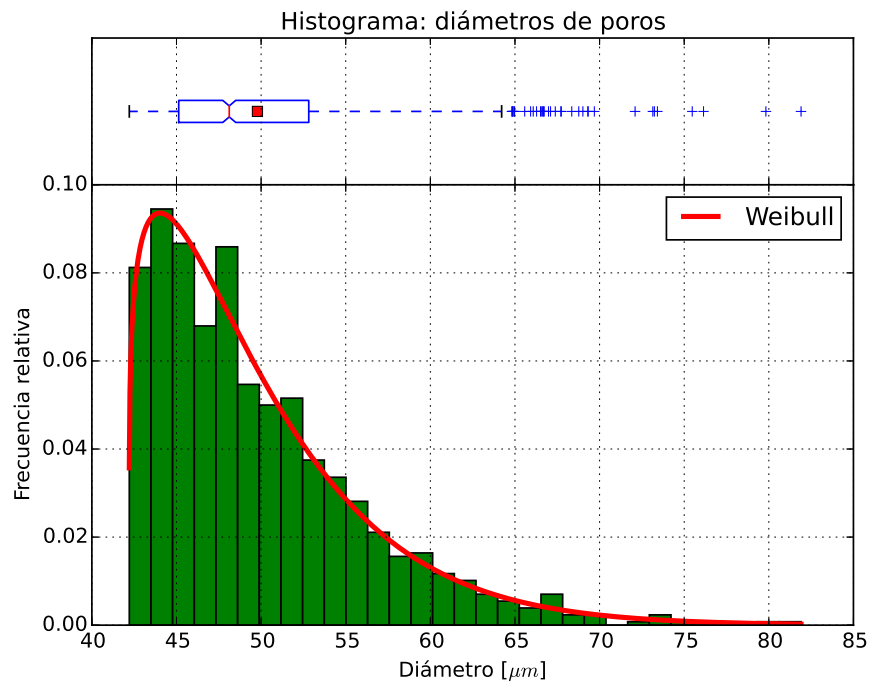


Figura 6.1: Histogramas de los diámetros de poros.

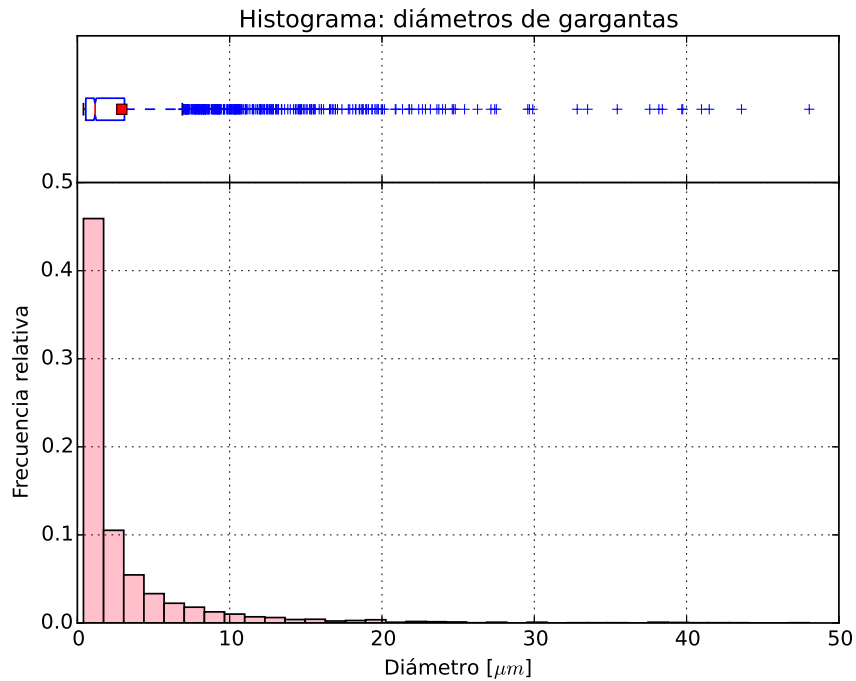


Figura 6.2: Histogramas de los diámetros de gargantas.

Las gargantas de poros están distribuidos al azar en la red, pero se correlacionan con los poros conectados a estas; es decir, se garantiza que el tamaño de garganta sea menor al de los poros.

6.3. Modelo de Red de Poro

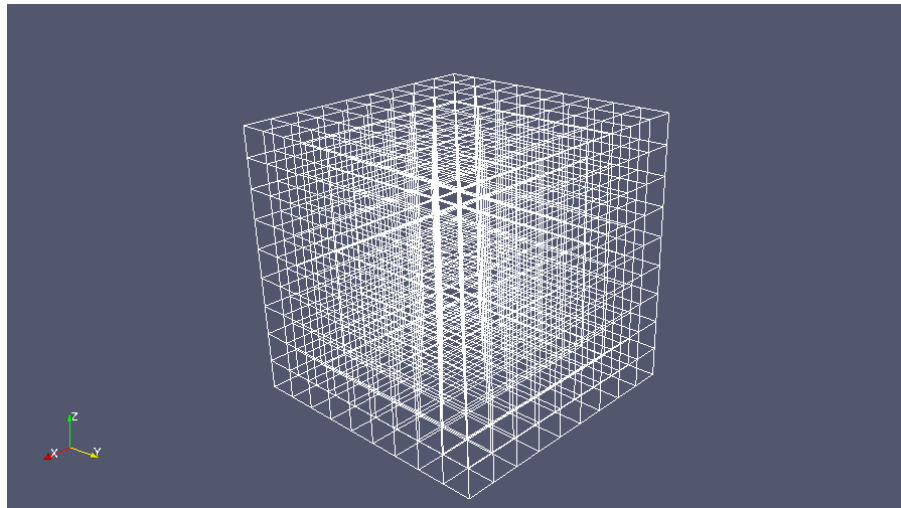
El modelo de red elegido para representar la estructura de poros de areniscas es una red cúbica regular de dimensión $10 \times 10 \times 10$ y número de coordinación igual a seis. Los poros y gargantas son representados por prismas de sección transversal rectangular.

Tabla 6.4: Descripción del Modelo de Red de Poros

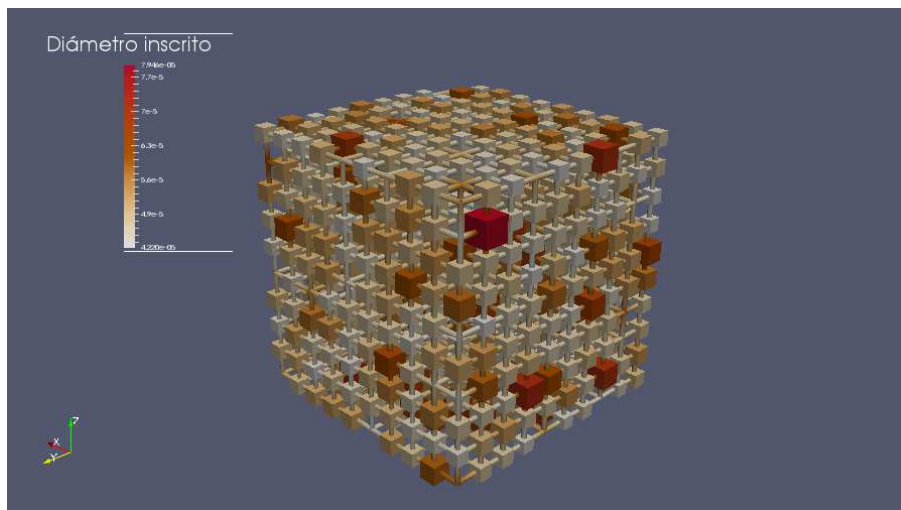
	Ioannidis y Chatzis (1993)	Recreación			
Red	Red cúbica regular				
	Dimensión: $10 \times 10 \times 10$				
	Poros: 1000				
	Gargantas: 2700				
	Espaciado: $92.3 \mu\text{m}$				
Geometría	Poros: Prismas rectangulares				
	Gargantas: Prismas rectangulares				
	Relación de aspecto NA				
	Distribución de radios de poros: Weibull				
	Parámetro	Valor (cte)			
	Forma	1.18			
	Escala	3.856			
	Localización	21.1			
	Distribución de radios de gargantas: Weibull				
	Parámetro	Valor (cte)			
Forma	0.536				
Escala	0.78				
Localización	0.2				
Fases	Fase mojante: Aire				
	Fase defensora: Aire				
	Fase no mojante: Mercurio				
	Fase invasora: Mercurio				
Física	Modelo de presión capilar				
		Mayer-Stowe		Young-Laplace	
	Variable	Valor (cte)	Variable	Valor (cte)	
	σ^m	0.4791 [N/m]	σ^m	0.4791 [N/m]	
	θ^m	140°	θ^m	140°	
	r_t	variable conocida	r_t	variable conocida	
	R	variable desconocida			
	λ	6			

NA: No Aplica

El trabajo original toma en cuenta una dependencia entre el ancho y la altura de los poros y gargantas, lo cual tiene como fin representar la curvatura de la fase invasora durante el desplazamiento (Ioannidis y Chatzis, 1993). Las dimensiones de los poros y gargantas para la recreación son obtenidas solamente por las distribuciones, debido a que la implementación computacional del Modelo de Red de Poros concibe formas regulares y proporcionales.



(a) Red



(b) Geometría

Figura 6.3: Geometría del Modelo de Red de Poros de acuerdo a las distribuciones de diámetro tipo Weibull (Tabla 6.1).

6.4. Presión capilar

El desplazamiento se realizó en el eje x del modelo, a través del plano y - z . En la Fig. 6.4 se hace una comparativa con la curva obtenida por Ioannidis y Chatzis (1993).

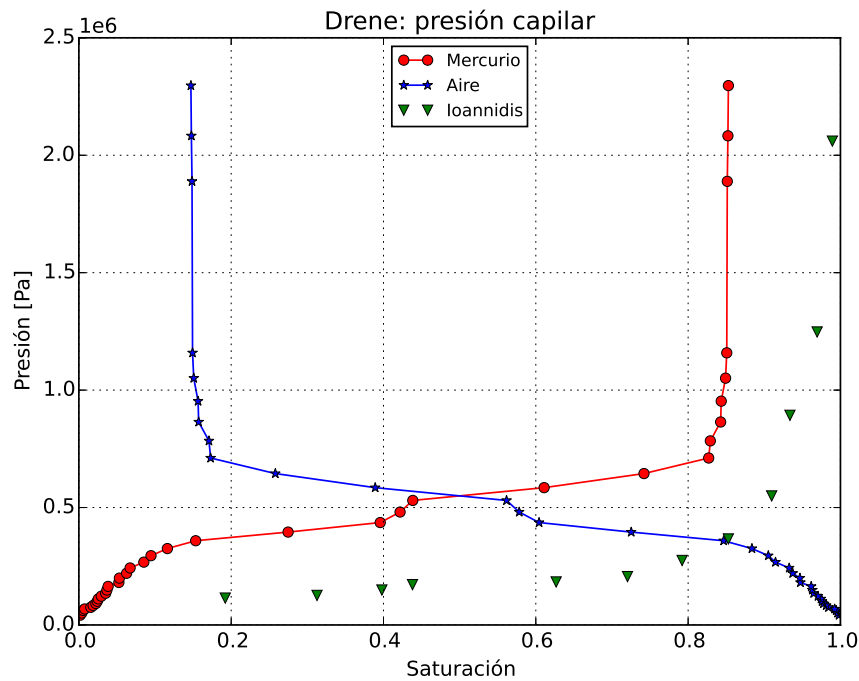
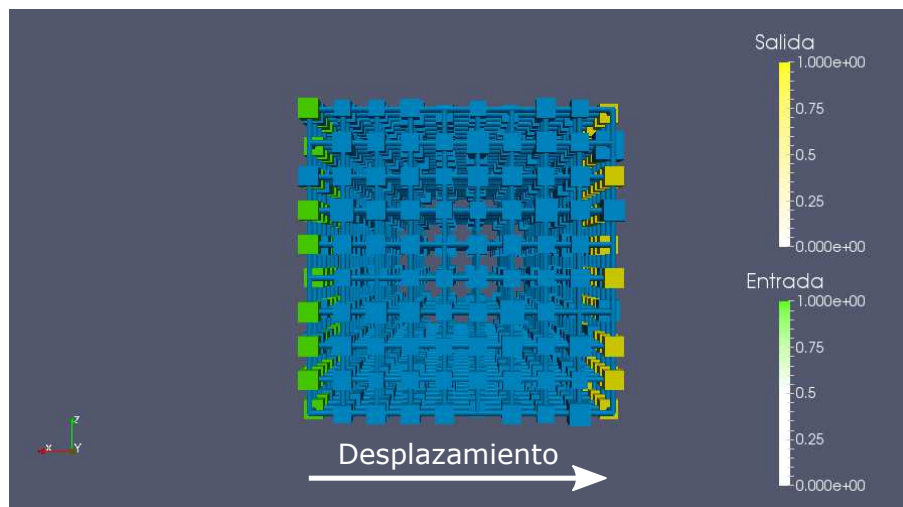


Figura 6.4: Curva de presiones capilares. Los marcadores en verde representan los resultados obtenidos por Ioannidis y Chatzis (1993).

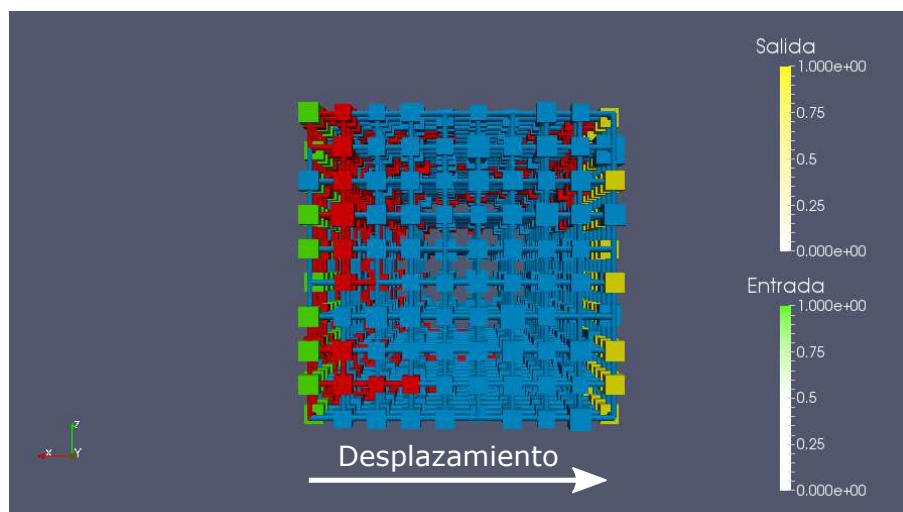
Para el modelo de recreación, la presión de admisión de mercurio es menor (50000 [Pa]). En el rango de 0-15 % de saturación de mercurio la mayoría de los poros de la cara entrada han sido invadidos; sin embargo, esto no garantiza que un conjunto continuo de invasión se haya formado. Previamente a la conclusión de la simulación, se observa que para pequeños cambios en la saturación los cambios de presión son relativamente más grandes, lo cual representa que ya no hay demasiados poros ni gargantas que puedan ser ocupados por la fase invasora. En la recreación, el mercurio llega a la cara salida cuando este ha saturado un 32.63 % al sistema.

Tabla 6.5: Resultados de la simulación de desplazamiento.

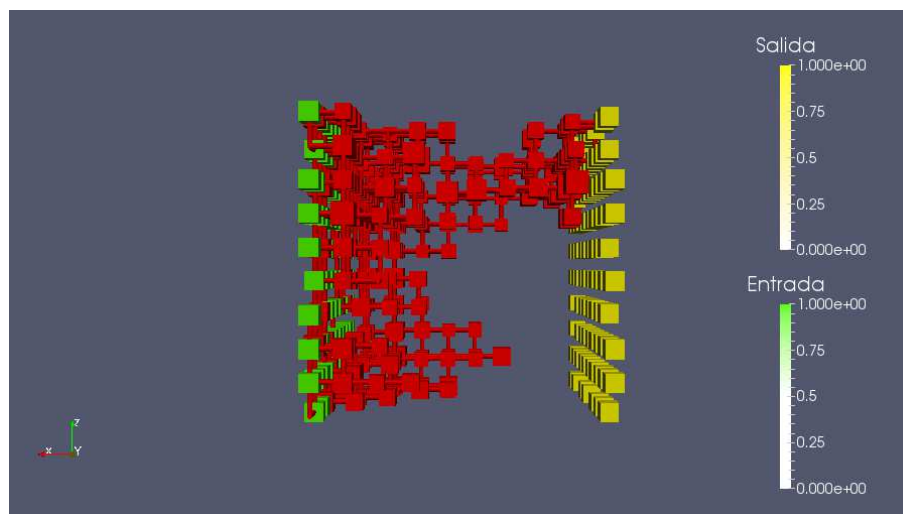
Secuencia de invasión	40 <i>tiempos</i>
Saturación de aire irreductible	17.77 %
Secuencia de invasión en la ruptura	25 <i>tiempos</i>
Poros invadidos	629
Gargantas invadidas	647
Saturación de mercurio en la ruptura	32.63 %
Saturación de aire en la ruptura	67.37 %



(a)

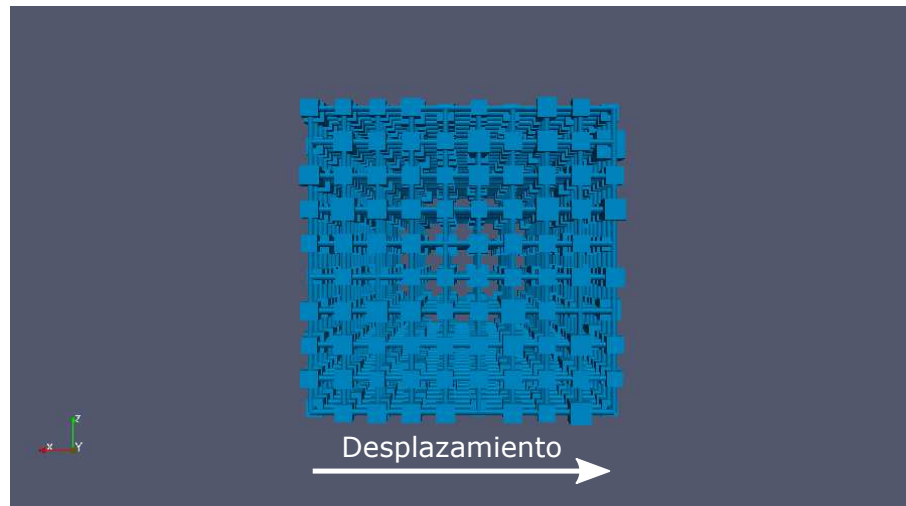


(b)

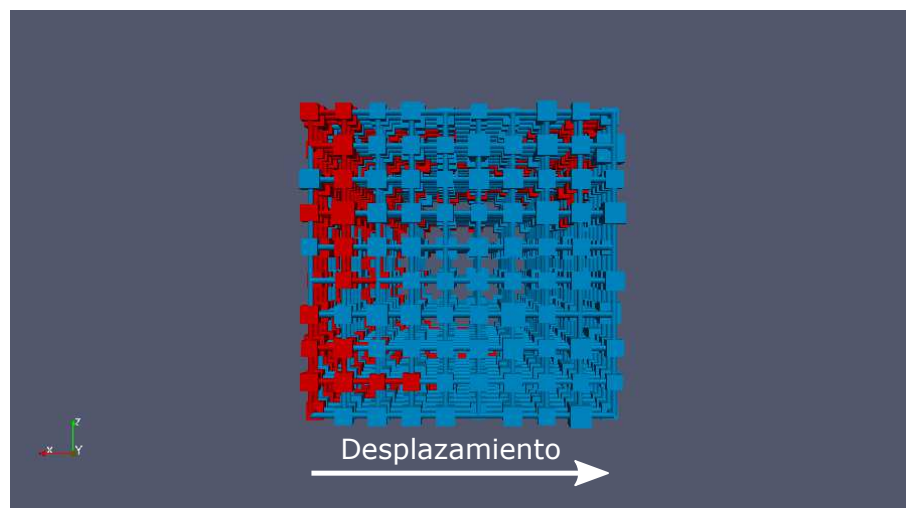


(c)

Figura 6.5: Esquema del desplazamiento de aire (azul) por mercurio (rojo). La entrada y salida del sistema en verde y amarillo, respectivamente. (c) y (d) muestran la configuración de las fases al momento de la ruptura del mercurio. (e) y (f) presentan el conjunto de poros y gargantas invadidos por mercurio en la ruptura.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.6: Perfil de invasión de mercurio hasta el momento de la ruptura.

6.5. Discusión de resultados

El modelo de Ioannidis y Chatzis (1993) es uno de los más completos en la literatura. A pesar del tiempo que ha transcurrido desde su publicación, su flujo de trabajo abarca la mayoría de los puntos propuestos en el Capítulo 4, siendo de los más significativos la geometría y la física a escala de poro. Sin embargo, tanto la relación de aspecto en los poros y gargantas como la ecuación de presión capilar no son consideradas en la recreación, lo cual puede explicar el desplazamiento de la curva obtenida. En esta deducción, se atribuye una mayor influencia a la ecuación de presión capilar sobre la simulación.

Caso de estudio 3

En los capítulos 5 y 6 se emplean redes regulares con diámetros establecidos por distribuciones conocidas. No obstante, el ajuste y manejo de propiedades de un medio poroso, para así ser representados por modelos regulares, acarrear problemas de exactitud y precisión al momento de comparar los resultados con pruebas experimentales (Arns *et al.*, 2004). En el caso de estudio 3 se emplea una estructura proveniente de reconstrucción de imágenes; la conectividad y los tamaños de poros y gargantas tienen una mayor similitud con la del medio bajo estudio.

7.1. Descripción del caso de estudio

Este trabajo considera una muestra de arenisca, denominada S1_Sandstone, del grupo de trabajo del investigador y catedrático Martin Blunt (Imperial College, 2016b). Los datos topológicos y geométricos de la red se estimaron mediante técnicas de imagen y reconstrucción tridimensional; siendo que, las imágenes de la muestra fueron obtenidas por Dong (2007), mediante microtomografía computarizada (Dong, 2007).

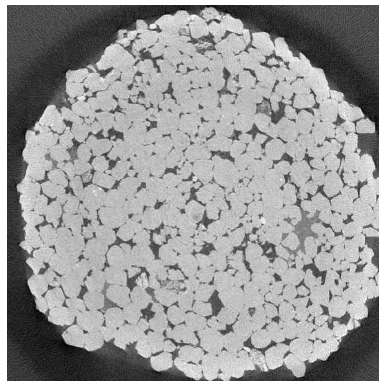


Figura 7.1: Sandstone_S1. Resolución: $8.638\mu m$.

La información de la muestra puede ser consultada en el sitio electrónico <https://goo.gl/vFSNAf> (Imperial College, 2016a). A continuación se presenta un resumen de la muestra S1_Sandstone.

Tabla 7.1: Descripción general de la muestra S1_Sandstone

Propiedad	Valor	Propiedad	Valor	Propiedad	Valor
x	300	Kx [mD]	1969	FFx	36.32
y	300	Ky [mD]	1752	FFy	37.89
z	300	Kz [mD]	1312	FFz	53.47
Resolución [m]	8.683	K prom. [mD]	1678	FF prom.	41.31
Porosidad [%]	14.1	K de la red [mD]	1486	FF de la red	26

FF: Factor de formación

7.2. Análisis exploratorio de los datos

La información original reporta la propiedad de radio; sin embargo, se optó por manejar valores de diámetro para esta sección y para las simulaciones.

Poros

La estadística descriptiva para los diámetros de poro se presenta en la Tabla 7.2.

Tabla 7.2: Descripción estadística de los diámetros de poro.

Estadígrafo	Valor	Estadígrafo	Valor
N	1868	Mínimo	1.77
Primer cuartil	28.55	Mediana	45.05
Media	51.17	Tercer cuartil	68.86
Máximo	228.00	Rango	226.23
Rango intercuartil	40.30	Varianza	943.67
Desviación estándar	30.71	Asimetría	1.03
Curtosis	1.44		

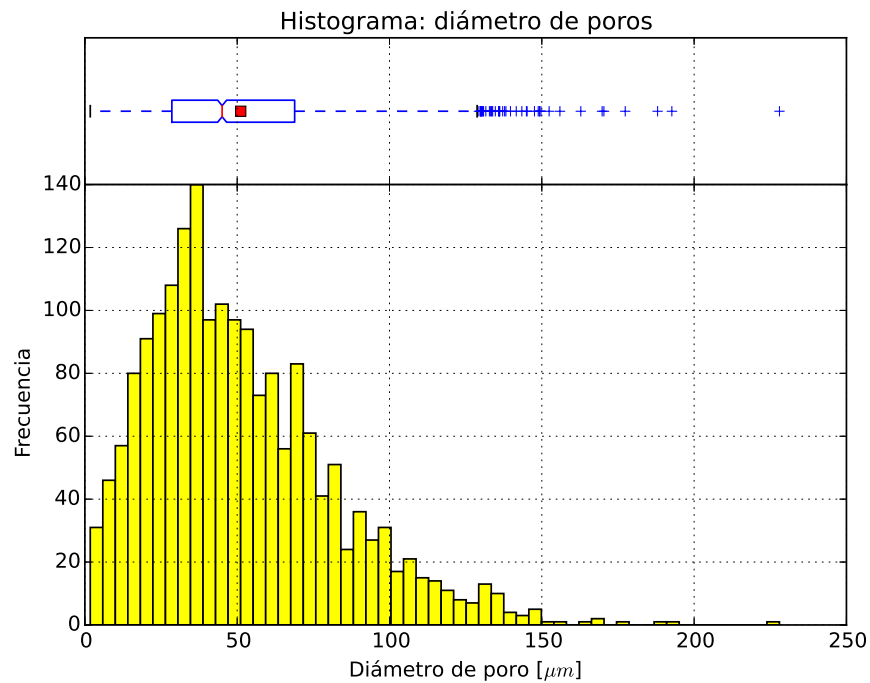


Figura 7.2: Histograma de los diámetros de poro de S1_Sandstone.

Se ajustaron funciones de distribución de probabilidad para intentar reproducir el comportamiento de los datos; de esta forma, se podrán generar datos de forma aleatoria. Se consideró la implementación de *Maximum Likelihood Estimation*.

Tabla 7.3: Parámetros de las distribuciones ajustadas para los diámetros de poro.

Parámetro	Gamma	Beta	Rayleigh	Weibull_min	Lognorm
Forma	3.02	2.51, 23.80		1.67	0.41
Localización	-2.91	-1.13	-2.60	1.22	-21.00
Escala	17.87	546.39	43.78	55.93	66.18

En la Fig. 7.2 se presentan el histograma de los diámetro con las distribuciones de probabilidad de la Tabla 7.3.

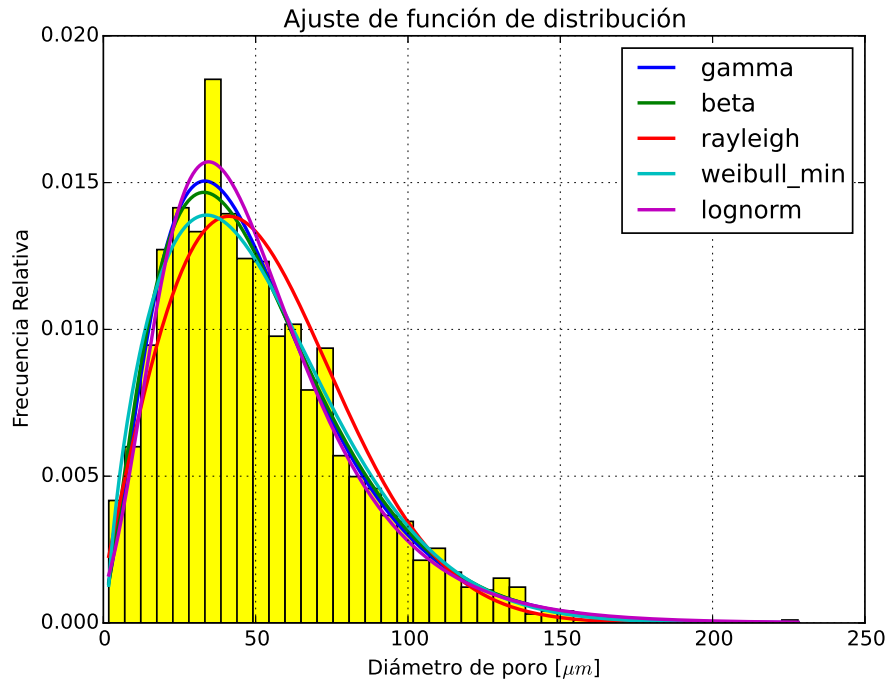


Figura 7.3: Ajuste de distribución de los diámetros de poro S1_Sandstone.

Gargantas

De la misma en la que se exploraron los datos de poros, la siguiente tabla presenta las principales propiedades estadísticas de los diámetros de garganta de S1_Sandstone.

Tabla 7.4: Descripción estadística de los diámetros de garganta.

Estadígrafo	Valor	Estadígrafo	Valor
N	3048	Mínimo	1.74
Primer cuartil	11.98	Mediana	21.47
Media	24.63	Tercer cuartil	33.28
Máximo	121.70	Rango	119.95
Rango intercuartil	21.29	Varianza	280.59
Desviación estándar	16.75	Asimetría	1.26
Curtosis	2.28		

Tomando en cuenta las mismas distribuciones de probabilidad para poros, los parámetros que reproducen el comportamiento de los diámetros de gargantas son los siguientes:

Tabla 7.5: Parámetros de las distribuciones ajustadas para los diámetros de garganta.

Parámetro	Gamma	Beta	Rayleigh	Weibull_min	Lognorm
Forma	1.789	1.4665, 9.8604		1.3738	0.54023
Localización	1.1273	1.584	-3.2073	1.6335	-6.1701
Escala	13.14	177.8878	22.9756	25.1196	26.7387

De acuerdo a estos datos, en la Fig. 7.4 se muestra una comparativa entre las distribuciones ajustadas y el histograma de los diámetros de gargantas.

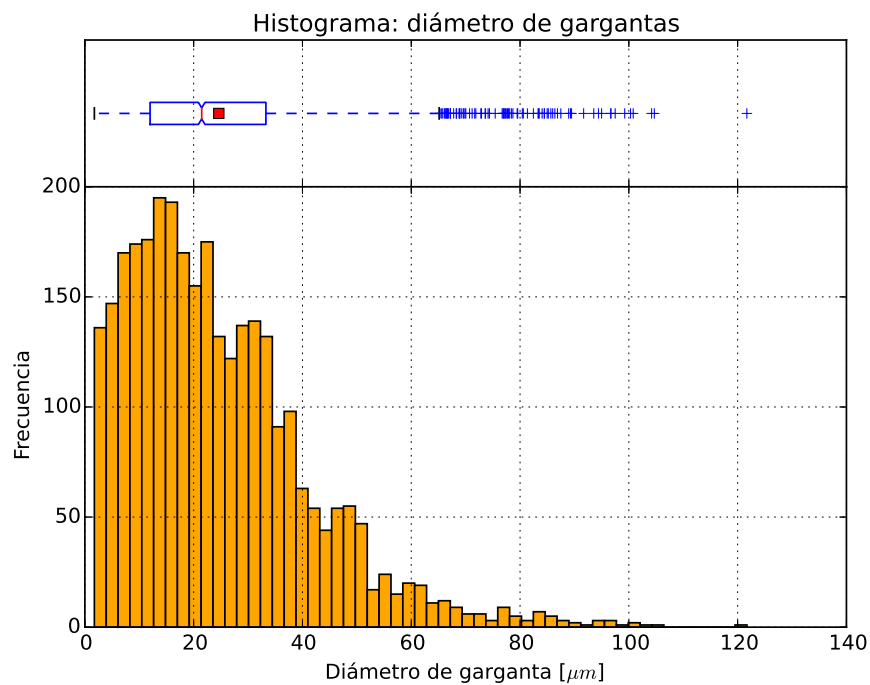


Figura 7.4: Histograma de los diámetros de garganta de S1_Sandstone.

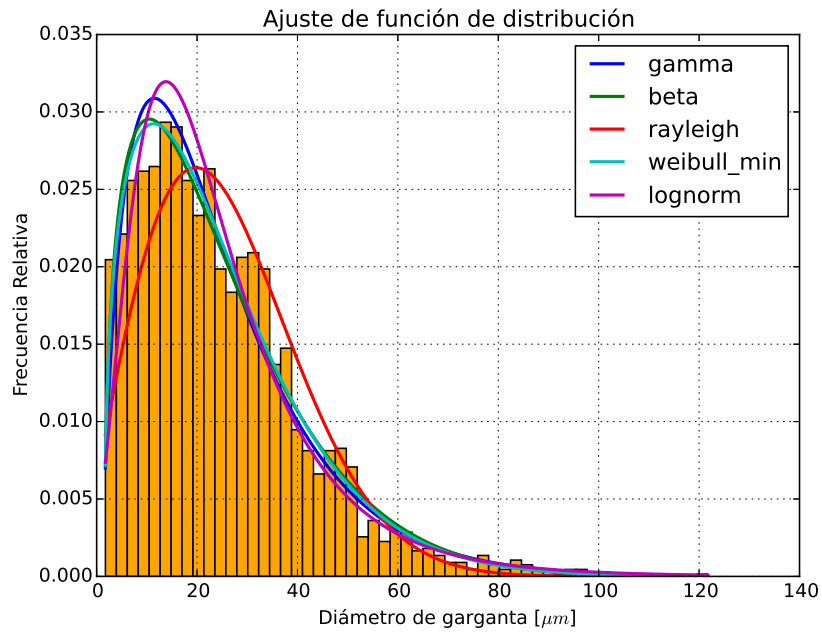


Figura 7.5: Ajuste de distribución de los diámetros de garganta de S1_Sandstone.

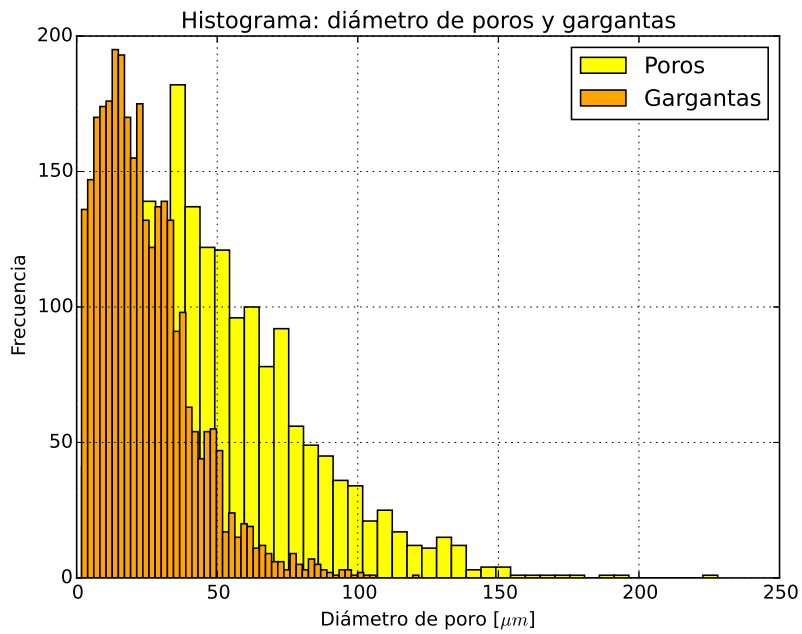


Figura 7.6: Histograma de los diámetros de poro y garganta.

Número de coordinación

Los medios porosos reales poseen conectividades que no pueden ser descritos por un número de coordinación constante. Lo ideal en las recreaciones con redes regulares es asignar estos valores mediante distribuciones, de la misma manera que los diámetros de poros y gargantas.

Tabla 7.6: Descripción estadística del número de coordinación.

Estadígrafo	Valor	Estadígrafo	Valor
N	1868	Mínimo	0
Primer cuartil	2	Mediana	3
Mediana	3.15	Tercer cuartil	4
Máximo	20	Rango	20
Rango intercuartil	2	Varianza	4.99
Desviación estándar	2.23	Asimetría	1.76
Curtosis	6.30		

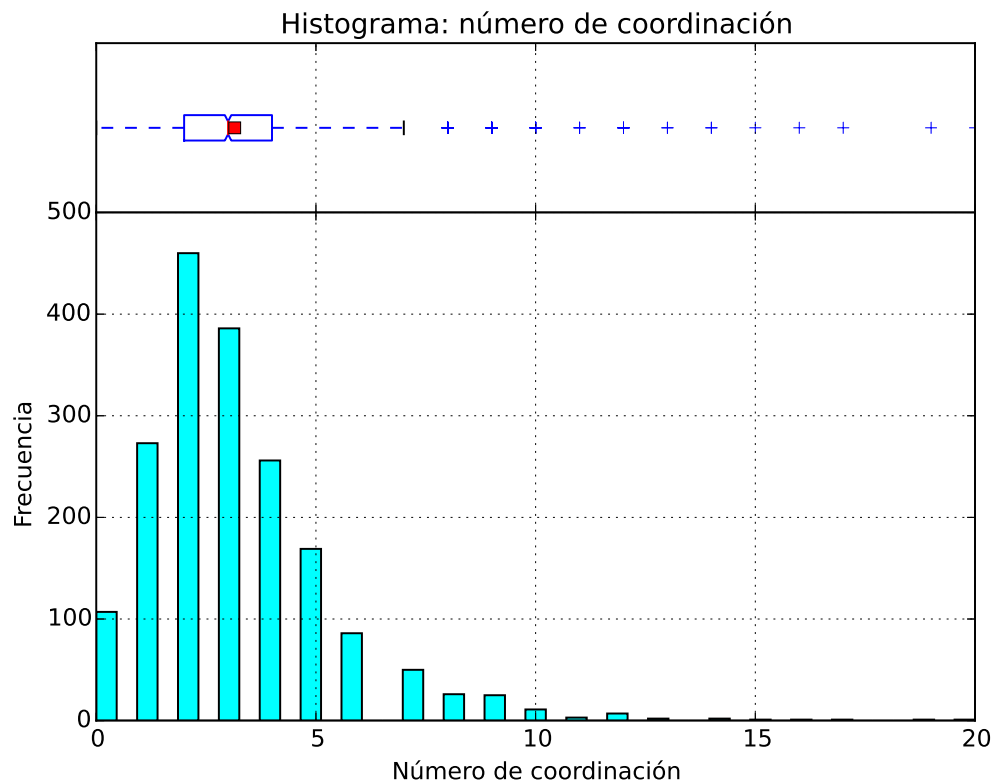


Figura 7.7: Histograma del número de coordinación.

7.3. Modelo de Red de Poro

El Modelo de Red de Poros representa a la muestra S1_Sandstone con el fin de desarrollar simulaciones de flujo y desplazamiento inmisible. De esta forma se obtendrán valores de propiedades de flujo (permeabilidad, curva de presión capilar y permeabilidades relativas). De los datos originales de S1_Sandstone, los poros y gargantas aislados o que no poseen conexión no son contemplados en la red. En la solución de los modelos de flujo y desplazamiento, esto facilita la implementación computacional. En la representación física, estos elementos bajo ninguna condición podrán ser parte del camino de flujo o desplazamiento, razón por la cual no se toman en cuenta.

Tabla 7.7: Descripción del Modelo de Red de Poros.

S1 Sandstone		
Red	Red irregular 1717 poros 2824 gargantas	
Geometría	Poros: esferas Gargantas: cilindros Sección transversal: circular Diámetros obtenidos de imágenes	
Fases	Fase mojante: aire Fase defensora: aire Fase no mojante: agua Fase invasora: agua	
Física	Presión capilar: Young-Laplace	
	Propiedad	Valor
	σ^w	0.0719 [N/m]
	θ^w	100°
	r_t	variable conocida
	Conductividad hidráulica Para esferas y cilindros	

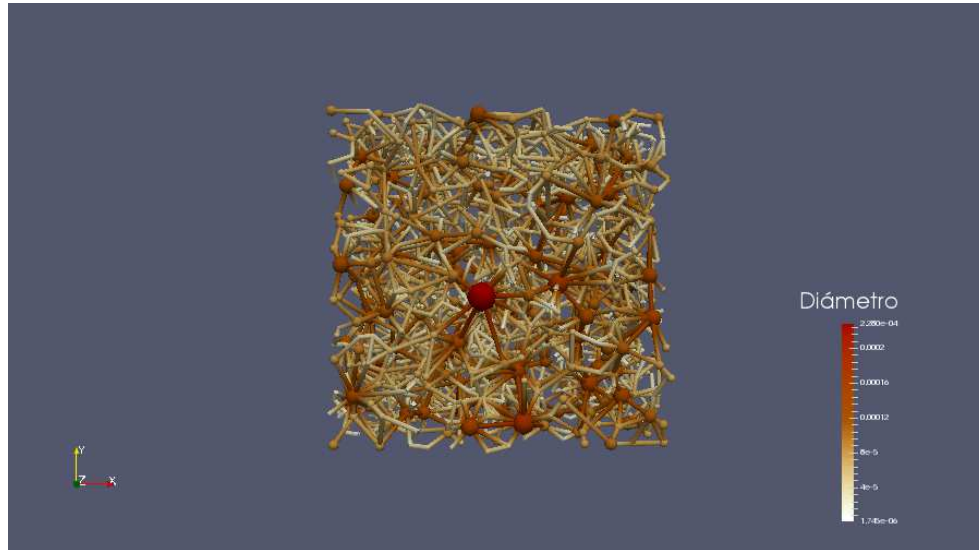


Figura 7.8: Modelo de Red de Poros que representa a la arenisca S1_Sandstone.

7.4. Permeabilidad

El flujo de agua se lleva a cabo en el sentido del eje x . Los poros entrada conforman una condición de frontera con valor de 0.6 [Pa]; de la misma manera, el conjunto de poros salida constituyen una frontera con una presión de 0.2 [Pa]. Con estos datos, se obtuvo una permeabilidad de 1366.01 [mD].

Tabla 7.8: Resultados de la simulación flujo tipo Stokes.

Propiedad	Valor	Unidad
Longitud	2.57×10^{-3}	m^2
Área	6.83×10^{-6}	m
Gasto	5.41×10^{-12}	m^3/s
Permeabilidad absoluta	1.34×10^{-12}	m^2
	1366.01	mD

Los valores de presión para poros y gargantas de la red, tras la solución del modelo de flujo tipo Stokes, se representan en la Fig. 7.9

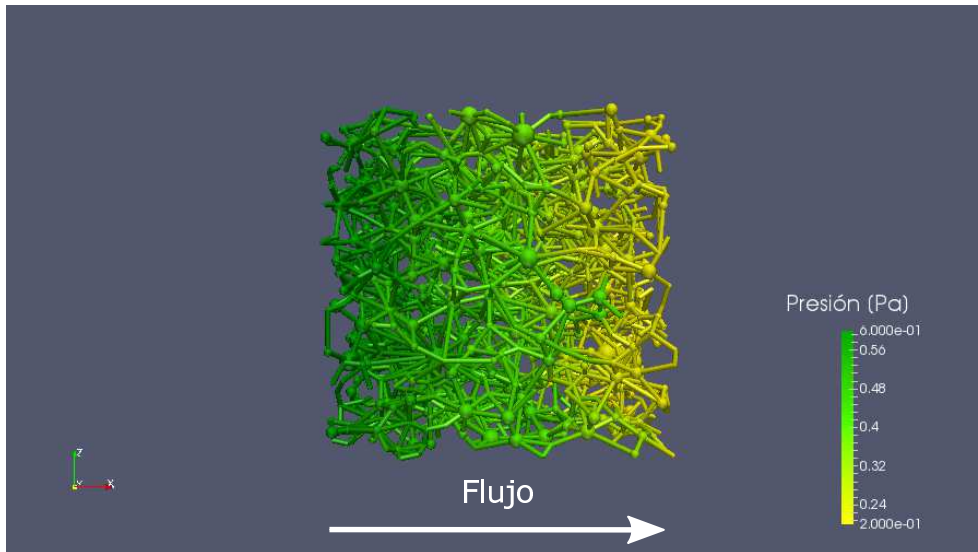


Figura 7.9: Presiones en la red después de terminar la simulación de flujo tipo Stokes. La dirección del flujo fue de izquierda a derecha.

7.5. Presión capilar

El desplazamiento consideró como fase defensora al aire, mientras que al agua como la fase invasora. La dirección del desplazamiento fue en el eje x del modelo, a través del plano $y-z$. Bajo estas condiciones, se obtuvo una saturación de agua en la ruptura de 31.21 % y una saturación de aire irreductible de 23.81 %.

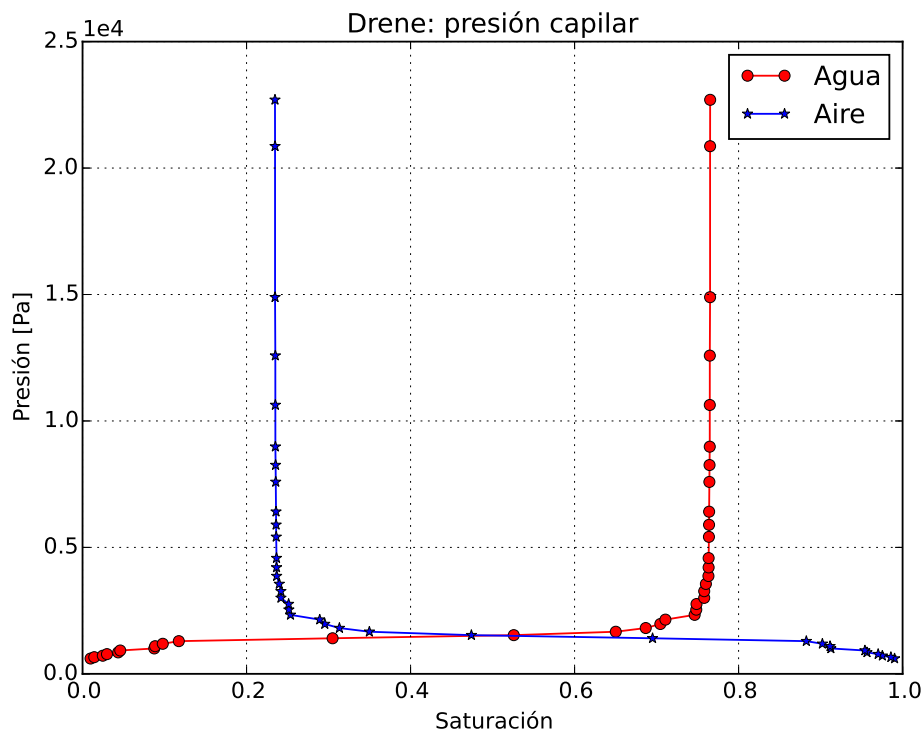


Figura 7.10: Curva de presiones capilares.

La presión de admisión de agua es de 660 [Pa], y la presión máxima que llega a alcanzar el sistema es de 22764 [Pa]. Para una saturación de agua entre 0 y 70 %, las gargantas con los diámetros más grandes del sistema han sido ocupados por la fase invasora. Cuando la saturación toma un valor entre 70 y 76 % indica que las gargantas con menor tamaño en la red están por ser invadidas; de ahí que, para grandes aumentos de presión, el cambio en la saturación de agua es relativamente pequeño.

Tabla 7.9: Resultados de la simulación de desplazamiento.

Secuencia de invasión	46 <i>tiempos</i>
Saturación de aire irreductible	23.81 %
Secuencia de invasión en la ruptura	10 <i>tiempos</i>
Poros invadidos	262
Gargantas invadidas	245
Saturación agua en la ruptura	31.21 %
Saturación aire en la ruptura	68.79 %

Las siguientes imágenes muestran el proceso de invasión en el Modelo de Red de poros.

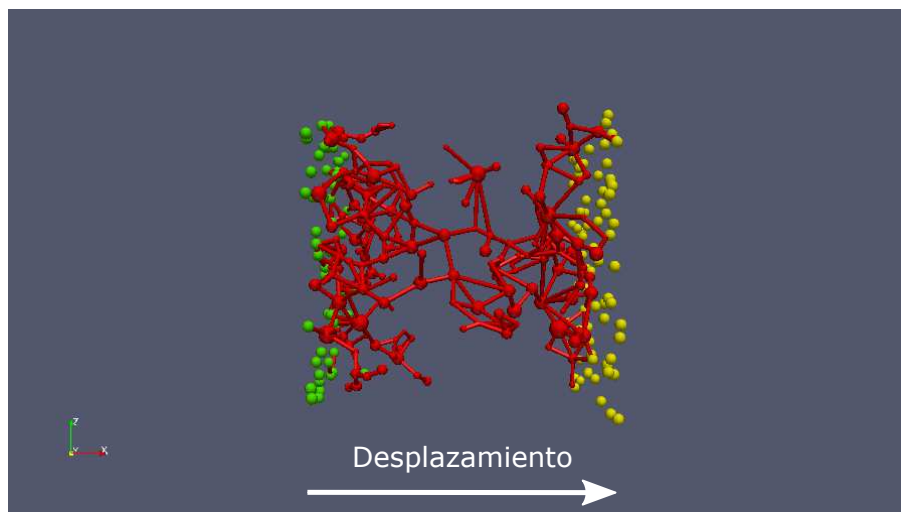
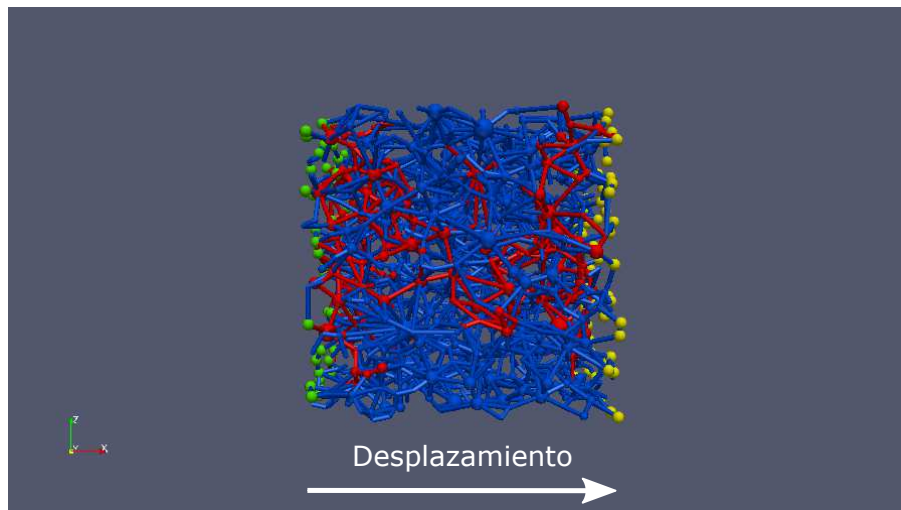
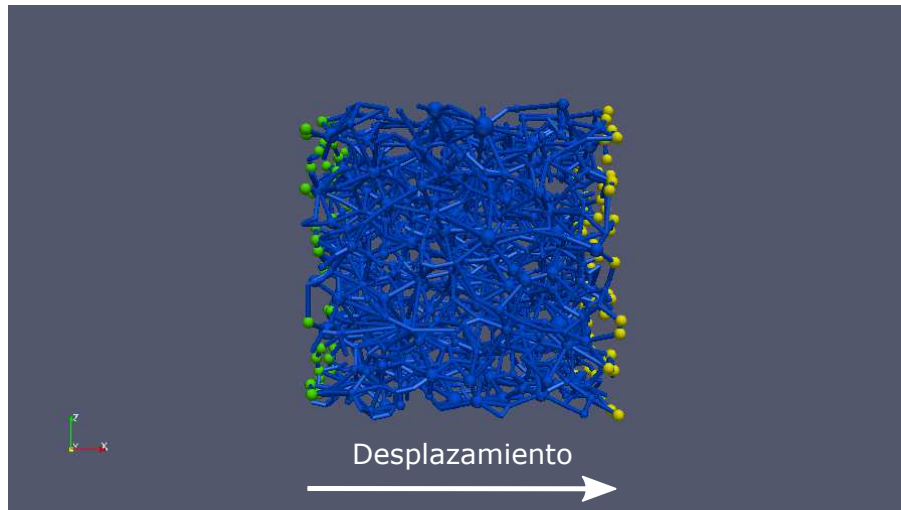
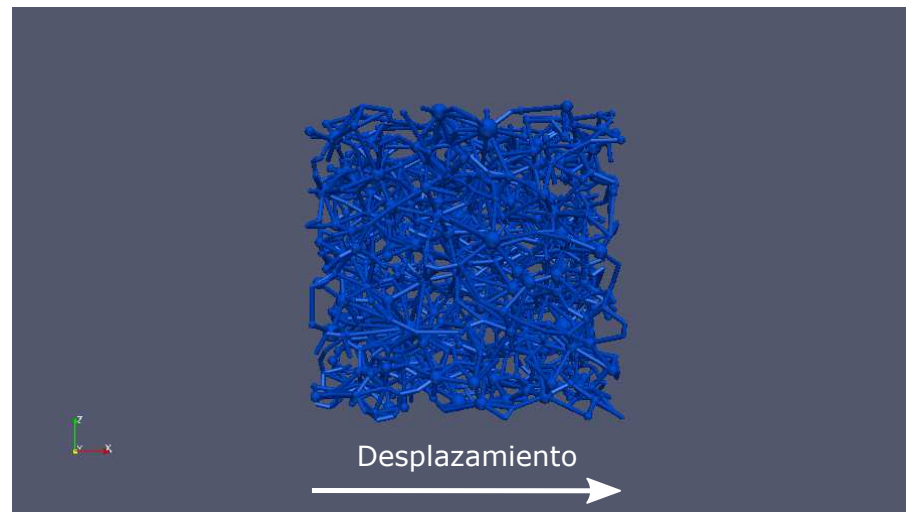
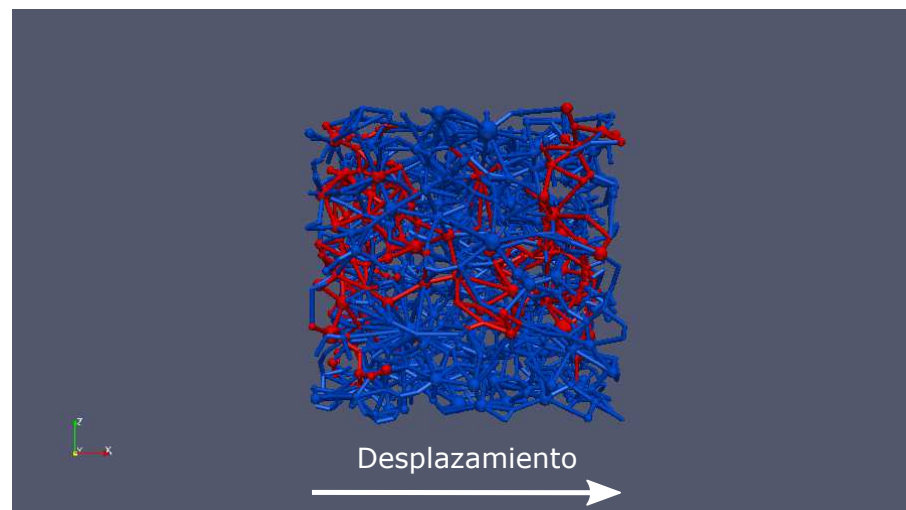


Figura 7.11: Esquema del desplazamiento de aire (azul) por agua (rojo). La entrada y salida del sistema en verde y amarillo, respectivamente. (c) y (d) muestran la configuración de las fases al momento de la ruptura del agua. (e) y (f) presentan el conjunto de poros y gargantas invadidos por agua en la ruptura.



(a)



(b)



(c)

Figura 7.12: Perfil de invasión de agua hasta el momento de la ruptura.

7.6. Permeabilidades relativas

El Modelo de Red de Poros contempló tres simulaciones diferentes de flujo tipo Stokes, para las direcciones x , y y z . Las condiciones de frontera tienen los mismos valores en los tres casos; 0.6 [Pa] para la entrada y 0.2 [Pa] en la salida. A partir de la secuencia de invasión del desplazamiento inmiscible se estimaron las siguientes curvas de permeabilidades relativas.

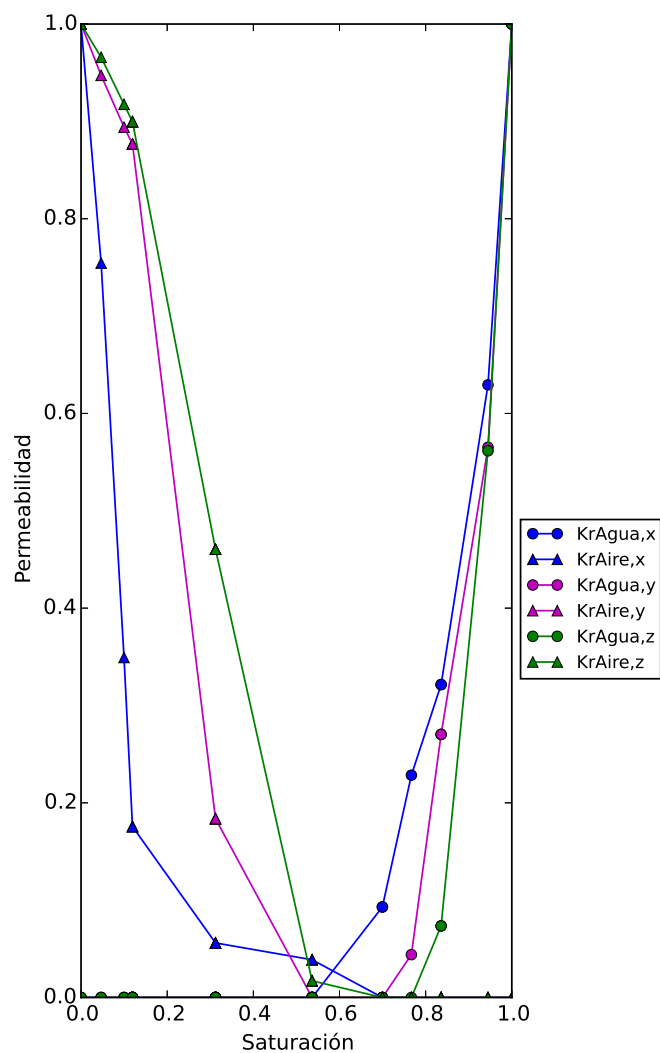


Figura 7.13: Curva de permeabilidades relativas para la arenisca S1_Sandstone y un sistema aire-agua.

7.7. **Discusión de resultados**

De acuerdo a la línea de trabajo, la arenisca S1_Sandstone tiene todas las características geométricas y de conectividad para representar a un medio poroso real. Sin embargo, Dong (2007) no presenta suficientes datos para recrear tanto el proceso de flujo como el de desplazamiento. Los valores de las condiciones de frontera, en la simulación de flujo, fueron propuestas por analogía al Capítulo 5. En su trabajo, Dong (2007) sólo presenta los valores de permeabilidades para la muestra S1_Sandstone; pero, sin estimar alguna curva. Hasta este momento no se ha encontrado algún trabajo de otro autor que emplee la misma muestra, tanto para simulación como para prueba experimental. A los resultados aquí presentados, al no poder ser comparados con otra estimación, no se es capaz de verificar su precisión y exactitud, así como evaluar la implementación realizada.

Conclusiones

Se estableció un flujo de trabajo para el estudio de fenómenos a escala de poro. Esta propuesta se fundamenta en los Modelos de Red de Poros como enfoques para discretizar un medio poroso, a la escala de estudio. Así mismo, se presenta una metodología para generar un Modelo de Red de Poros y para estimar propiedades efectivas de flujo. La metodología se aplica en tres diferentes casos de estudio, los cuales permiten revisar parte de los componentes presentados en el flujo de trabajo, además de resaltar las ventajas y desventajas de su consideración en los fenómenos de estudio.

Los modelos de flujo y desplazamiento inmisible fueron desarrollados bajo condiciones generales o elementales; no obstante, permiten realizar estimaciones aceptables de los procesos. Esto se debió a que se tomó mayor consideración y tiempo al entendimiento de los principales elementos que conforman a un Modelo de Red de Poros. La geometría y conectividad fueron los aspectos de mayor demanda comprensiva, los cuales generaron mayores contratiempos al momento de realizar la implementación computacional para redes provenientes de imágenes de rocas. Con respecto a los modelos, el de desplazamiento inmisible fue el que exigió mayor capacidad de entendimiento, ya que se incorporó parte de la teoría de percolación, la cual se constituye de amplios principios matemáticos.

De los tres casos de estudio realizados, el caso 1 fue el que obtuvo un mejor acercamiento con los resultados del autor (Gostick *et al.* (2007)). Esto se alude a la suficiente información proporcionada en la investigación original, lo cual ayudó a recrear las condiciones del trabajo. En el caso 2, faltaron datos referentes a las condiciones del desplazamiento, así como una mayor descripción de las fases. No obstante la especificación de la geometría del Modelo de Red de Poros fue favorable para las simulaciones. Para el caso 3, al no ser la arenisca la muestra principal en el trabajo de Dong (2007), la información, tanto de las fases como de los fenómenos, es escasa. Sin embargo, se seleccionó dicha muestra debido a que es la que posee el menor número de poros y gargantas, lo que benefició en el manejo de la información, así como en la aplicación computacional.

Desde un punto de vista computacional, el manejo de *OpenPNM*[®] tuvo varias ventajas. El primero, al ser de código libre, permitió comparar implementaciones propias y verificar estas mismas, además brindó un aprendizaje del lenguaje *Python*. Otra ventaja fue la de incorporar diferentes líneas de trabajo y facilitar su empleo, tales como las imágenes de arenisca del Capítulo 7, esto sólo con un conocimiento previo del *software* y de programación. Finalmente, favoreció a comprender teorías consideradas en los modelos de flujo y desplazamiento inmisible, tal como el de percolación.

Los avances logrados con el Modelo de Red de Poros proveniente de imágenes se pueden utilizar para investigar los efectos de ciertas propiedades de las fases o del medio sobre las simulaciones. Es de particular interés desarrollar modelos que, con la misma geometría, estimen curvas de presiones capilares y de permeabilidades relativas para diferentes valores de tensión interfacial y ángulo de contacto. Tras generar estas familias de curvas, se es posible ajustar funciones particulares a la muestra de roca que describan el comportamiento de las propiedades. Respecto a la estructura de los Modelos de Red de Poros, queda aún por examinar formas irregulares para la representación de poros y gargantas, con lo cual se podría estudiar parte de los efectos de mojabilidad en medios porosos.

Relación Hagen-Poiseuille

(Díaz-Viera, 2010; Olivella, 2002; Sahimi, 2011; White, 2009)

El movimiento de fluidos usuales, como el agua, aire o el aceite representa un modelo básico y esencial en el estudio de diferentes ciencias. La ecuación que describe la dinámica de un fluido viscoso fue establecida de forma clara y matemáticamente convincente en 1845 por George Gabriel Stokes. Una solución exacta al modelo de Stokes es para flujo incompresible dentro de una tubería circular, caso que fue estudiado por G. Hagen en 1839 y J.L. Poiseuille en 1840. La relación de Hagen-Poiseuille describe el flujo laminar de un fluido newtoniano incompresible, a través de una tubería cilíndrica con sección transversal constante, bajo la acción de un gradiente de presión aplicado a los extremos de la tubería.

A continuación se presenta el desarrollo del modelo de flujo, partiendo del método sistemático para la formulación de modelos de sistemas continuos, con los siguientes supuestos:

1. Fluido newtoniano e incompresible con propiedades constantes.
2. Flujo laminar con simetría axial.
3. Tubería circular uniforme (sección longitudinal más larga que su diámetro).
4. Flujo estacionario.
5. El fluido no presenta aceleración
6. Gradiente de presión constante aplicado en los extremos de la tubería.
7. El fluido se adhiere a la pared de la tubería.

Balance de masa

Se considera la método sistemático para la formulación de modelos de sistemas continuos, para establecer un balance de masa.

$$\frac{dM_f(t)}{dt} = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\delta B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (\text{A.1})$$

Donde:

$M_f(t)$ es la masa del fluido f , propiedad extensiva $g(\underline{x}, t)$ es lo que se genera o se destruye en el interior del cuerpo $B(t)$

$\underline{\tau}$ es lo que entra o sale a través de la frontera del cuerpo $\delta B(t)$

$g_{\Sigma}(\underline{x}, t)$ es lo que se genera o se destruye en el interior del cuerpo $\Sigma(t)$

Cuando el sistema no presenta discontinuidades y siendo ρ_f la densidad del fluido (propiedad intensiva), la ecuación de balance global de la Ec. A.1 es:

$$\frac{dM_f(t)}{dt} = \int_{B(t)} \left[\frac{\partial \rho_f}{\partial t}(\underline{x}, t) + \nabla \cdot (\rho_f(\underline{x}, t) \underline{v}(\underline{x}, t)) \right] d\underline{x} \quad (\text{A.2})$$

Aplicando el teorema generalizado de Gauss y el lema de duBois-Reymond se obtiene:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \quad (\text{A.3})$$

Si se considera que no hay difusión $\underline{\tau} = 0$, no se genera ni se destruye masa en el cuerpo, y que el fluido del sistema es incompresible $\rho = 0$:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \underline{v}) = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$\nabla \cdot (\rho_f \underline{v}) = 0 \quad (\text{A.5})$$

Balance de momento

La ecuación de balance de momento para un fluido newtoniano y de acuerdo al método sistemático para la formulación de modelos de sistemas continuos es:

$$\frac{d\underline{\mathfrak{M}}(t)}{dt} = \int_{B(t)} \rho_f \underline{b} d\underline{x} + \int_{\delta B(t)} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (\text{A.6})$$

Donde

$\underline{\mathfrak{M}}(t)$ es el momento lineal del fluido f , propiedad extensiva.

$\rho_f \underline{b}$ son las fuerzas de cuerpo por unidad de volumen.

$\underline{\underline{\sigma}}$ es el tensor de esfuerzos
 $(\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n})$ las fuerzas de tracción.

La ecuación de balance local de la Ec. A.6 es:

$$\frac{d\rho_f \underline{v}}{dt} + \rho_f \underline{v} \nabla \cdot \underline{v} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho_f \underline{b} \quad (\text{A.7})$$

Desarrollando la Ec. A.7 y considerando la ecuación de balance de masa (Ec. A.4) se obtiene:

$$\rho_f \frac{d\underline{v}}{dt} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho_f \underline{b} \quad (\text{A.8})$$

Si se contemplan fuerzas de cuerpo ($\underline{b} = 0$) y realizando por separado cada uno de los términos de la divergencia del tensor de los esfuerzos, se obtiene la ecuación general de flujo de Navier-Stokes:

$$\rho \frac{d\underline{v}}{dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \underline{v} + (\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \underline{v} \quad (\text{A.9})$$

Para el caso de fluido incompresible $\nabla \cdot \underline{v} = 0$ y viscoso, la Ec. A.8 se convierte en:

$$\rho \frac{d\underline{v}}{dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \underline{v} \quad (\text{A.10})$$

A.1. Relación de Hagen-Poiseuille

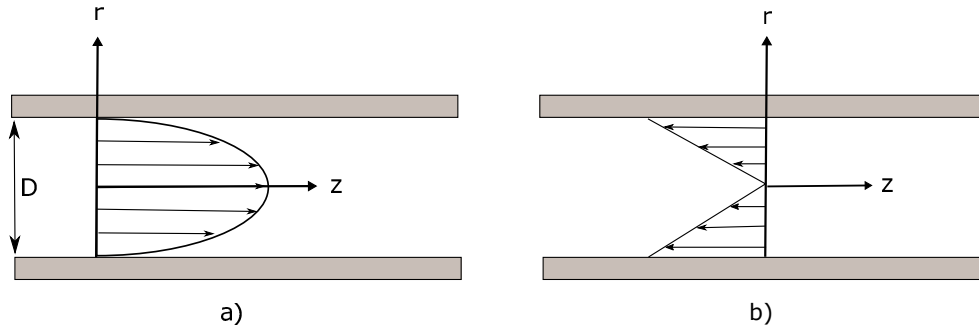


Figura A.1: Flujo de Hagen-Poiseuille. Flujo laminar axial en un tubo de sección circular para un fluido newtoniano. Campo de velocidades a) y el de tensiones b).

Las ecuaciones que describen el flujo de Hagen-Poiseuille pueden ser derivadas directamente de la ecuación de Navier-Stokes (Ec. A.9) para flujo estacionario ($\frac{d\underline{v}}{dt} = 0$).

$$\nabla^2 \underline{v} = \frac{1}{\mu} \nabla p \quad (\text{A.11})$$

Para nuestro análisis se considera un sistema de coordenadas cilíndrico, en donde las componentes radial y azimutal de la velocidad del fluido son cero ($v_r = v_\theta = 0$). Además, como el flujo tiene simetría axial, la velocidad $\underline{v} = v e_z$ sólo depende de la distancia r medida desde el eje de la tubería, con lo cual la Ec. A.11 se convierte en:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) = \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial z} \quad (\text{A.12})$$

Integrando por separación de variables se obtiene:

$$v_z = \frac{1}{4\mu} \frac{\partial p}{\partial z} r^2 + C_1 \ln r + C_2 \quad (\text{A.13})$$

La velocidad v_z no puede ser singular cuando $r = 0$, por lo que se tiene que $C_1 = 0$. Para determinar C_2 , se asume que la velocidad del fluido debe ser nula en la pared de la tubería, es decir que el fluido se adhiere a la pared, de modo que $v_z(r = R) = 0$, con lo que resulta

$$C_2 = -\frac{1}{4\mu} \frac{\partial p}{\partial z} R^2 \quad (\text{A.14})$$

De la cual se obtiene el perfil parabólico de velocidad

$$v_z = -\frac{1}{4\mu} \frac{\partial p}{\partial z} (R^2 - r^2) \quad (\text{A.15})$$

Para determinar el caudal que circula por la tubería se realiza:

$$Q = \int_0^R 2\pi r v_z dr \quad (\text{A.16})$$

Al considerar que la presión decrece linealmente a lo largo de la tubería, $\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\Delta p}{L} = (cte)$, se obtiene:

$$Q = -\frac{\pi R^4 \Delta p}{8\mu L} \quad (\text{A.17})$$

La cual denota la ecuación de Hagen-Poiseuille.

Teoría de la Percolación

(Hunt y Ewing, 2009)

La teoría de percolación, fue presentada por primera vez por Paul John Flory y Walter Hugo Stockmayer para describir el fenómeno de polimerización entre monómeros y pequeñas moléculas ramificadas (Flory, 1941; Stockmayer, 1943). Flory y Stockmayer no utilizaron la palabra percolación para nombrar su teoría; pero, el efecto de la conectividad de los monómeros en las propiedades macroscópicas de un gel de polímero fue la nueva idea importante en su teoría, que también es el principal concepto en teoría de percolación. La teoría de percolación moderna fue presentada por Broadbent y Hammersley, quienes trataron con el problema de la propagación de un fluido a través de un medio poroso desordenado (sistema que contiene un grado de aleatoriedad o estocasticidad) (Broadbent y Hammersley, 1957).

La teoría de percolación describe propiedades emergentes asociadas a la conectividad de un gran número de objetos, los cuales generalmente poseen una extensión espacial con relaciones estadísticas prescritas (Hunt y Ewing, 2009). La relevancia más importante de la teoría de percolación es el de poder establecer propiedades globales a partir de especificaciones locales. En la teoría de percolación la topología es personalizable y referente a alguna estructura espacial de dimensión d . Un ejemplo de estas estructuras son las retículas regulares constituidas de nodos (*sites*) conectados por enlaces (*bonds*). El cambio típico de este enfoque a la teoría de percolación es tomar una estructura conocida con una topología simple y hacer que los enlaces sean una relación probabilista, la cual genera topologías más complejas.

La teoría de percolación se presenta en tres vertientes básicas:

- Enlaces
- Sitios
- Continua

Otras variantes son la percolación *bootstrap* y percolación de invasión. La percolación de invasión fue desarrollada en el contexto de mojabilidad y desecado de medios porosos, con el fin de describir los fenómenos relacionados con frentes de fluidos mojantes.

B.1. Enfoques de percolación

La teoría de percolación se empezó a desarrollar primero de manera discreta, y muchos de los resultados en los modelos continuos son análogos a los resultados discretos. Así mismo, los modelos discretos de percolación son los más sencillos de describir y son adecuados para desarrollar una intuición del tipo de problemas que se intenta resolver. Finalmente, una técnica importante en la teoría de percolación continua es aproximar el modelo continuo a través uno discreto (Ayala, 2014). La principal diferencia entre estos enfoques es que en la discreta las localidades están definidas regularmente por retículas. En la continua las localidades son determinadas mediante funciones aleatorias. En ambos enfoques, se dice que el sistema está en percolación o que percola cuando una suficiente fracción de las entidades en cuestión está conectada localmente, tal que una conexión global emerge (Hunt y Ewing, 2009).

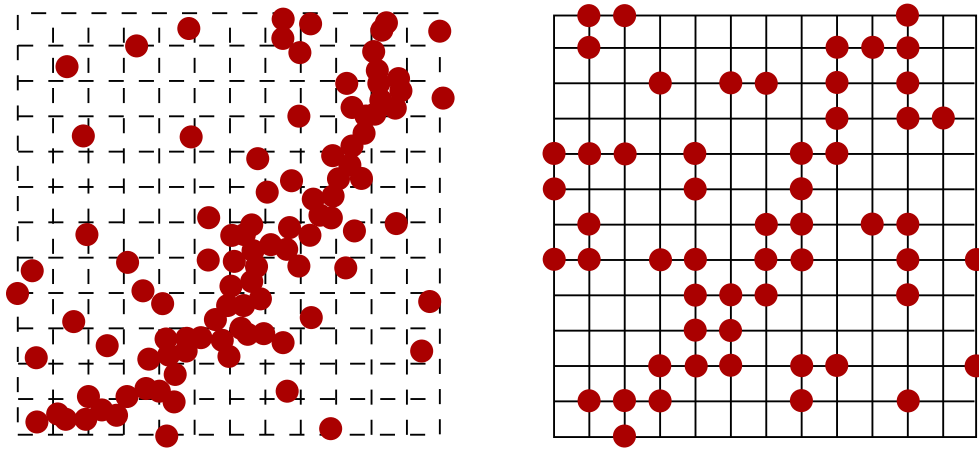


Figura B.1: Comparación de percolación continua y discreta.

Las principales vertientes del enfoque discreto son la percolación de sitios y enlaces.

Percolación de enlaces (*Bond-percolation*)

Este tipo de percolación se puede representar por una cuadrícula regular (retícula), la cual se separa a una fracción aleatoria P de los elementos de la malla. A una fracción crítica $P \equiv P_c$ la cuadrícula pierde su conectividad y se separa. La teoría de percolación plantea las siguientes interrogantes: ¿a qué fracción P la cuadrícula se desconecta?, ¿cuál es el mayor conjunto de elementos en la cuadrícula si la fracción de separación P es menor que P_c ? y ¿cuál es la estructura de tal conjunto?

Percolación de sitios (*Site-percolation*)

Un ejemplo de percolación de sitios puede ser representado por la ocupación aleatoria de esferas metálicas y de plástico de igual tamaño en un contenedor. Aquí la variable de percolación P son las esferas que son conductoras (metálicas). Si la fracción de esferas metálicas excede el valor crítico, una ruta conductora se formará.

A través de estas aplicaciones de la teoría de percolación, podemos ver que los valores de P_c varían ampliamente de un sistema a otro. Sin embargo, las mismas relaciones todavía se utilizan para determinar propiedades físicas del sistema en función de $P - P_c$. Las relaciones que son funciones de la diferencia $P - P_c$ son normalmente denominadas “universales”, lo que significa que la propiedad es independiente de los detalles del sistema y depende sólo de su dimensionalidad d .

B.2. Variables básicas y descripciones cualitativas

La variable más fundamental es la **fracción** P , la cual denota la fracción en la que un sitio/enlace puede ser ocupado. También puede representar el número de sitios/enlaces que se “conectan”, si llegan a ser vecinos más cercanos. El conjunto de sitios/enlaces que están ocupados y se conectan a sus vecinos más cercanos, se denomina **cluster**. El valor más importante de P es la **fracción crítica** P_c , que es el valor que asegura como mínimo la existencia de un cluster infinitamente largo. En un sistema infinitamente grande, los valores $P \gg P_c$ garantizan percolación, la existencia de un cluster infinitamente grande de sitios interconectados, mientras que valores $P \ll P_c$ garantiza que la percolación no se produzca.

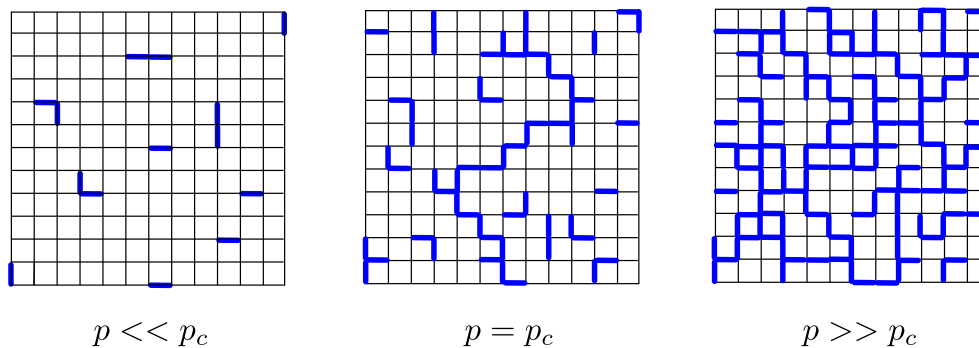


Figura B.2: Realización de un modelo de percolación para tres casos de fracción P .

Otras variables básicas son todas las funciones de la diferencia $P - P_c$. P_∞ se define como la **fracción de enlaces activos** (o sitios) para pertenecer al cluster infinito. χ es conocida como la **longitud de correlación**, la cual proporciona la extensión lineal típica del cluster más grande para $P < P_c$, y el mayor conjunto para $P > P_c$. η_s se define como la **concentración de volumen**

de los clusters de sitios o enlaces con s elementos interconectados.

Para valores muy pequeños de P los sitios/enlaces sólo se conectarán en pares con los elementos vecinos más cercanos. A medida que P aumenta, más elementos se conectarán, y poco a poco aparecerán clusters de elementos interconectados. Cuando más se acerca P a P_c , muchos de estos clusters se convierten en uno más grande, con una estructura interna más compleja. En el momento que P alcanza a P_c , el cluster interconectado más grande apenas alcanza un tamaño finito. Para P mayor pero aún cercano a P_c , la mayoría de los sitios en el cluster infinito conectado se encuentran en lo que se llama “callejón sin salida” (*dead-end*). Los callejones sin salida están conectados al resto del cluster infinito por un solo enlace, los cuales, si se sustraen de la agrupación, dan como resultado a un grupo denominado como *backbone*. El *backbone* también tiene enlaces para los que no existe ruta alterna.

B.3. Percolación de invasión

(Wilkinson y Willemsen, 1983)

Esta vertiente de la teoría de percolación fue presentada por Chandler *et al.* (1982); Lenormand y Boris (1980); Wilkinson y Willemsen (1983). La percolación de invasión tiene como objetivo sustentar procesos de desplazamiento inmisible de un fluido por otro en un medio poroso; pero, en principio, se puede aplicar a cualquier tipo de proceso de invasión que procede a lo largo de un camino de menor resistencia. La percolación de invasión es un modelo dinámico a una escala microscópica que describe procesos de desplazamiento a un gasto constante, en lugar de presión constante. Esto permite que la interfase avance al lugar de menor resistencia, en lugar de que varias interfaces se desplacen al umbral de resistencia seleccionado.

Las principales particularidades de este enfoque son:

- Los números aleatorios representan la resistencia que los sitios ofrecen al invasor, y la selección del sitio con el menor número aleatorio es equivalente a seleccionar un poro con el mayor tamaño.
- La percolación de invasión es un proceso dinámico del crecimiento de un cluster; la percolación aleatoria es cuasiestática.
- Un sitio desocupado sin vecinos ocupados no puede llegar a ser ocupado.
- Debe haber un camino continuo de sitios o enlaces ocupados, desde la fuente de invasión hasta el sitio o enlace bajo consideración.

Este nuevo enfoque de percolación considera un medio poroso idealizado como una retícula regular en la que los sitios y enlaces representan los poros y gargantas, respectivamente. Además, se incorpora el concepto de entrapamiento; una vez que un grupo de sitios desocupados es rodeado por sitios ocupados, se dice que está “atrapado” y los sitios no pueden ser invadidos.

0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31
0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64
0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76
0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94
0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09
0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69

(a) Sistema original de sitios

0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31	0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31	0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31
0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64	0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64	0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64
0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76	0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76	0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76
0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94	0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94	0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94
0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09	0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09	0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09
0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69	0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69	0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69

(b)

(c)

(d)

0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31	0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31	0.43	0.93	0.48	0.64	0.53	0.31
0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64	0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64	0.66	0.98	0.26	0.47	0.10	0.64
0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76	0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76	0.32	0.72	0.19	0.55	0.85	0.76
0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94	0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94	0.59	0.12	0.24	0.69	0.53	0.94
0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09	0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09	0.04	0.97	0.75	0.33	0.64	0.09
0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69	0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69	0.28	0.59	0.17	0.76	0.29	0.69

(e)

(f)

(g)

Figura B.3: Secuencia de percolación de invasión para $\mathbf{P} = \mathbf{0.6}$. b) Elementos admisibles o que que pueden ser ocupados para $P = 0.6$ (en rojo). c) Elementos ocupados (cuadro rosa). d)-f) Crecimiento del cluster invasor. e) El sistema percola.

Los principales fenómenos sustentados por la percolación de invasión son:

Desplazamiento del fluido no mojante por el fluido mojante

El desplazamiento se realiza a un gasto infinitesimal, lo que permite que las fuerzas capilares sean las predominantes, las cuales serán mayores en los elementos más estrechos del medio, es decir en los enlaces. Si los enlaces son más pequeños que los sitios, la interfase de los fluidos se moverá rápidamente en las gargantas, pero se detendrá en los poros más largos.

Desplazamiento del fluido mojante por el fluido no mojante

En este proceso el avance es determinado por el tamaño de las gargantas (enlaces de la red). En ausencia de entrapamiento, esta versión de enlaces puede reducirse a la versión de sitios mediante la transformación de enlaces a sitios; pero, en entrapamiento surge una diferencia debido a que es natural adoptar la convención de que un sitio es ocupado por el fluido invasor, por consiguiente cualquiera de sus enlaces serán invadidos.

Al considerar la regla de entrapamiento, la distinción entre el gasto constante y la presión constante es que en la percolación de invasión existe una sola secuencia de tiempo del avance de la interfase, y a su vez un único camino que decide si una porción del fluido desplazado resulta entrapado. En contraste, cuando deja en términos de la presión, la interfase puede avanzar a varios lugares a la vez, dando lugar a diferentes configuraciones de entrapamiento.

Las diferencias importantes entre la percolación ordinaria y la percolación de invasión (Wilkinson y Willemsen, 1983) son:

- En la percolación de invasión el invasor crece a lo largo del camino de menor resistencia y forma un cluster único. En la percolación ordinaria se pueden formar clusters desconectados.
- La percolación de invasión es un proceso dinámico, que sigue una secuencia totalmente determinista respecto al orden en que se invadirán los sitios-enlaces .

B.4. Tipos de percolación de invasión

(Wilkinson y Willemsen, 1983)

Se puede distinguir dos tipos de percolación de invasión, el primero y más empleado es la percolación de invasión con entrapamiento (*TIP* por sus siglas en inglés), en donde un grupo de sitios desocupados es rodeado por sitios ocupados, formando así regiones aisladas de sitios desocupados -ver Fig. B.4-. El otro modelo es la percolación de invasión sin entrapamiento (*NTIP*).

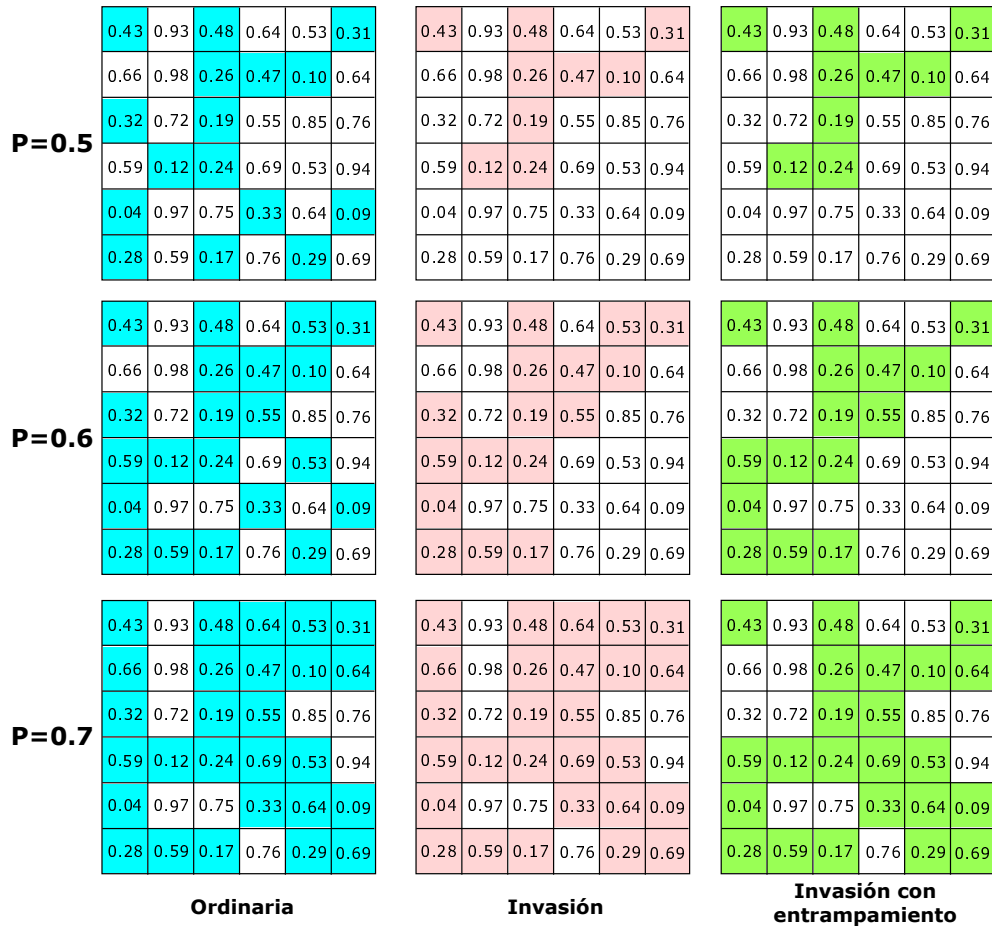


Figura B.4: Percolación. Comparación entre la percolación ordinaria, percolación de invasión y percolación de invasión con entrapamiento. La invasión es desde arriba y los sitios ocupados están sombreados. Los números de los cuadros denotan las probabilidades de invasión de cada sitio, mientras que los números del lado izquierdo inferior se refieren a la probabilidad de ocupación del sistema. (Berkowitz y Ewing, 1998)

Bibliografía

- AKER, E., MALOY, K., HANSEN, A., Y BATROUNT, G. A two-dimensional network simulator for two-phase flow in porous media. *Transport in Porous Media* (32):163–186 (1998) 6
- ANTOINE, C. Vapor Pressure: a new relationship between pressure and temperature. *Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sciences (in French)* (107):681–684, 778–780, 836–837 (1888)
- ARNS, J., ROBINS, V., SHEPPARD, A., SOK, R., PINCZEWSKI, W., Y KNACKSTEDT, M. Effect of network topology on relative permeability. *Transp Porous Med* (55):21–46 (2004) 12, 53
- AYALA, C. Estimación del umbral de percolación en modelos de redes de fracturas discretas en medios porosos naturalmente fracturados (2014) 76
- BEAR, J. *Dynamics of fluids in porous media*. 1ª edición. Elsevier (1972) 3
- BERKOWITZ, B. Y EWING, R. Percolation theory and network modeling applications in soil physics. *Surveys in Geophysics* (19):23–72 (1998) 5, 81
- BIRD, R., STEWART, W., Y LIGHTFOOT, E. *Transport Phenomena*. 2ª edición. John Wiley & Sons (2002)
- BLUNT, M. Three-phase relative permeability. *Society of Petroleum Engineers SPE* (101451):1–34 (2001) 25
- BLUNT, M., BIJELJIC, B., DONG, H., GHARBI, O., IGLAUER, S., Y MOSTAGHAMI, P. Pore-scale imaging and modeling. *Advances in Water Resources* (51):197–216 (2013) 7, 22, 23, 24
- BLUNT, M. AND JACKSON, M., PIRI, M., Y VALVATNE, P. Detailed physics, predictive capabilities and macroscopic consequences for pore-network models of multiphase flow. *Advances in Water Resources* (25):1069–1089 (2002) 6, 7

- BROADBENT, S. Y HAMMERSLEY, J. Percolation processes. I. Crystals and mazes. *Proc. Camb. Philos.Soc.* **629**(53) (1957) 5, 75
- BRYANT, S., KING, P., Y MELLOR, D. Network model evaluation of permeability and spatial correlation in a real random sphere packing. *Transport Porous Media* (11):53–70 (1993)
- CELIA, M. Y REEVES, P. Recent advances in pore scale models for multiphase flow in porous media. *Reviews of geophysics* (248):1049–1057 (1995) 6
- CHANDLER, R., KOPLIK, J., LERMAN, K., Y WILLEMSSEN, J. Capillary displacement and percolation in porous media. *J. Fluid Mech.* **119**:248–267 (1982) 5, 78
- CHU, J., ENGQUIST, B., PRODANOVIC, M., Y TSAI, R. A multiscale method coupling network and continuum models in porous media I págs. 1–33 (2011)
- CRANK, J. *The Mathematics of diffusion*. 2^a edición. Oxford University Press (1975)
- DIAS, M. Y WILKINSON, D. Percolation with trapping. *J. Phys A: Math. Gen.* (19):3131–3146 (1986) 5
- DÍAZ-VIERA, M. *Método sistemático para la formulación de los modelos de medios continuos*. Instituto Mexicano del Petróleo. (2010) 71
- DIXIT, A.B.AND BUCKLEY, J., MCDUGALL, S., Y SORBIE, K. Empirical measures of wettability in porous media and the relationship between them derived from pore-scale modelling. *Transport Porous Media* pág. 27–54 (2000)
- DONG, H. Micro-ct imaging and pore network extraction (2007) 53, 67, 69
- DONG, H. Y BLUNT, M. Pore-network extraction from micro-computerized-tomography images. *Physical Review* (80):1–10 (2009) 7
- DULLIEN, F. *Porous media fluid transport and pore structure*. 1^a edición. Academic Press (1979)
- ERZEYBEK, S. Pore network modelling of fissured and vuggy carbonates. *LNP 600* (51(2013)):75–92 (2008)
- FATT, I. The network model of porous media 1: Capillary pressure characteristics. *Society of Petroleum Engineers SPE* (574):1–38 (1956) 5
- FLORY, P. Molecular size distribution in three dimensional polymers. I. Gelation. *J. Am. Chem. Soc.* (3083) (1941) 75
- GOSTICK, J.T., IOANNIDIS, M., FOWLER, M., Y PRITZKER, M. Pore network modeling of fibrous gas diffusion layers for polymer electrolyte membrane fuel cells. *Journal of Power Sources* (177):277–290 (2007) 36, 38, 39, 41, 69

- GOSTICK, J.T., FOWLER, M.W., IOANNIDIS, M.A., PRITZKER, M.D., VOLFKOVICH, Y., Y SAKARS, A. Capillary pressure and hydrophilic porosity in gas diffusion layers for polymer electrolyte fuel cells. *Journal of Power Sources* **156**(2):375 – 387 (2006) 33, 38
- HEIBA, A., SAHIMI, M., SCRIVEN, L., Y DAVIS, H. Percolation theory of two-phase relative permeability. *Society of Petroleum Engineering (SPE)* (16):123–132 (1992)
- HILPERT, M. Y MILLER, C. Pore-morphology-based simulation of drainage in totally wetting porous media. *Adv. Water. Resour.* pág. 243–255 (2001)
- HUNT, A. Y EWING, R. Percolation theory for flow in porous media. *Lecture notes in physics. Springer* (2009) 5, 75, 76
- IMPERIAL COLLEGE. Imágenes de microtomografía computarizada de la arenisca S1_Sandstone. <https://goo.gl/vFSNAf> (2016a). [En línea; 19-10-2015] 54
- IMPERIAL COLLEGE. Pore scale modelling consortium. <https://goo.gl/HWM4fU> (2016b). [En línea; 21-01-2016] 53
- IOANNIDIS, M. Y CHATZIS, I. Network modelling of pore structure and transport properties of porous media. *Chemical Engineering Science* (5):951–972 (1993) 6, 25, 27, 43, 44, 47, 48, 49, 52
- JAMIESON, D.T. Y TUDHOPE, J.S. Physical properties of sea water solutions: thermal conductivity. *Desalination* **8**(3):393–401 (1970)
- JIA, L., ROSS, C., Y KOVSCEK, A. A pore network modeling approach to predict petrophysical properties of diatomaceous reservoir rock. *Society of Petroleum Engineers SPE* (93806):1–12 (2005)
- KETCHAM, R. Y CARLSON, W. Acquisition, optimization and interpretation of X-ray computed tomographic images: applications to the geosciences. *Computers & Geosciences* (27):381–400 (2001)
- LAO, H. Y NEEMAN, H. A pore network model for the calculation of non-Darcy flow coefficients in fluid flow through porous media. *Chem. Eng. Comm.* (191):1285–1322 (2003)
- LARSON, R., SCRIVEN, L., Y DAVID, H. *Nature* (268):409 (1977)
- LARSON, R., SCRIVEN, L., Y DAVID, H. *Chemical Engineering Science* (36):57 (1981a)
- LARSON, R., SCRIVEN, L., Y DAVID, H. Displacement of residual nonwetting fluid from porous media. *Chemical Engineering Science* (36):75–85 (1981b) 6
- LEMMON, E. Y JACOBSEN, R. Viscosity and thermal conductivity equations for nitrogen, oxygen, argon, and air. *Int. J. of Thermophysics* **25**(1):21–69 (2004)

- LENORMAND, R. Y BORIS, S. *Acad. Sci.* (B291):279 (1980) 5, 78
- LENORMAND, R., ZARCONEADA, C., Y SARR, A. Mechanisms of the displacement of one fluid by another in a network of capillary ducts. *J. Fluid Mech.* (135):337–353 (1983) 5
- LOPEZ, X., VALVATNE, P., Y BLUNT, M. Predictive network modeling of single-phase non-newtonian flow in porous media. *Journal of Colloid and Interface Science* (264):256–265 (2003)
- LU, C. Y YORTSOS, Y. A pore-network model of in-situ combustion in porous media. *Society of Petroleum Engineers SPE* (69705):1–16 (2001) 6
- MAN, H. Y JING, X. Pore network modelling of electrical resistivity and capillar pressure characteristics. *Transport in Porous Media* (41):263–286 (2000) 6
- MASON, G. Y MORROW, N. Effect of contact angle on capillary displacement curvatures in pore throats formed by spheres. *Journal of Colloid and Interface Science* (168):130–141 (1994)
- NELLIS, G. Y KLEIN, S. *Heat transfer*. 1ª edición. Cambridge University Press (2009)
- OKABE, H. Y BLUNT, M. Pore space reconstruction using multiple-point statistics. *Journal of Petroleum Science and Engineering* (46):121–137 (2004) 23
- OLIVELLA, X. *Mecánica de medios continuos para ingenieros*. Segunda edición. Edicions UPC (2002) 71
- OPENPNM. *OpenPNM: An Open Source Pore Network Modeling Package* (2016). Versión: 1.4, <http://openpnm.org/>, [24-01-2016] 19
- OREN, P., BAKKE, S., Y ARNTZEN, O. Extending predictive capabilities to network models. *Society of Petroleum Engineers SPE* (52052):324–336 (1998) 6
- OREN, P. Y BAKKE, S. Reconstruction of Berea sandstone and pore-scale modelling of wettability effects. *J. Petroleum Sci. Eng.* pág. 177–199 (2003)
- REEVES, P. Y CELIA, M. A functional relationship between capillary pressure, saturation, and interfacial area as revealed by a pore scale network model. *Water Resour. Res.* pág. 2345–2358 (1996)
- ROOF, A. Y HASSANIZADEH, S. A new method for generating pore-network models of porous media. *Transp Porous Med* (81):391–407 (2010) 1, 3
- ROOF, A., NICK, H., HASSANIZADEH, S., Y SPIERS, C. PoreFlow: A complex pore-network model for simulation of reactive transport in variably saturated porous media. *Computers & Geosciences* (61):160–174 (2013) 10

- SAHIMI, M. Y TSOTSIS, T. *J. Catal.* (96):552 (1982) 6
- SAHIMI, M. *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*. 2^a edición. Wiley-VCH (2011) 2, 9, 17, 18, 71
- SHARQAWY, M.H., LIENHARD, J.H., Y ZUBAIR, S.M. Thermophysical properties of seawater: A review of existing correlations and data. *Desalination and Water Treatment* (16):354–380 (2010)
- SILIN, D. Y PATZEK, T. A pore-scale model of two-phase flow in water-wet rock págs. 1–32 (2009) 5, 6
- STOCKMAYER, W. Theory of molecular size distribution and gel formation in branched-chain polymers. *J. Chem. Phys.* (45) (1943) 75
- TANSEY, J. Pore network modeling of carbonate acidization. *Society of Petroleum Engineers SPE* (173472):1–10 (2014)
- TOMEKZEK, J. Y MLONKA, J. The parameters of a random pore network with spherical vesicles for coal structure modeling. *Fuel* **77**(15):1841–1844 (1998) 6
- VALVATNE, P., PIRI, M., LOPEZ, X., Y BLUNT, M. Predictive pore-scale modeling of single and multiphase flow. *Transp Porous Med* (58):23–41 (2005)
- VAN DIJKE, M., SORBIE, K., Y MCDUGALL, S. Saturation-dependencies of three-phase relative permeabilities in mixed-wet and fractionally wet systems. *Adv. Water. Resour.* pág. 365–384 (2001)
- WANG, X. Y MOHANTY, K. Pore-network model of flow in gas-condensate reservoirs. *Society of Petroleum Engineering (SPE)* pág. 426–34 (2000)
- WHITE, F. *Fluid Mechanics*. Seventh edición. McGraw-Hill (2009) 71
- WILKINSON, D. Y WILLEMSSEN, J. Invasion percolation: a new form of percolation theory. *Journal Physics* (16):3365–3376 (1983) 78, 80