

Sesión especial

**Los medios porosos en Ciencias de  
la Tierra: Desarrollos y aplicaciones  
en México (Reunión Anual del  
Capítulo Mexicano de Interpore)**

Organizadores:

Graciela Herrera Zamarrón  
Eric Morales Casique  
Martín Díaz Viera

SE07-1

### MODELO MATEMÁTICO PARA LA SIMULACIÓN DE UNA CELDA CINÉTICA EN EXPERIMENTOS DE INYECCIÓN DE AIRE

Aguilar Madera Carlos Gilberto, Molina Espinosa Lázaro,  
Soto Villalobos Roberto y Briones Carrillo Jorge Alberto  
Universidad Autónoma de Nuevo León, UANL  
carlos\_aguilarmadera@hotmail.com

En este trabajo se plantean las ecuaciones gobernantes para modelar el proceso de combustión de petróleo en una celda cinética. Tales experimentos son llevados a cabo para la obtención de parámetros cinéticos de reacción. Los cuales se utilizan posteriormente para evaluar el proceso de inyección de aire como método de recuperación mejorada en yacimientos de petróleo. La formulación matemática incluye cuatro fases (agua, aceite, gas y sólido), nueve componentes y/o pseudo-componentes y cuatro reacciones químicas. Se plantean los balances de masa y energía y se resuelven utilizando rutinas de Matlab. Comparaciones con experimentos de laboratorio publicados en la literatura, muestran que las producciones de CO, CO<sub>2</sub>, la evolución de la temperatura de la celda, y el consumo de oxígeno son predichas cercanamente por el modelo matemático. El modelo así validado, permite estimar el comportamiento de otras variables difíciles de medir en el laboratorio y que son de gran utilidad en la Ing. Petrolera como son: la cantidad de coque producido y la cantidad de petróleo consumido. La validación del modelo matemático también permitió la estimación de los diferentes parámetros cinéticos involucrados en las ecuaciones.

SE07-2

### MODELACIÓN DE LA EMULSIFICACIÓN DURANTE EL FLUJO BIFÁSICO INMISCIBLE EN SISTEMAS PORO-GARGANTA

Quevedo Tiznado José Antonio<sup>1</sup>, Fuentes Ruiz Carlos<sup>2</sup>, Olechko Klavdia<sup>3</sup> y Mota Juan Carlos<sup>4</sup>  
<sup>1</sup>Laboratorio de micro-hidrodinámica y medios porosos (Pontificia Universidad Católica de Rio de Janeiro)  
<sup>2</sup>Instituto Mexicano de Tecnología del Agua  
<sup>3</sup>Centro de Geociencias, Universidad Autónoma de México  
<sup>4</sup>Universidad Autónoma de México  
toniokv2@gmail.com

La modelación de un yacimiento petrolero es de fundamental importancia en la producción de hidrocarburos. En el yacimiento se presenta de manera simultánea el movimiento de agua, gas y petróleo, en un medio poroso. En este trabajo se presenta la modelación numérica del fenómeno de rompimiento de gota conocido como snap-off, el cual es uno de los principales mecanismos de formación de emulsiones durante el flujo bifásico en medios porosos. Este fenómeno, snap-off, es una inestabilidad interfasial que ocurre cuando en un sistema bifásico el fluido no mojanete pasa a través de una constricción, como una garganta de poro, y la tensión superficial no es suficiente para mantener íntegra la capa de este fluido. El rompimiento de gota es analizado mediante la resolución numérica de una ecuación de evolución que describe el cambio del radio de interfase durante el flujo de dos fases inmiscibles en un sistema sinusoidal de poros garganta. Este modelo está basado en las ecuaciones de conservación y la teoría de lubricación para fluidos newtonianos a escala de poro. Las ecuaciones básicas para el modelo son las ecuaciones de Navier-Stokes simplificadas y las leyes de conservación, la continuidad y Young-Laplace. En este modelo el rompimiento de gota se produce cuando un punto del radio de interfase alcanza el eje de las abscisas. Se utilizaron configuraciones realistas de sistemas poro-garganta construidas con información de doce redes de poros de dos tipos de rocas: Sandstones y Sandpacks. Las redes a escala utilizadas representan topológicamente el medio poroso, y fueron construidas por el Consorcio en Modelación a Escala de Poro del Imperial College a partir de experimentos en muestras de núcleos y técnicas de Micro-Tomografía Computacional. Durante las simulaciones realizadas se utilizaron valores de número capilar representativos de regímenes de flujo reportados en experimentos físicos sobre emulsificación en medios porosos. Los resultados de las simulaciones muestran que existen una ley de potencia entre la geometría del sistema poro-garganta y el tiempo de ruptura. Se realizó también un análisis de sensibilidad para evaluar la variación en los tiempos de ruptura cuando se modifican algunos parámetros reológicos y físicos.

SE07-3

### OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS DE SILICIO POROSO

Estrada Denise<sup>1</sup>, Del Río J. Antonio<sup>2</sup> y Del Río-Chanona Ehécatl Antonio<sup>3</sup>  
<sup>1</sup>Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, UAEM  
<sup>2</sup>Instituto de Energías Renovables, UNAM  
<sup>3</sup>Department of Chemical Engineering and Biotechnology, University of Cambridge  
deesw@ier.unam.mx

El uso de espejos altamente reflectivos es común en aplicaciones de concentración solar. Se ha mostrado que los espejos fotónicos son viables para este propósito, sin embargo, absorben radiación y se degradan a pesar de su alta reflectividad.

Para subsanar este problema proponemos optimizar la reflectancia de los espejos basados en un método estocástico de búsqueda global. Presentamos un procedimiento de optimización para diseñar estructuras fotónicas que reflejan un amplio rango del espectro y las fabricamos con multicapas de Silicio Poroso. La estructura de los espejos está compuesta por un arreglo continuo de subespejos donde cada uno refleja una longitud de onda central y dependen del índice de refracción de las capas, mismas que controlamos variando la porosidad del Silicio Poroso. Nuestro método consiste en distribuir las longitudes de onda centrales siguiendo una relación basada en el aproximante de Padé y simulamos la reflectancia de los espejos tomando en cuenta la absorción del Silicio Poroso. Con la ventaja de proporcionar diversos arreglos óptimos para el diseño de un espejo, con este método se mejoran significativamente los tiempos de fabricación de las estructuras fotónicas, proporcionando además un método que puede utilizarse con otros materiales y técnicas de fabricación. Con este procedimiento hemos logrado fabricar espejos de Silicio Poroso de alta calidad que pueden ser usados para aplicaciones de concentración solar u otras.

SE07-4

### ALGUNAS APLICACIONES DE LA MODELACIÓN ESTOCÁSTICA EN AGUAS SUBTERRÁNEA

Herrera Zamarrón Graciela del Socorro  
Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM  
ghz@geofisica.unam.mx

En esta plática se dará un panorama de aplicaciones realizadas por la autora y sus colaboradores de modelación estocástica en aguas subterráneas usando modelos de flujo y transporte, incluyendo la estimación de parámetros y el diseño óptimo de redes de monitoreo. Se presentarán resultados de estas aplicaciones a diversos casos de estudio.

SE07-5

### COMPARACIÓN DE ENFOQUES ESTOCÁSTICOS PARA LA ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS Y LA PREDICCIÓN DEL FLUJO EN AGUAS SUBTERRÁNEAS

Briseño Ruiz Jessica Vanessa<sup>1</sup>, Hernández Abel F.<sup>2</sup>, Morales-Casique Eric<sup>1</sup>, Herrera Graciela S.<sup>3</sup> y Escolero-Fuentes Oscar<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Instituto de Geología, Universidad Nacional Autónoma de México  
<sup>2</sup>Gerencia de Geoterminia, Instituto de Investigaciones Eléctricas  
<sup>3</sup>Instituto de Geofísica, Universidad Nacional Autónoma de México  
brisenorjv@geologia.unam.mx

Caracterizar la variabilidad espacial de las propiedades hidráulicas de los sistemas de agua subterránea es esencial para simular los fenómenos de flujo mediante la construcción de modelos. Las ecuaciones que gobiernan el flujo del agua subterránea dependen de parámetros que representan las propiedades de los entornos geológicos. En las últimas décadas, el reconocimiento de la gran variabilidad espacial de estas propiedades, ha hecho común su descripción a través de campos aleatorios espacialmente correlacionados. Por otro lado las condiciones iniciales y de frontera para estas ecuaciones también se calculan usando métodos y mediciones que producen estimaciones inciertas. Cuando las propiedades del medio, las condiciones iniciales o de frontera son aleatorias, las ecuaciones de flujo y transporte se convierten en estocásticas. Un problema importante es la forma de estimar los parámetros de estas ecuaciones estocásticas. En este sentido, este trabajo presenta una comparación de tres enfoques para estimar la conductividad hidráulica y el flujo de agua subterránea al utilizar un modelo en estado estacionario. Dos de los enfoques se basan en la técnica de asimilación de datos conocido como filtro de Kalman ensamblado (EnKF) y difieren en la forma en que se obtienen las estimaciones previas de los momentos estadísticos (EPME). En el primer enfoque, se emplea el método de Monte Carlo para calcular las EPME de las variables y parámetros; denotamos este enfoque por EnKFMC. En el segundo enfoque las EPME se calculan a través de la solución directa de las ecuaciones de momento (integro-diferenciales) que gobiernan las medias de ensamble y covarianzas de la carga hidráulica y los flujos condicionados; denotamos este enfoque por EnKFME. El tercer enfoque consiste en la inversión estocástica geoestadística de las mismas ecuaciones de momento; denotamos este enfoque por IME. Además, en este trabajo se presentan dos algoritmos alternativos para estimar la conductividad hidráulica únicamente en algunas posiciones y posteriormente interpolar sobre todos los elementos de la malla empleando kriging. Denotamos estos enfoques como EnKFME-K y EnKFMC-K. Los métodos se probaron para estimar la conductividad hidráulica y el flujo de aguas subterráneas en un modelo con dominio bidimensional y un pozo de bombeo. En el proceso de estimación se emplearon 20 mediciones de flujo y 9 de conductividad hidráulica. Para evaluar el desempeño de los métodos de estimación, se generaron cuatro diferentes realizaciones no condicionadas de la conductividad hidráulica que sirvieron como mediciones "reales". Los resultados de nuestros experimentos indican que los tres métodos fueron efectivos para estimar el flujo de agua subterránea; con respecto a la estimación de la conductividad hidráulica los tres métodos alcanzaron una precisión similar en términos de la capacidad predictiva. Los resultados de la implementación de los algoritmos alternativos, indican que los dos métodos EnKFME-K y EnKFMC-K fueron efectivos en la estimación de la conductividad hidráulica y del flujo de agua subterránea, reduciendo a una cuarta parte el tiempo del CPU necesario en el proceso de asimilación de

datos, mientras que tanto la precisión de la estimación y de la incertidumbre no se deterioran significativamente.

SE07-6

### ADSORCIÓN EN MEDIOS POROSOS: UN MODELO DE DOS FASES

Hansen Anne M.  
Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, IMTA  
ahansen@tlaloc.imta.mx

Muchos procesos físicos y químicos ocurren entre fases y frecuentemente se subestiman estos fenómenos aunque las superficies juegan un importante papel en las Ciencias de la Tierra. Datos experimentales señalan que la sorción de contaminantes ocurre en tiempos relativamente cortos, pero que puede tomar más tiempo establecerse condiciones de equilibrio. En este estudio se realizaron experimentos de sorción de cobalto en sedimento marino. Se observaron dos dependencias con el tiempo: un paso rápido que alcanza equilibrio en 5 – 10 d, mientras que el paso más lento continuó por más de 100 d. El comportamiento observado fue simulado con un modelo cinético, que describe estos pasos. Se consideró que el paso rápido se debe a la difusión de cobalto a la superficie externa y los macroporos del adsorbente y la adsorción en sitios superficiales, mientras que el paso lento se describió como la difusión de cobalto y adsorción en sitios localizados dentro de los microporos. El paso rápido, que es mucho más lento que la encontrada para adsorbentes no porosos y para adsorbentes de una sola fase, se debe probablemente a una combinación de pasos secuenciales con un proceso limitante más lento. Posibles procesos limitantes incluyen difusión en macro- y meso-poros y reacción de adsorción/desorción dentro de los poros. El paso lento, que se extiende durante varios meses, es probablemente resultado del limitada transporte interno de cobalto en micro- y meso-poros hacia sitios de adsorción de difícil acceso. Se desarrolló un modelo cinético de dos fases, se calcularon los coeficientes de transferencia de masa y las variaciones de estos en función de la salinidad de la solución y la presencia de carbonatos en el sedimento. Se concluyó que la fuerza iónica de la solución reduce el grado de adsorción inicial de cobalto en el sedimento y que calcita influye parcialmente sobre la sorción de cobalto. Probablemente se debe la lenta sorción a una combinación de limitaciones de procesos de transporte y de reacción con calcita en el sedimento. Además, la diferencia observada para soluciones de un electrolito simple y de agua de mar, indica competencia de cationes mayores en el agua de mar por los sitios de adsorción en la superficie del sedimento, y de aniones mayores en la formación de complejos disueltos de cobalto. Ambos tipos de competencia pueden retrasar la sorción de cobalto en sedimentos porosos. Asimismo, los resultados sugieren que calcita tiene mayor influencia en sistemas relativamente simples mientras que para mayor complejidad del electrolito, la composición de la fase líquida es el factor de control. Combinando teoría de complejación superficial de triple capa con cinéticas de adsorción, se pudo explicar el proceso de sorción en función de la composición de la solución y de las características de la fase sólida.

SE07-7

### MÉTODO DE DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIO APLICADO A FLUJO Y TRANSPORTE SUBTERRÁNEO

Hernandez Garcia Guillermo de Jesus  
Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM  
ghdez@geofisica.unam.mx

El método de descomposición de dominio, DDM, ha sido investigado recientemente por varios autores para problemas bidimensionales y tridimensionales elípticos y parabólicos. El DDM es una manera más eficaz de aplicar el procesamiento en paralelo a la solución de ecuaciones diferenciales parciales; este trabajo presenta un DDM no superpuesto: el 'espacio vectorial derivado', DVS, introducido recientemente (Herrera et al., 2008-2014) que provee un marco adecuado para el tratamiento unificado por el DDM no superpuesto de sistemas simétricos, no-simétricos e indefinidos. El DVS es un espacio lineal de dimensión finita, que es una realización de un espacio producto. Constituye un espacio de Hilbert con respecto a un producto interno definido independientemente de las ecuaciones diferenciales parciales para ser tratados. También es un escenario que existe por sí mismo independientemente de los problemas considerados y puede ser utilizado como un marco en el que cualquier problema puede ser definido y en su ámbito también puede ser tratado por cualquier método. Por lo tanto, el DVS es un escenario adecuado para el desarrollo de una teoría unificadora general del DDM no superpuesto. En ella, se pueden tratar sistemas no-simétricos e indefinidos. En el marco DVS cuando un método de discretización se aplica, el problema original se transforma en otro equivalente definido en el DVS, que es un espacio de producto, y todo el trabajo se lleva a cabo en él, y no como en otras formulaciones. La aplicación de este método y los diferentes métodos numéricos, al flujo y transporte en medios porosos, hace posible obtener una eficiente paralelización de las ecuaciones que gobiernan en problemas con advección dominante. Por otro lado, el movimiento tridimensional de agua subterránea de densidad constante en un medio poroso heterogéneo y anisotrópico es descrito por una ecuación diferencial parcial parabólica, cuya solución es resuelta por un código bien conocido. En este trabajo se propone aplicar DVS a la solución en paralelo de problemas de flujo.

SE07-8

### UN CÓDIGO COMPUTACIONAL (SOFTWARE) MUY EFICIENTE PARA EJECUTAR MODFLOW EN SUPERCOMPUTADORAS EN PARALELO

Lemus García Marian, Herrera Zamarrón Graciela,  
Herrera Revilla Ismael y Hernández García Guillermo  
Universidad Autónoma de México, UNAM  
marianlegar24@gmail.com

MODFLOW es un modelo de flujo de aguas subterráneas basado en diferencias finitas en tres dimensiones. Por décadas MODFLOW ha sido ampliamente utilizado para diversos problemas de aguas subterráneas presentando resultados satisfactorios en problemas relativamente simples. Sin embargo, existen problemas en los que el uso de MODFLOW y otros simuladores, en su forma tradicional, requiere de un gran esfuerzo computacional; por ejemplo, aquellos que utilizan dominios grandes y mallas detalladas, así como los de la estimación de parámetros y de la evaluación de la incertidumbre, pues ellos requieren de la ejecución de múltiples simulaciones. En estos casos la computación de alto rendimiento, especialmente el cómputo en paralelo, permite mejorar la eficiencia de los modelos de aguas subterráneas. Esto, que es válido en general para una clase muy amplia de ese tipo de modelos lo es en particular para MODFLOW y esta plática describe un proyecto, cuyo objetivo es producir un código que permita aplicar MODFLOW utilizando de manera muy eficiente las grandes supercomputadoras altamente paralelizadas disponibles hoy en día. Para lograr este objetivo se utiliza una nueva metodología debida a I. Herrera -los algoritmos DVS, por sus siglas en inglés: derived-vector space-, recientemente introducida [1], que han demostrado tener la capacidad de producir eficiencias de paralelización muy altas, cercanas a 1 (del orden de 90% [2]). En este trabajo se presentan los significativos avances habidos en este ambicioso proyecto. [1]. Herrera, I., de la Cruz L.M. and Rosas-Medina A. "Non Overlapping Discretization Methods for Partial, Differential Equations". NUMER METH PART D E, 30: 1427-1454, 2014, DOI 10.1002/num 21852. (Open source) [2]. Herrera, I., & Contreras Iván "An Innovative Tool for Effectively Applying Highly Parallelized Software To Problems of Elasticity". Geofísica Internacional, 55(1), 2015 (Open source)

SE07-9 CARTEL

### SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FLUJO EN YACIMIENTOS DE GAS-SHALE

De León Jasso Brayan Eduardo, Aguilar Madera Carlos Gilberto, Soto Villalobos Roberto, Briones Carrillo Jorge y Molina Espinosa Lazaro  
Universidad Autónoma de Nuevo León  
brayan.dejs@uanl.edu.mx

En este trabajo se presenta la simulación numérica del flujo de gas en rocas de lutita fracturadas. Se plantean las ecuaciones gobernantes considerando flujo monofásico con desorción y utilizando fracturas discretas. El modelo matemático se resolvió en un resolutor comercial basado en elemento finito. Los resultados numéricos pertinentes se compararon con datos de campo disponibles de la literatura mostrando un buen ajuste en general. Este trabajo se complementará en un futuro incluyendo más fenómenos físicos al modelo como son: flujo trifásico (agua, aceite y gas), fracturas con apertura dependiente del tiempo y uso de ecuaciones de estado termodinámicas.

SE07-10 CARTEL

### ANÁLISIS DE UN MODELO CONCEPTUAL DE LA FORMACIÓN DE DEPÓSITOS ESTRATIFORMES DE COBRE EN EL YACIMIENTO DE SAN MARCOS, COAHUILA.

Luna Andrade Mónica Azucena, Herrera Zamarrón Graciela y Canet Carles  
IGEOF, UNAM,  
monicaa.luna@gmail.com

En este trabajo se analiza un modelo conceptual para la formación de los depósitos de cobre de San Marcos en Coahuila. En una publicación anterior (García-Alonso, et al.), se propone un modelo conceptual en el que se supone que en la cuenca sedimentaria existieron salmueras hidrotermales capaces de lixiviar y transportar grandes cantidades de cobre, éstas ascendieron por convección a través del medio poroso desde lo profundo y a través de la falla sinsedimentaria de San Marcos y al pasar a través del límite redox marcado por la transición de los lechos rojos a grises se dio la precipitación del cobre. Un factor fundamental en dicho modelo es la convección de las salmueras hidrotermales, sin embargo, no es clara la razón por la que se da esta convección, por ese motivo en este trabajo se formulan varias hipótesis para justificar la generación de la misma en el medio poroso. Teniendo estas hipótesis bien justificadas se podrá realizar una modelación matemática y numérica para verificar o descartar dichas hipótesis. (García-Alonso, Donají; Canet, Carles; González-Partida, Eduardo; Villanueva-Estrada, Ruth Esther; María Prol-Ledesma, Rosa; Alfonso, Pura; Caballero-Martínez, Juan Antonio; Lozano-Santa Cruz, Rufino. The Cretaceous sediment-hosted copper deposits of San Marcos (Coahuila, Northeastern Mexico): An approach to ore-forming processes. Journal of South American Earth Sciences, v. 31, iss. 4, p. 432-443).