

UNIVERSIDAD  
**NACIONAL**  
DE COLOMBIA

# **Desarrollo de un Modelo Probabilístico de Flujo de Materia y Transporte de Escalares en Yacimientos de Hidrocarburos Sometidos a Inyección de Nanofluidos.**

**Eduin Alexander López Patiño**

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Minas, Escuela de Procesos y Energía  
Medellín, Colombia  
2020



# **Desarrollo de un Modelo Probabilístico de Flujo de Materia y Transporte de Escalares en Yacimientos de Hidrocarburos Sometidos a Inyección de Nanofluidos.**

**Eduin Alexander López Patiño**

Tesis de investigación presentada como requisito parcial para optar al título de:  
**Doctor en Ingeniería**

Director:

Ph.D. JUAN MANUEL MEJÍA CARDENAS

Codirector:

Ph.D. FARID CHEJNE JANNA

Línea de Investigación: Modelos multifísicos y procesos estocásticos

Grupo de Investigación:

Dinámicas de Flujo y Transporte en Medios Porosos

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Escuela de Procesos y Energía

Medellín, Colombia

2020



*(Dedicatoria o lema)*

*Agradezco a mis parientes quienes soportan los percances relacionados a la ausencia de no dedicarles el tiempo suficiente.*

*Este trabajo lo realizo a la memoria de mi familia quienes siempre me brindaron sus mejores deseos para conmigo.*

*Agradezco a Dios y Arcángeles por permitir disfrutar de la vida en sus diferentes facetas.*

*Gracias a todos.*



## **Agradecimientos**

La presente Tesis es un esfuerzo en el cual, directa o indirectamente, participaron diferentes personas nutriendo y acompañando dicho proceso.

Agradezco al PhD. Juan Manuel Mejía Cárdenas y al PhD. Farid Chejne Janna por la credibilidad que depositaron en mí, por la paciencia, por sus directrices frente al trabajo realizado y por todos los aportes que dan como resultado este estudio.

Agradezco a mis parientes quienes soportan los percances relacionados a la ausencia de no dedicarles el tiempo suficiente.

Este trabajo lo realizo a la memoria de mi familia quienes siempre me brindaron sus mejores deseos para conmigo.

Agradezco a Dios y Arcángeles por permitir disfrutar de la vida en sus diferentes facetas.

Finalmente, agradezco a la Universidad Nacional Sede Medellín por sustentar mi permanencia en ésta y brindarme los espacios y recursos apropiados para llevar a buen término este trabajo.

Gracias a Todos.



## Resumen

Durante la última década, la inyección de nanofluidos en yacimientos de hidrocarburos como técnica de recobro mejorado de petróleo (EOR) ha tenido un interés creciente. Específicamente, al aplicar esta técnica, se busca entre otras, mejorar la movilidad del hidrocarburo, cambiar la humectabilidad de la matriz de aceite a agua, incrementar la cantidad de saturados y aromáticos a expensas de los asfáltenos que se encuentren en el hidrocarburo mejorado (El-Diasty & Aly, 2015). En general, se ha encontrado que la inyección de nanofluidos ha mejorado el recobro hasta en valores 10%. Por tanto, se hace relevante generar un modelo fenomenológico que permita la descripción del sistema y la obtención de información pertinente sobre el proceso.

Lo novedoso del estudio del problema de inyección de nanofluidos, es que propone un modelo híbrido determinista / probabilista, el cual presenta en su desarrollo dos marcos de referencia. De un lado, un marco Euleriano, donde se considera el transporte de masa de las fases fluidas presentes en el medio poroso y la energía de forma determinista y de otro lado, un marco Lagrangiano, que inicialmente considera una función de densidad de probabilidad que evoluciona a través de la ecuación de Fokker-Planck, otorgándole al modelo de la componente probabilista. Aquí, la parte Lagrangiana emerge de la solución de la ecuación de probabilista que se obtenga al encontrar las PDF marginales. Por ejemplo, si se encuentra la marginal en el espacio de la posición, se obtiene la ecuación de Fokker – Planck se convierte en la ecuación de advección-difusión probabilística. Ahora para dar solución a esta ecuación de advección-difusión, se utiliza un método Lagrangiano. En el caso particular del estudio se utilizó el método de partículas estocásticas SPM.

Algunos de los resultados obtenidos con este trabajo son: primero, se logra la extensión del SPM a la descripción de componentes como trazadores y nanopartículas, dotándolo de modelos que consideran fenómenos de no equilibrio como retención / movilización.

Además se valida el modelo de transporte probabilista usando un simulador comercial y datos experimentales. Adicionalmente, el modelo es aplicable bajo condiciones de flujo multifásico, multidimensional y no-isotérmico.

Dentro de las conclusiones obtenidas de este estudio se encuentran: primero, la equivalencia entre los métodos híbrido y determinista, segundo, la información adicional que brinda el modelo híbrido asociado a momentos estadísticos como la desviación estándar y la evolución de las PDF's, tercero, la representación sin el uso de malla de la fenomenología asociada al sistema representado por ejemplo en el posicionamiento de frentes de concentración. Todo esto abre una rama de posibilidades al uso del SPM a la descripción de otros componentes como surfactantes, polímeros o mezclas de estos componentes. Finalmente, el SPM puede expandirse a la descripción de otros campos que afectan el medio poroso como temperatura, entre otros.

**Palabras clave: Modelos Multifísicos, Medios Porosos. Flujo de fluidos, Transporte de Componentes, Retención y Movilización de Nanopartículas.**

## Abstract

During the last decade, the injection of nanofluids in hydrocarbon fields has been of increasing interest, as an enhanced oil recovery (EOR) technique. Specifically, when applying this technique, search among others, i.) improve the mobility of the hydrocarbon, change the matrix wettability from oil to water, ii.) increase the amount of saturates and aromatics at the expense of the asphaltenes found in the improved hydrocarbon (The - Diasty & Aly, 2015). In general, it has been found that the injection of nanofluids has improved recovery by up to 10%. Therefore, it becomes relevant to generate a phenomenological model that allows the description of the system and the obtaining of relevant information on the process.

The novelty of the study of the nanofluid injection problem is that it proposes a deterministic / probabilistic hybrid model, which presents two reference frameworks in its development. First, an Eulerian framework, where the transport of mass of the fluid phases present in the porous medium and energy is considered deterministically and second, a Lagrangian framework, which considers a probability density function that evolves through the Fokker-Planck equation, giving to the probabilistic component model. Here, the Lagrangian part emerges from the solution of the probability equation obtained by finding the marginal PDFs. For example, if the marginal PDF is found in the position space, the Fokker equation - Planck converts to the probabilistic advection-diffusion equation. Now, to solve this advection-diffusion equation, a Lagrangian method is used. In the particular case of the study the stochastic particle method (SPM) will be used.

Some of the results obtained with this work are: first, the extension of the SPM to the description of components such as tracers and nanoparticles is achieved. For this, it is necessary consider non-equilibrium phenomena, such as retention / mobilization. Furthermore, the probabilistic transport model is validated using a commercial simulator and experimental data (Li, *et al.*, 2015). Also, the model is applicable under multiphase, multidimensional and non-isothermal flow conditions.

Among the conclusions obtained from this study are: first, the equivalence between the hybrid and deterministic methods, second, the additional information provided by the hybrid model associated with statistical moments such as standard deviation and the evaluation of PDF's, third, the representation without the use of mesh of the phenomenology associated with the system, e.g, positioning of concentration fronts. All this opens a branch of possibilities to the use of the SPM to the description of other components such as surfactants, polymers or mixtures of these. Finally, the SPM can be expanded to the description of other fields such as temperature, among others.

**Keywords: Thermal Recovery, Multiphysics Models, Porous Media. Fluid Flow, Component Transport, Retention and Mobilization of Nanoparticles**

# **Development of a Probabilistic Model of Material Flow and Transport of Scalars in Hydrocarbon Reservoirs Subjected to Nanofluid Injection.**



# Contenido

Pág.

Resumen IX

Lista de figuras ..... XVIII

Lista de tablas ..... XXI

Lista de Símbolos y abreviaturas..... 1

1.	Introducción.....	7
1.1	Motivación .....	7
1.2	Estado del Arte .....	10
1.3	Objetivos.....	18
1.4	Esquema de la Tesis. ....	19
2.	Descripción Física y Matemática del Transporte de Masa y Energía en Medios Porosos	21
2.1	Modelo Conceptual y Suposiciones Básicas .....	21
2.2	Mecanismos de Transporte de Masa .....	23
2.3	Ecuación de Continuidad o Balance de Masa para la Fase <i>l</i> . ....	23
2.4	Ecuación de Continuidad para el Componente $\alpha$ en la fase <i>l</i> . ....	24
2.4.1	Términos de Transferencia de Masa Debido a Efectos de Sorción, Retención/Movilización.....	24
2.4.2	Términos de Transferencia de Masa Debidos a Disolución usando Modelo de Partición.....	25
2.5	Ecuación General de Energía .....	26
2.6	Condiciones Iniciales y de Frontera .....	26
2.6.1	Condición inicial .....	27
2.6.2	Condiciones de Frontera .....	27
3.	Capítulo 3 - Descripción Estocástica del Transporte de Masa en Medios Porosos...29	
3.1	Modelo Lagrangiano Probabilístico de Transporte de Masa.....	30
3.1.1	Modelo Lagrangiano Probabilista de Transporte del Componente $\alpha$ en la Fase <i>l</i>	30
3.1.1.1	Numero de Peclet .....	36
3.1.1.2	Modelo de Mezclado de Curl.....	37
3.1.2	Modelo Lagrangiano Probabilista de Transporte de la Fase <i>l</i> .....	37
3.2	Modelo de Transporte de Masa Multifásico y Multicomponente usando PDF	38
3.2.1	Modelo Probabilístico de Transporte de Masa del Componente o Especie $\alpha$ en la Fase <i>l</i> .....	39

3.2.2	Modelo Probabilístico de Transporte de Masa de la Fase $l$ .....	46
3.2.3	Modelo Probabilístico de Evolución de la Concentración del Componente $\alpha$ de la Fase $l$ en el Espacio de Concentraciones.....	46
4.	Capítulo 4 – Modelo Numérico y Computacional del Transporte de Masa en Medios Porosos	53
4.1	Modelo Numérico .....	53
4.1.1	Malla de Simulación.....	53
4.1.2	Discretización de las Ecuaciones del Modelo .....	54
4.1.3	Discretización Estocástica asociada con el SPM .....	55
4.2	Solución de Sistema de Ecuaciones.....	58
4.3	Algoritmo de Solución.....	58
5.	Capítulo 5 – Resultados y Análisis de Resultados. ....	61
5.1	Validación de Trazador Inerte 1-D Monofásico.....	61
5.1.1	Validación de la Concentración del Trazador Inerte.....	61
5.1.2	Evolución de la Función de Distribución de Probabilidad de Concentración (PDFC) del Trazador .....	65
5.1.3	Sensitividad del Transporte del Trazador Respecto al Número de Partículas por Celda y Tamaño de la Malla.....	67
5.1.4	Resumen y Conclusiones sobre el Transporte de Trazadores Inertes	71
5.2	Validación de la Concentración de Nanopartículas (NP's).....	71
5.2.1	Validación de la Concentración de Nanopartículas en el Efluente.....	73
5.2.2	Evolución de la Función de Distribución de Probabilidad de Concentración de las Nanopartículas.....	75
5.2.3	Sensitividad del Modelo de Doble Sitio y sus efectos en el Transporte de Nanopartículas.....	77
5.2.4	Resumen y Conclusiones Sobre Sensitividad del Modelo de Retención / Movilización. ....	84
5.3	Escalamiento del Flujo de Componentes a Nivel de Yacimiento .....	85
5.3.1	Escalamiento de la Concentración de Trazador en el Efluente .....	87
5.3.2	Escalamiento de la Concentración de Nanopartículas en el Efluente..	89
5.3.3	Conclusión del Proceso de Escalamiento de Componentes (Trazadores y Nanopartículas).....	90
5.4	Transporte de Componentes en Flujo Multifásico No Isotérmico. ....	91
5.4.1	Datos de Transporte de Componentes en Flujo de Multifásico No Isotérmico.....	91
5.4.2	Validación de la Concentración del Trazador Inerte Bajo Flujo Multifásico.....	95
5.4.3	Evolución de las Funciones de Distribución de Probabilidad de Concentración del Trazador para flujo Multifásico.....	100
5.4.4	Validación de la Concentración del Nanopartículas Bajo Flujo Multifásico No Isotérmico.....	102
5.4.5	Evolución de las Funciones de Distribución de Probabilidad Concentración de las Nanopartículas para flujo Multifásico .....	108
5.4.6	Resumen y Conclusiones sobre el Transporte de Componentes o Especies en Flujo Multifásico y No Isotérmico. ....	110

---

5.5 Transporte de Componentes en Flujo Multifásico no Isotérmico Multidimensional.....	111
5.5.1 Datos de Transporte de Componentes en Flujo de Multifásico No Isotérmico en Dos Dimensiones.....	111
5.5.2 Resultados del Transporte de la Concentración del Nanopartículas Bajo Flujo Multifásico No Isotérmico Multidimensional.....	112
6. Conclusiones y Recomendaciones.....	117
6.1 Conclusiones.....	117
6.2 Recomendaciones.....	119
A. Anexo: Deducciones de Coeficientes de la Ecuación de Fokker – Planck.....	123
A.1 Coeficientes de la Ecuación de Fokker – Planck.....	123
Bibliografía	129

## Lista de figuras

Pág.	
	<b>Figura 2-1.</b> Volumen elemental representativo de un medio poroso. Tomado de Bundschuh y Suarez (2010).....22
	<b>Figura 3-1.</b> Representación esquemática del REV en las formulaciones Euleriana y Lagrangiana..... 30
	<b>Figura 4-1</b> Representación esquemática de la malla ortogonal de simulación, donde se tiene el bloque $j$ y sus bloques vecinos definidos en el conjunto $\Psi_j$ . Tomado de Solano (2019) .....54
	<b>Figura 5-1.</b> Perfiles del promedio de concentración normalizada del trazador como función de la posición adimensional para diferentes tiempos adimensionales para los resultados obtenidos con el FVM (puntos) y SPM (curva continua, azul). ..... 63
	<b>Figura 5-2.</b> Promedio de concentración normalizada del trazador para los datos experimentales (asteriscos), los resultados usando el FVM (puntos), los valores obtenidos con el SPM (curva continua) y desviación estándar (línea semicontinua) de la evolución en el tiempo en el efluente. .... 64
	<b>Figura 5-3.</b> Evolución de las PDFC para el trazador a. en el punto inicial e inyección de sistema poroso (Bloque 1) y b. en el punto medio (Bloque 5) para diferentes tiempos adimensionales. .... 67
	<b>Figura 5-4.</b> Efecto sobre el número de partículas sobre el promedio de concentración del trazador ( $Np$ ) y la desviación estándar ( $St.Dev Np$ ) de la evolución en el tiempo en el efluente. a.) $Np$ toma valores de 5000, 10000 y 50000, b.) $Np$ toma valores de 50, 100, 500 y 1000. .... 69
	<b>Figura 5-5.</b> Influencia del tamaño de la celda de la malla ( $\Delta x$ ) sobre la evolución temporal del promedio y la desviación estándar de concentración del trazador en el efluente..... 70
	<b>Figura 5-6.</b> Promedio de concentración de NP's y desviación estándar normalizadas de la evolución en el tiempo en el efluente. .... 73

**Figura 5-7.** Evolución de las PDFC - NP's a.) en el punto inicial e inyección de sistema poroso (Bloque 1) y b.) en el punto medio (Bloque 5) para diferentes tiempos adimensionales. ....76

**Figura 5-8.** Sensibilidad sobre la concentración de inyección ( $C_{inj}$ ) y la desviación estándar ( $St. Dev C_{inj}$ ), para valores correspondientes a 0.75, 0.50 y 0.25 veces  $C_{inj}$ . La curvas continuas se refieren a  $C_{inj}$ , (azul) 0.25 (verde), 0.50 (roja) y 0.75 (amarilla) veces  $C_{inj}$ . ....78

**Figura 5-9.** Sensitividad de la constante de retención irreversible,  $k_{irr}$  (a.), la constante de movilización,  $k_{rd}$  (c.) sobre la concentración de nanopartículas. Sensitividades de las desviaciones estándar de las variables mencionadas (b.) y (d.), respectivamente, en el efluente en función del tiempo. Los puntos se refieren a curva base usando FVM con una vez  $k_{irr}$ , las curvas continuas amarilla, azul, roja y verde son respectivamente para valores de 0.5, 1, 5 y 10 veces  $k_{irr}$  en (a.) y (b.) y para valores de 1, 10, 100 y 500 veces  $k_{rd}$  en (c.) y (d.).....80

**Figura 5-10.** Sensitividad de la concentración máxima en el sitio 1 ( $S1,max$ ) (a.), la concentración en el sitio 2 ( $S2,max$ ) (c.) sobre la concentración de nanopartículas y las desviaciones estándar de las variables mencionadas (b.) y (d.), respectivamente, en el efluente en función del tiempo.....82

**Figura 5-11.** Comparación de escalamiento  $RL$  de la evolución temporal de la concentración y desviación estándar normalizadas del trazador en el efluente. Los asteriscos, puntos y línea continua representan los datos experimentales y los resultados deterministas y estocásticos, respectivamente. Además, las curvas continuas amarilla y roja hacen referencia a los resultados estocásticos al escalar 100 y 400 veces, correspondientemente.....88

**Figura 5-12.** Comparación de escalamiento  $RL$  de la evolución temporal de la concentración y desviación estándar de nanopartículas en el efluente. Los asteriscos, puntos y líneas continuas (azul, amarilla y roja) representan los datos experimentales y los resultados deterministas y estocásticos, respectivamente. Además, las curvas continuas hacen referencia a los resultados estocásticos al escalar 1,100 y 400 veces, correspondientemente.....90

**Figura 5-13.** Perfiles en fase agua a. y aceite b. del promedio de concentración normalizada del trazador como función de la posición adimensional para diferentes tiempos

adimensionales para los resultados obtenidos con el FVM (puntos) y SPM (curva continua). .....	96
<b>Figura 5-14.</b> Promedio de concentración normalizada del trazador usando el FVM (puntos), resultados obtenidos con el SPM (curva continua) y desviación estándar (línea con puntos semicontinua) de la evolución en el tiempo en el efluente, para la fase agua a. y fase aceite b.....	98
<b>Figura 5-15.</b> Evolución temporal de las funciones de distribución de probabilidad de concentración para el trazador para el punto de inyección o inicial y el punto medio del sistema poroso para la fase agua a. y b. además, para la fase aceite c. y d., correspondientemente. ....	102
<b>Figura 5-16.</b> Perfiles en fase agua a.) y aceite b.) del promedio de concentración normalizada de nanopartículas como función de la posición adimensional para diferentes tiempos adimensionales para los resultados obtenidos con el FVM (puntos) y SPM (curva continua). ....	104
<b>Figura 5-17.</b> Promedio de concentración normalizada de nanopartículas usando el FVM (puntos), resultados obtenidos con el SPM (curva continua) y desviación estándar (línea con puntos semicontinua) de la evolución en el tiempo en el efluente, para la fase agua a. y fase aceite b.....	106
<b>Figura 5-18.</b> Evolución temporal de las funciones de distribución de probabilidad de concentración para las nanopartículas para el punto de inyección o inicial y el punto medio del sistema poroso para la fase agua a. y b. además, para la fase aceite c. y d., correspondientemente. ....	110
<b>Figura 5-19.</b> Superficies de concentración de nanopartículas en la fase agua para tiempos de 0.5 y 5 <i>d</i> , determinista a. y b. y estocástica c. y d. ....	113
<b>Figura 5-20.</b> Superficies de concentración de nanopartículas en la fase agua para tiempos de 0.5 y 5 <i>d</i> , determinista a. y b., estocástica c. y d., y la desviación estándar de dicha concentración.....	114

## Lista de tablas

Pág.

<b>Tabla 5-1.</b> Propiedades del medio poroso y condiciones de inyección de componentes.	62
<b>Tabla 5-2.</b> Parámetros para el ajuste del modelo de sitio doble, que permiten describir los procesos de retención y movilización de NP's del medio poroso.	72
<b>Tabla 5-3.</b> Factores de escalamiento para proceso de inyección de componentes en el medio poroso.	87
<b>Tabla 5-4.</b> Propiedades del medio poroso y condiciones de inyección de componentes bajo condición de flujo multifásico.	92
<b>Tabla 5-5.</b> Condiciones operacionales de inyección para transporte del componente en flujo multifásico no isotérmico.	93
<b>Tabla 5-6.</b> Propiedades físicas y coeficientes de interacción del hidrocarburo presente en el medio poroso (Bueno, 2019).	93
<b>Tabla 5-7.</b> Permeabilidades relativas para flujo de fluidos trifásico, aceite / gas y aceite / agua (Morales, 2019).	94
<b>Tabla 5-8.</b> Propiedades térmicas de las fases presentes en el medio poroso y sus alrededores y tabla de coeficientes de partición en función de presión y temperatura (Morales, 2019).	95
<b>Tabla 5-9.</b> Parámetros del modelo de sitio doble, para describir los procesos de retención y movilización de nanopartículas en flujo multifásico no isotérmico.	103



# Lista de Símbolos y abreviaturas

## Símbolos con letras latinas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$A$	Área	$m^2$	Ec. (3.8)
$A$	Matriz		Sección 4.2.1
$A^*$	Componente de la partícula		Ec. (4.6)
$b$	Vector de constantes		Sección 4.2.1
$b$	Variable aleatoria distribuida uniformemente		Ec. (3.19)
$b_D$	<i>Drift</i> promedio de la variable		Ec. (3.14)
$c_p$	Capacidad calorífica	1/K	Ec. (2.7)
$D_k^x$	Coeficiente posición de la ecuación Fokker-Planck	$m/s$	Ec. (3.28)
$D^{y_{\alpha}l}$	Coeficiente de escalares de la ecuación Fokker-Planck	$ppm/s$	Ec. (3.28)
$D_{\alpha l m} D_{\alpha l k}$	Coeficiente de dispersión	$m/s^2$	Ec. (2.2)
$D_{kk}^{xx}$	Coeficiente varianza de posición de la ecuación Fokker-Planck	$lam^2/s$	Ec. (3.28)
$D^{y_{\alpha}l y_{\alpha}l}$	Coeficiente varianza de escalares de la ecuación Fokker-Planck	$lappm^2/s$	Ec. (3.28)
$D_k^{xy_{\alpha}l}$	Coeficiente cruzado posición/escalares de la ecuación Fokker-Planck	$m.ppm/s$	Ec. (3.28)
$\mathcal{F}$	Función de distribución de masa		Sección 3.3.1
$F$	<i>Flux</i>	$m/s$	Ec. (3.30)
$k$	Permeabilidad	$m^2$	Ec. <b>¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.¡Error!</b>

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
			<b>No se encuentra el origen de la referencia.</b>
$k_c$	Parámetro del modelo de mezcla que depende del número de Peclet		Ec. (3.20)
$k_{ra,alr}$	Constante de retención reversible	1/s	Ec. (2.5)
$k_{rd,alr}$	Constante de movilización	1/s	Ec. (2.6)
$k_{irr,ar}$	Constante de retención irreversible	1/s	Ec. (2.4)
$k_{lk}$	Permeabilidad intrínseca de la fase fluida.	$m^2$	Ec. ( 2.1)
$M_{aj}$	Masa del componente $\alpha$ en dirección $j$	kg	Ec. (3.29)
$\dot{m}_{all'}$	Transferencia de masa entre fases	1/s	Ec. (2.2)
$\dot{m}_{alr}$	Transferencia de masa desde y a la roca	kg/s	Ec. (2.3)
$Np_m$	Numero de partículas interactuantes		Ec. (3.20)
$n_{al}^{\Omega'}$	Numero de partículas		Ec. (3.1)
$Pe$	Numero de Peclet		Ec. (3.18)
$q_{aj}$	Tasa del componente $\alpha$ en dirección $j$	ppm/s	Ec. (3.29)
$q^l$	Tasa de flujo	$m^3/s$	Ec. (2.2) ( 2.1)
$\dot{Q}_T^l$	Fuentes, sumideros y transferencia energía	bar. $m^3/s$	Ec. ( 2.7)
$\mathbf{R}$	Vector de residuo		Sección 4.2.1
$X$	Posición estocástica	$m$	Ec. (3.26)
$\mathbf{x}$	Vector de incógnitas		Sección 4.2.1
$x_{ar}$	Concentración en la matriz de componente $\alpha$	$kg_{\alpha}/kg_r\%$	Ec. (3.32)
$x_k$	Componente $k$ de vector posición	$m$	Ec. ( 2.1)
$x_{1alr}$	Concentración en sitio 1	$kg_{\alpha}/kg_r\%$	Ec (2.3)
$x_{1ar,max}$	Concentración máxima en sitio 1	$kg_{\alpha}/kg_r\%$	Ec. (2.4)
$x_{2alr}$	Concentración en sitio 1	$kg_{\alpha}/kg_r\%$	Ec (2.3)
$x_{2ar,max}$	Concentración máxima en sitio 2	$kg_{\alpha}/kg_r\%$	Ec. (2.4)
$X$	Posición estocástica	$m$	Ec. (3.26)
$y_{al}$	Concentración componente $\alpha$ en fase $l$	ppm	Ec. (2.2)
$\bar{y}$	Volumen en espacio de escalares		Ec. (3.23)

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$W$	Variable estocástica distribuida de forma Gaussianiana	$s^{1/2}$	Ec. (3.31)
$w$	Fase agua		
$w_{ial}$	Factor de peso (volumen o masa)		Ec. (3.5)

### Símbolos con letras griegas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
$\delta$	Delta de Dirac		Ec. (4.7)
$\varepsilon_{all'}$	Coeficiente de partición		Ec. (2.6)
$\lambda$	Coeficiente de conductividad térmica	$bar \cdot m^3/K$ $bar/s$	Ec. (2.7) Ec. (2.1) ¡Error!
$\mu_l$	Viscosidad de la fase $l \in \{w, g, o\}$		<b>No se encuentra el origen de la referencia.</b>
$\rho_l$	Densidad de la fase $l \in \{w, g, o\}$	$kg/m^3$	Ec (2.1)
$\rho_{al}^{pn}$	Densidad de numero de partículas	$1/m^3$	Ec. (3.1)
$\tau$	Tiempo característico	$s$	Ec. (3.20)
$\phi$	Porosidad		Ec. (2.1)
$\psi$	Vector de propiedades escalares		Sección 3.2
$\Omega$	Volumen elemental representativo	$m^3$	Ec. (3.1)
$\Omega'$	Volumen de control de partículas	$m^3$	Ec. (3.1)

### Subíndices

Subíndice	Término
0	Inicial
$bc$	Total
$g$	Gas
$k$	Contador
$l$	Fase

Subíndice	Término
-----------	---------

<i>m</i>	Promedio o media aritmetica
<i>o</i>	Aceite
<i>p</i>	Poros
<i>r</i>	Roca
<i>T</i>	Total
<i>w</i>	Agua

## Superíndices

Superíndice	Término
-------------	---------

*	Propiedad asociada a una partícula
<i>j</i>	Contador
<i>k</i>	Iteración
<i>l</i>	Fase
<i>m</i>	Contador tiempo
<i>p</i>	Fase
<i>r</i>	Roca

## Abreviaturas

Abreviatura	Término
-------------	---------

BCA	<i>Boxes Counter Analysis</i>
CTRW	<i>Continuous Time Random Walkr</i>
EDP	Ecuación Diferencial Parcial
EOR	<i>Enhanced Oil Recovery</i>
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
IMPISEC	<i>Implicit Pressure Implicit Saturation Explicit Concentration</i>
MDF	<i>Mass Distribution Function</i>
PDF	<i>Probability Density Functions</i>
REV	<i>Representative Elemental Volume</i>
SARA	Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfáltenos
SPH	<i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i>
SPM	<i>Stochastic Particles Method</i>

---

<b>Abreviatura</b>	<b>Término</b>
--------------------	----------------

---



# 1. Introducción

## 1.1 Motivación

El sistema de estudio se enmarca en la descripción del flujo de fluidos en una roca porosa denominada yacimiento. Normalmente, de este yacimiento se quiere extraer hidrocarburo como petróleo, gas, aceites pesados y/o combinaciones de éstos, por lo cual se hace necesaria la perforación de pozos, en el yacimiento, para su extracción. Estos tipos de operaciones se conocen como de producción y comúnmente, se aplican durante toda la vida útil del yacimiento.

Paralelamente, cuando se sobrepasan las condiciones de flujo natural del sistema, o simplemente cuando disminuye la energía del yacimiento, por debajo del nivel que evita que el hidrocarburo llegue a superficie por flujo natural, entonces es necesario aplicar una operación de recobro. Por ejemplo, perforar pozos *infill* o cambiar pozos productores a inyectores con el fin de inyectar fluidos como gas, agua, aguas “inteligentes”, vapor, nanofluidos, aire, CO<sub>2</sub>, polímeros, surfactantes, y/o combinaciones de éstos, para reponer la energía del sistema y/o mejorar las propiedades de flujo, con el fin de mantener la producción en el yacimiento. En este caso, es claro que se puede seguir recuperando hidrocarburos a expensas de un incremento en la saturación de las fases inyectadas.

Así se quiere estudiar un yacimiento de hidrocarburos sometido a procesos de inyección/producción. Donde la producción deseada es de hidrocarburos y la inyección de fluidos puede variar dependiendo de las condiciones operacionales o recursos que se tengan. Por ejemplo, en el caso de interés se pueden inyectar fluidos como gas o agua, a la formación, con nanopartículas (NP's) que mejoren la capacidad de flujo de la fase aceite.

También, estos fluidos de inyección pueden ser inyectados con trazadores que ayuden a entender aspectos del flujo en el yacimiento, como caminos preferenciales de flujo, heterogeneidades, etc.

Así, la aplicación de NP's de tamaños menores a 100 nm, permite liberar aceite de medios porosos que presenten tamaños de poro entre 5 a 50  $\mu m$ . Además, existen tres enfoques bajo los cuales se pueden aplicar las NP's en la recuperación mejorada de petróleo (EOR). Estos son nanocatalizadores, nanoemulsiones y nanofluidos (Elsayed, 2014).

De otro lado, desde el punto de vista del transporte de nanofluidos en medios porosos, un nanofluido se define como un fluido base con partículas de tamaño nanométrico en suspensión coloidal. Las NP's son tan pequeñas y ligeras que permanecen suspendidas, independientemente de los efectos de la gravedad, estas partículas, siguen un camino aleatorio dictado por el movimiento browniano y se mueven libremente a través del medio fluido (El-Diasty & Aly, 2015). La estabilidad de las NP's en suspensión se mantiene, si las fuerzas repulsivas de las partículas exceden las fuerzas de atracción (Wei & Huaqing, 2011).

La idea es que el proceso de inyección de nanofluidos mejore la humectabilidad del yacimiento y cambie la tensión interfacial. Sin embargo, esta mejora puede ser anulada por una reducción de la permeabilidad y la porosidad, si la retención de NP's en las gargantas y cuerpos de poros, es muy alta. Esto implica que la concentración de NP's en el fluido base (agua, gas, aire, etc) debe controlarse, para que la retención llegue a un punto de saturación. Si este valor es superado, la permeabilidad relativa del aceite y el agua cambiará gradualmente en relación con el área cubierta por partículas. Con esta evaluación como base, estudios experimentales y numéricos sobre los cambios de porosidad y permeabilidad causados, por la inyección de NP's fueron reportados por Ju & Fan (2008). Sus resultados mostraron que ambas relaciones ( $k/k_0$  y/o  $\phi/\phi_0$ ) disminuyen con el aumento del volumen de nanofluidos inyectados, donde  $k_0$  es la permeabilidad inicial y  $\phi_0$  es la porosidad inicial (Ju & Fan, 2009).

Para el estudio del transporte de nanofluidos en medios porosos, varios autores han realizado estudios experimentales a escala de laboratorio y otros han propuesto y

solucionado modelos basados en leyes de conservación, escritas bajo un marco de referencia Euleriano determinista. Por ejemplo, Li *et al.* (2015) conducen experimentos de inyección de nanoestructuras y NP's coloidales de sílica hidrofílica en núcleos Berea. Ellos evalúan varias concentraciones y estudian la variación de la humectabilidad en el medio poroso y su efecto en el recobro de aceite (Li, *et al.*, 2015). Los resultados muestran incrementos entre 3% al 18% en la recuperación de aceite usando este tipo de NP en concentraciones de 0.05 y 0.5 wt%. Adicionalmente, reportan un incremento de la humectabilidad del sistema.

Zhang *et al.* (2015) utilizan simuladores comerciales como Eclipse y CMG para evaluar el desempeño de inyección nanopartículas de sílice en un núcleo de *tight oil*. Para esto se inyecta el nanofluido a diferentes concentraciones bajo esquemas de inyección alternada con agua o con gas (Zhang *et al.*, 2015). Ellos identifican que la producción acumulada es mayor con inyección alternada de gas y se obtiene el mejor comportamiento con concentraciones de NP's de 0.05 wt%.

Aunque existe una gran cantidad de trabajos enfocados en la descripción fenomenológica del problema, desde diferentes puntos de vista como conceptual, experimental y numérico. Se observa que se pueden aplicar métodos híbridos, que tomen las ventajas de los ambos métodos (Eulerianos deterministas / Lagrangiano probabilista), con el fin de lograr una mejor representación del problema de inyección de nanofluidos, por ejemplo, en la descripción de la posición de frentes agudos. Aunado a esto, se tiene que la solución brinda información adicional como los momentos estadísticos y las funciones de densidad de probabilidad, en cada tiempo y posición.

A continuación, se describen los desarrollos generados durante las últimas décadas, enfocados a la descripción del transporte de masa en medios porosos, a través del uso de métodos Lagrangianos. Esta se realiza debido a dos razones: la primera obedece al hecho que los métodos PDF, normalmente usan métodos en marcos de referencia Lagrangianos, para resolver ecuaciones diferenciales asociadas a estas formulaciones. La segunda es que el método Lagrangiano *stochastic particle method* (SPM), utilizado en el estudio fue desarrollado a finales de la década pasada y su difusión en la literatura todavía es precaria. SPM, ha sido aplicado solo una vez para describir el transporte de componentes en un

medio poroso (Tyagi, 2010) y unas pocas veces para la describir el flujo de fluidos en medios porosos (Tyagi *et al.*, 2008). A raíz de esto, el estado del arte se enfoca en la revisión de trabajos relacionados con el transporte de masa en medios porosos, utilizando los métodos Lagrangianos más representativos y usados, los cuales comparten algunas similitudes con el SPM.

## 1.2 Estado del Arte

Los métodos PDF para resolver ecuaciones diferenciales comenzaron en 1969 con Lundgren quien derivó, modeló y resolvió la ecuación de transporte de masa para una PDF adjunta de velocidad (Lundgren, 1969). Posteriormente, Dopazo y O'Brien y Pope derivaron modelaron y resolvieron la ecuación de transporte de masa para una PDF adjunta en composición (Dopazo & O'Brien, 1976), (Pope, 1985). Aunque se aplicó para flujo turbulento, estos trabajos no consideraban aplicaciones a medios porosos.

Además, los métodos PDF se han usado para describir mecanismos asociados al transporte de escalares en un medio heterogéneo a partir de funciones de densidad de probabilidad  $\beta$  (Meyer, Jenny, & Tchepeli, 2010). Esto se hace introduciendo una ecuación diferencial estocástica que evoluciona en el espacio de escalares, por ejemplo la concentración. En este caso particular, la ecuación es descrita por el modelo de mezclado (IEM por sus siglas en inglés), donde se presenta interacción por intercambio con el promedio.

Estos métodos probabilísticos enmarcados en soluciones Lagrangianas Monte Carlo y de funciones de densidad de probabilidad (PDF) permiten describir el comportamiento del medio, con mayor representatividad que los métodos convencionales como: los elementos finitos (FEM), los volúmenes finitos (FVM) y las diferencias finitas (FDM), debido a que el método probabilístico describe de forma más apropiada, cada uno de los efectos que se presentan en el medio poroso, al nivel de su escala correspondiente (mesoscópica o macroscópica) (Tyagi *et al.*, 2008; Tyagi, 2010); (Mostaghimi, 2012). Por ejemplo, para lograr una representación apropiada de los frentes de alta densidad y alta tasa en el medio poroso, se necesita un alto refinamiento en las celdas de la malla utilizada. Además, estos métodos responden particularmente bien en materiales porosos saturados, donde se

presentan fuertes contrastes entre regiones saturadas de fluido, donde existe estancamiento en unas regiones y flujo en otras (Berkowitz, *et al.*, 2006); (Zoia, *et al.*, 2010); (Sahimi, 2012).

En particular, se han realizado esfuerzos para calcular el promedio y la varianza de la concentración a nivel local. En esta línea se han introducido métodos de perturbación y método de ecuaciones de momentos para aproximar la ecuación de advección-difusión (ADE) en un marco de referencia Euleriano (Caroni & Fiorotto, 2005), sin embargo, estas son válidos para varianzas de conductividad pequeñas y proporcionales a la función logaritmo lo cual limita su aplicación. En esta línea, también se han aplicado teorías Lagrangianas basadas en aproximaciones de bajo orden y para varianzas pequeñas. Aquí aparece un término de velocidad dispersiva que se modela por medio de un movimiento Browniano con coeficiente de dispersión constante. Bajo la teoría Lagrangiana también se evalúan el promedio y la varianza para escalares como la concentración (Caroni & Fiorotto, 2005). Pero esto se realiza para el estudio de transporte de contaminantes en acuíferos y solo considera fenómenos dispersivos.

Siguiendo la línea Lagrangiana dos grandes grupos de métodos se han planteado a lo largo de las últimas décadas, para resolver la ecuación de advección - difusión (ADE). El primero, utiliza métodos netamente probabilísticos y el segundo usa una combinación de métodos determinísticos - probabilísticos, denominados métodos Eulerianos - Lagrangianos (Wang *et al.*, 1999); (Younes, *et al.*, 2006) que pertenecen a la categoría de métodos híbridos. Aquí, se hace notar que los métodos deterministas Eulerianos más representativos, usan métodos como FEM, DFM y FVM para solucionar el sistema de ecuaciones que describen la fenomenología del problema. Dicha bibliografía es extensa y más conocida que la bibliografía Lagrangiana, por lo cual, el estado del arte se encamina a la descripción Lagrangiana del problema. De hecho este trabajo desde un punto de vista totalmente Euleriano ya se ha realizado por Morales (2019). Así, algunos de los métodos Lagrangianos más representativos aplicados en la descripción del transporte en medios porosos, son los siguientes:

*Dissipative Particle Dynamics* (DPD) en este método un sistema puede simularse con un conjunto de partículas que interactúan, donde cada partícula representa un pequeño grupo

de moléculas en lugar de una sola. En una realización DPD la fuerza de interacción partícula-partícula consiste en un componente no disipativo y uno disipativo relacionado con el efecto de la viscosidad y una fluctuación térmica (Xia *et al.*, 2020). Este método es una técnica de simulación a nivel de la mesoescala (Liu, *et al.*, 2007), que ha sido aplicado a la descripción del comportamiento de fluidos complejos (Luo, 2000); este modelo sirve de puente entre la escala microscópica a una escala macroscópica (Yang & Yin, 2014).

Al actuar como método que enlaza las escalas mencionadas, su aplicación a escala de laboratorio o yacimiento, genera un gran costo computacional. Adicionalmente, este método puede verse como una versión de grano grueso del método de dinámica molecular (Xia *et al.*, 2020). El método calcula la evolución de la posición de las partículas usando la aceleración asociada a la resultante de las fuerzas de interacción entre las partículas.

Adicionalmente, Warren (2003) realizó una extensión del DPD a el modelo DPD "de muchos cuerpos" (mDPD) (Warren, 2003), el cual es adecuado para describir sistemas de fluidos multifásico y, por lo tanto, se ha aplicado para simular varios problemas de éste tipo, incluyendo interacciones entre la interfaz líquido - vapor, tensión superficial (Ghoufi, *et al.*, 2013) y flujos de fluidos en micro-canales (Xia *et al.*, 2020).

Ghoufi *et al.* (2013) describieron la evolución del modelo mDPD en lo que concierne a la predicción cuantitativa de las propiedades en la interface de los sistemas que difieren según la química, la composición y la forma de la interfaz. Además, expresan que en el modelo mDPD, dicha evolución de las propiedades se presenta a través de la tensión superficial de las interfaces de agua de forma plana y esférica. Adicionalmente, muestran la dependencia de la tensión superficial, en interfaces de vapor – líquido, de la concentración de soluciones salinas, específicamente, cuando se varía la concentración de tenso-activos en el sistema. También, estudian la formación de micelas y la coalescencia de una nano-gota de agua en la superficie del agua. (Ghoufi, *et al.*, 2013). A pesar de lo anterior el estudio no considera flujo de fluido en un medio poroso y sus resultados son comparados con el modelo de dinámica molecular.

Xia *et al.* (2020) usando el mDPD desarrollan un modelo computacional para describir el flujo de fluidos en yacimientos de baja permeabilidad como *shale* y arenas apretadas.

Básicamente, con esta simulación se obtienen la permeabilidad y las curvas de permeabilidad relativa del sistema simulado (Xia *et al.*, 2020). Estas aplicaciones a medios porosos todavía no consideran el flujo de componentes, como nanofluidos inyectados en el medio poroso.

*Smooth Particle Hydrodynamic* (SPH). Aquí el fluido es representado por funciones de peso que se sobrelapan o funciones continuas, centradas en las partículas. Las partículas se mueven con la velocidad local del fluido y la aceleración de cada partícula se calcula a partir del gradiente de presión local y la densidad del fluido. La densidad en cada punto puede calcularse de las posiciones de las partículas que están dentro del rango de la función de peso y la presión correspondiente se obtiene a partir de la ecuación de estado (Welton & Pope, 1997); (Tartakovsky, *et al.*, 2008). Adicionalmente, otras fuerzas como las generadas por la viscosidad, (la cual actúa en conjunto con las fuerzas asociadas al gradiente de presión, que causan aceleración de las partículas), pueden estimarse usando las posiciones y velocidades de las partículas vecinas, la función de peso y las derivadas de la función de peso (Liu, *et al.*, 2014).

Akbari (2014) introdujo el método modificado de partículas móviles en medios porosos (MMPP) para simular una interacción de flujo con estructuras porosas. En su técnica, se sugiere un conjunto unificado de ecuaciones para todo el dominio computacional y un tratamiento límite adecuado en las interfaces entre el fluido y los medios porosos. Además, modificó el volumen de partículas de fluido dentro del medio poroso mediante la introducción de densidad aparente. Aunque llegó a la conclusión de que el flujo turbulento es un tema importante, particularmente en la interfaz entre el fluido libre y los medios porosos, el modelo que utiliza se enfoca en el uso de la ecuación de onda (Akbari, 2014).

Aly y Asai (2014) modelaron flujos no Darcy a través de medios porosos utilizando el método SPH incompresible (ISPH), el cual es una variante del SPH. Incluyeron la porosidad y las fuerzas de arrastre del medio poroso (es decir, el término Darcy y de Forchheimer) en el método ISPH. Adaptaron el método ISPH para resolver ecuaciones de gobiernan flujo, convección natural en cavidades porosas asociada a flujo no Darcy y la convección natural en interface solido-fluido. En este estudio, se presenta un método ISPH estabilizado en tres dimensiones para simular flujos de fluidos a través de estructuras

porosas. En el algoritmo ISPH, se utiliza un procedimiento de corrección de velocidad semi-implícito y la presión se evalúa implícitamente resolviendo la ecuación de Poisson de presión (PPE). Hasta este punto, se observa que el método SPH y sus variantes han sido aplicados a la descripción de flujo de fluidos en medios porosos, considerando fluidos incompresibles. Un estudio similar, solo que cambiando la forma de modelar el flujo turbulento (usando el modelo semi-analítico de Smagorinsky) lo realizan Pahar y Dhar (2016). Aunado a lo anterior, en su modelo consideran cambios de volumen poroso a través de la modificación de la porosidad efectiva y mantiene constante la densidad de las partículas (Pahar & Dhar, 2016). Peng *et al.* (2017) aplican el método SPH para describir flujo multifásico inestable, a través de medios porosos. Para simular el flujo en el medio poroso, usan un conjunto de ecuaciones de Navier-Stokes modificadas. El medio poroso se considera introduciendo una fuerza de resistencia no lineal, que mantiene las partículas sólidas en posiciones fijas (Peng, *et al.*, 2017). A pesar de lo complejo del modelo y la descripción fenomenológica que logra, se observa que el problema de transporte de masa en el medio poroso se aborda de forma tangencial, además no considera el transporte de componentes en el medio poroso.

Adicionalmente, en el SPH la representación del problema del transporte de masa, requiere identificación apropiada de las funciones de peso y del cálculo de la fuerza resultante sobre cada partícula. Esto involucra un incremento en el número de parámetros o variables características de cada partícula a considerar, (por ejemplo, respecto a la fuerza de interacción viscosa).

*Continuous Time Random Walk (CTRW)*. Es uno de los métodos más usados en la descripción del flujo de fluidos en medios porosos. Esto hace que existan variedad de estudios en la literatura y por lo tanto consideraciones y mejoras de la aplicación de este método: por ejemplo, flujo de fluidos (Berkowitz *et al.*, 2006); (Zoia *et al.*, 2010), transporte de nanopartículas (Kang, *et al.* 2019) entre otros.

El modelo se basa en la longitud de un salto, asociado con un lapso de tiempo de espera entre dos saltos sucesivos y estos saltos están conectados por una PDF (Fa, 2014). El método CTRW es una aproximación que permite tratar el flujo de fluido y la migración del soluto como un ensamble promedio de fluido y un soluto de partículas, respectivamente

(Delay, *et al.*, 2005). Esto implica que a través de la descripción estocástica del tiempo se afectan o evolucionan las demás variables como la posición, la saturación, etc.

El CTRW es un marco probabilístico introducido por primera vez por Montroll *et al.* (1965) que describe el movimiento de una partícula controlada por un muestreo de tipo Monte-Carlo el cual sigue una distribución de probabilidad de transición específica. El enfoque de seguimiento de partículas (PT) es simular el flujo a medida que las partículas fluidas se inyectan en los medios porosos y se transportan a través de ellas. El movimiento de cada partícula está controlado por la física del flujo y la naturaleza de los medios porosos (Singh, 2014). El método CTRW-PT es eficiente al simular el flujo de fluido en un medio poroso heterogéneo, (ya que puede cuantificar el comportamiento fickiano del fluido).

Así, las interacciones esporádicas de las partículas que se encuentran en caminos de velocidades altas o moderadas con regiones de baja velocidad, frecuentemente, conduce a comportamiento de transporte no-Fickiano (Berkowitz, 2002), en otras palabras, este método considera que el transporte del soluto o contaminante o alguna de las fases que se desee representar es afectada por un proceso de retraso o estancamiento del soluto debido a zonas de baja permeabilidad y debido al transporte de masa en otras regiones del sistema. Así, el efecto combinado de mecanismos advectivos, dispersivos, difusivos y en algunos casos de sorción, conducen a un tiempo de tránsito local típico y amplio, el cual es capturado por este método (Dentz, *et al.*, 2004).

Dentro de las ventajas que presenta el método CTRW están: no introduce dispersiones numéricas falsas típicas de esquemas numéricos Eulerianos, representa apropiadamente regiones donde existe fluido estancado y fluido fluyendo (Berkowitz, *et al.*, 2006), es más rápido que el método Monte - Carlo (Zoia, *et al.*, 2010). Además, se tienen ventajas adicionales que incluyen la aplicación en un sistema sin malla y es computacionalmente eficiente en comparación con el método de diferencias finitas. Sin embargo, la limitación de CTRW es que el proceso de simulación no captura la física completa del transporte en la formación (Berkowitz & Scher, 1998). En su lugar, utiliza un marco probabilístico para hacer coincidir las observaciones de laboratorio y supone que las partículas se mueven de manera análoga desde la escala de poro a la escala de núcleo.

Vlahos *et al.* (2008) realizaron experimentos con partículas dispersas en un fluido y explicaron el transporte anómalo, asociándolo con algunas de las partículas "atrapadas" en algunos lugares del medio poroso, donde las partículas permanecen "inusualmente" durante largos períodos en un área espacial relativamente pequeña. Explican este hecho debido a que las partículas tienden a evitar regiones de flujo lento y pasarán más tiempo para encontrar una vía de flujo rápido para propagarse. Para el transporte de soluciones en medios heterogéneos (como los yacimientos de hidrocarburos), la ruta más corta y fácil es normalmente tortuosa. Por tanto, la existencia de vías preferenciales en el medio conduce a llegadas tempranas o tardías de las partículas (Vlahos, *et al.*, 2008).

Dentro de las aplicaciones de este método se tiene, el trabajo realizado por Berkowitz y Scher (1995) que simularon procesos de precipitación, disolución en varios tipos de medios porosos resolviendo la ecuación de transporte estocásticamente (Berkowitz & Scher, 1995). También, Dentz *et al.* (2004) utilizaron el enfoque CTRW-PT para cuantificar el transporte reactivo bimolecular, capturando las fluctuaciones locales en las concentraciones a escala de poro y demostrando los efectos sobre el comportamiento a escala de laboratorio. Paster *et al.* (2013) generalizó un método de seguimiento de partículas para modelar el transporte conservativo en sistemas hidrológicos y demostró la convergencia del método de seguimiento de partículas con la ecuación de difusión-reacción en el límite del paso de tiempo infinitamente pequeño (Paster, *et al.*, 2013). Abdelfatah *et al.* (2017) estudiaron el mecanismo de retención de nanopartículas en medios porosos en función de la temperatura, la fuerza iónica y el pH. Abdelfatah *et al.*, (2017) modelaron la agregación y la gelificación de nanopartículas de sílice a diversas salinidades y concentraciones utilizando la ecuación de equilibrio de población y el método de momentos en cuadratura (Abdelfatah, *et al.*, 2017).

Kang *et al.* (2019) proporcionan un modelo estadístico CTRW-PT para simular eficientemente el flujo de fluido reactivo y trazador de nanopartículas en medios porosos heterogéneos. Allí, por primera vez en la literatura, se utiliza el enfoque CTRW-PT para simular el transporte y reacción de nanopartículas en medios porosos heterogéneos. Además, se comparan las simulaciones CTRW-PT con las obtenidas de la técnica convencional de la ecuación de advección – difusión - reacción, (ADRE), con el fin de cuantificar la validez de este enfoque. Aunado a lo anterior, el algoritmo de PT se modifica

para permitir la visualización de la distribución de la concentración de nanopartículas en cualquier momento, lo que no es posible con la técnica convencional, debido a que utiliza incrementos temporales que se distribuyen aleatoriamente (Kang, *et al.*, 2019).

Aquí se hace notar que el método CTRW, es el único método Lagrangiano probabilista, que ha sido empleado para la descripción de este tipo de fenómenos en medios porosos. Esto ha sido logrado por Kang *et al.* (2019) quienes aplicaron el CTRW a la solución de la ADRE.

*Stochastic Particle Method (SPM)*. Este método considera una parcela de fluido como una partícula incompresible la cual se dota de propiedades escalares, como fase, masa, etc. Además, la posición de dicha partícula es descrita por una ecuación de Langevin, la cual contiene un término de velocidad estocástica, representado por un proceso de Wiener y otros de velocidad determinista calculada a partir del campo de presión (Tyagi, 2010). Esta es una técnica de simulación a nivel de la escala macroscópica y se ha aplicado a la descripción del transporte de masa en medios porosos. Específicamente, los trabajos encontrados en la literatura muestran como el método describe flujo de fluidos multifásico (Tyagi, 2008), (donde las saturaciones calculadas son estocásticas); el transporte de componentes (Tyagi, 2010), (considerando efectos de dilución, difusión, dispersión de CO<sub>2</sub>). Además, se han involucrado otros efectos como el que causa el campo gravitacional (Tyagi, Jenny, 2010). A pesar que el modelo es robusto, es rígido al considerar partículas estocásticas incompresibles, las cuales no intercambian masa. Además, no considera efectos de no equilibrio como fenómenos de retención/movilización y mezclado. Adicionalmente, el proceso de dilución aunque válido puede mejorarse desde el punto de vista de parámetros necesarios para la descripción del proceso, usando un modelo de partición.

A partir de la descripción de cada uno de los métodos propuestos, se eligió el SPM, por varias razones: i.) su robustez en la descripción de flujo multifásico, multidimensional en medios porosos, ii.) la facilidad de su implementación y modificación, a partir de las ecuaciones de transporte (de masa y energía) y las ecuaciones constitutivas, iii.) el amplio espectro de aplicación a la descripción de diferentes sistemas y fenómenos, los cuales pueden ser similares a los considerados en cada una de las aplicaciones logradas con los

métodos Eulerianos y Lagrangianos, iv.) el poco desarrollo que este método ha tenido, debido a que su versión inicial es rígida al considerar partículas incompresibles.

## 1.3 Objetivos

**El objetivo principal** del estudio es desarrollar un modelo de transporte de masa y escalares en un esquema de inyección de nanofluidos en yacimientos de hidrocarburos mediante funciones de densidad de probabilidad acoplado con un modelo Euleriano.

La idea es construir un modelo basado en relaciones que representen los comportamientos a escala macroscópica más apropiadamente que los modelos deterministas. El modelo debe cuantificar los efectos dinámicos de la física a escala de poro, manteniendo la condición de un modelo macroscópico. El objetivo es que procesos de flujo complejo como fenómenos de no equilibrio entre ellos: retención/movilización, disolución y mezclado sean considerados en este modelo. Esto se realiza utilizando aproximaciones estadísticas para describir el transporte de componentes o escalares, las cuales pueden ser más apropiadas que las aproximaciones deterministas, debido a que generan mayor información y tienen una dependencia “parcial” o nula de la malla de simulación (Subramaniam, 2013). Lo anterior, se logra al representar el REV como un conjunto de partículas. Además, se tomará como base el SPM propuesto por Tyagi *et al.* (2008) para representar el transporte de masa en un medio poroso. Aunado a esta consideración, debe extenderse el SPM para que describa el transporte de componentes, como trazadores inertes y nanopartículas. Para esto se considera el modelo de partición, modelo de Curl modificado y el modelo de doble sitio, con el fin de describir procesos de mezclado de concentración en la misma fase y fenómenos de retención y movilización de nanopartículas, por efecto de interacción de este componente y la matriz. Adicionalmente, el proceso de dilución aunque válido puede mejorarse desde el punto de vista de parámetros necesarios para la descripción del proceso, usando un modelo de partición. Finalmente, se levanta suposición de partículas incompresibles. Se hace notar lo novedoso del aporte y del desarrollo del trabajo, ya que en la literatura revisada, ninguno de los métodos Lagrangianos expuestos considera la fenomenología propuesta.

**Objetivos específicos** en base a lo anterior se plantean los siguientes objetivos específicos.

- Desarrollar un modelo matemático de base fenomenológica que describa el comportamiento del proceso de inyección de nanofluidos en yacimientos de hidrocarburos.
- Diseñar e implementar una estrategia de solución numérica basada en la aproximación híbrida en términos de métodos de solución directa y funciones de densidad de probabilidad.
- Evaluar el desempeño del modelo desarrollado.
- Simular un caso de campo, evaluando los efectos de la productividad ante diferentes escenarios de producción, de un conjunto de pozos.

## 1.4 Esquema de la Tesis.

Para lograr cumplir los objetivos planteados se plantean los siguientes temas. En el **Capítulo 2**, el modelo a desarrollar está compuesto por dos conjuntos de ecuaciones asociadas a cada uno de los campos presentes en el medio poroso. A saber, campos de presiones y temperatura. En particular el conjunto de ecuaciones asociadas al campo de presiones, está compuesto por las presiones y saturaciones de las fases que fluyen dentro del medio poroso. Adicionalmente, se tienen los campos de concentraciones de los componentes. Esto como tal compone el modelo determinista bajo un marco de referencia Euleriano.

De otro lado, en el **Capítulo 3** se desarrolla la componente probabilística del transporte de masa en un medio poroso sometido a inyección de nanofluidos. Así, si se consideran las concentraciones y/o escalares descritos bajo un esquema Lagrangiano, las ecuaciones de transporte asociadas a cada componente, pueden representarse como ecuaciones estocásticas o de Langevin, asociadas a un conjunto de partículas cualificadas o identificadas por la fase. Estas partículas están localizadas en cada uno de los REV en los cuales se divide el sistema para ser simulado. Por tanto, cada propiedad escalar como la concentración puede obtenerse por conteo, sobre el ensamble de partículas en cada

REV de la malla. Cabe anotar que cada propiedad calculada queda intrínsecamente afectada por el proceso estocástico.

Posteriormente, en el **Capítulo 4** se presentan el modelo numérico y el algoritmo de solución. Luego en el **Capítulo 5** se muestran algunos casos de validación y sensibilidades del modelo. Inicialmente, se plantean validaciones del transporte de componentes o especies (trazador inerte y nanopartículas) en una dimensión bajo condiciones de flujo isotérmicas. Después, se realiza un proceso de escalamiento desde el nivel de núcleo a nivel de yacimiento. Posteriormente, se valida el transporte de componentes o especies en flujo multifásico bajo condiciones no isotérmicas y finalmente se aplica el modelo a casos multidimensionales.

Finalmente, en el **Capítulo 6** se presentan conclusiones y recomendaciones asociadas a este estudio.

## 2. Descripción Física y Matemática del Transporte de Masa y Energía en Medios Porosos

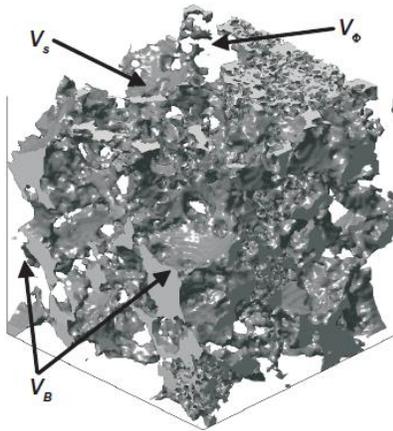
En este capítulo se discute el modelo físico y matemático del transporte de masa de fases y componentes, y el transporte de energía de forma general, determinista y bajo un marco de referencia Euleriano.

### 2.1 Modelo Conceptual y Suposiciones Básicas

Este se basa en la teoría de mecánica de medios continuos o la teoría de mezclas. El sistema está compuesto de  $n$  fases: sólido, agua, aceite, gas, etc. Además, existen componentes que pueden viajar disueltos en alguna o algunas de las fases fluidas, por ejemplo, trazadores, nanopartículas, entre otros. Para asegurar que el acople entre los campos de presión y temperatura sea multifásico y multicomponente, y para que las ecuaciones gobernantes sean cerradas, completas, compactas y compatibles, se consideran los siguientes procesos y efectos de acoplamiento, donde se incluyen:

- i. Flujo multifásico de aceite, agua y gas
- ii. Flujo multicomponente trazadores, nanopartículas, etc en cada una de los fluidos
- iii. Transporte de energía bajo condición de equilibrio
- iv. Evolución de las propiedades petrofísicas
- v. Las variables principales consideradas son: las presiones de cada fase agua, aceite y gas, las concentraciones del componente  $\alpha$  en la fase  $l = \{o, w, g\}$  y la temperatura.
- vi. Aunado a lo anterior, se tienen los siguientes fenómenos físicos: transición de fase, variación de las propiedades físicas y térmicas del fluido, variación de propiedades petrofísicas y térmicas de la roca, retención y movilización de componentes en la superficie rocosa, disolución y mezclado (Curl, 1963) de dichos componentes en las fases fluidas.

El modelo considera un REV en un medio poroso saturado y deformable, compuesto de  $n$  fases: una sólida,  $r$ ; y  $n - 1$  fluidas (ver **Figura 2-1.**).



**Figura 2-1.** Volumen elemental representativo de un medio poroso. Tomado de Bundschuh y Suarez (2010).

Para desarrollar un modelo matemático que describa un proceso completamente acoplado entre el campo de presiones y temperatura, se deben tener en cuenta las siguientes suposiciones y consideraciones:

- i. Las fases líquidas y gaseosas se mueven en los espacios interconectados del medio poroso. La fase de gas se supone como una mezcla de gas real de componentes livianos de hidrocarburos en el yacimiento. La fase líquida está compuesta de agua líquida y aceite. Donde se considera que la fase gaseosa es miscible en las fases líquidas. En contraste, las fases fluidas son inmiscibles.
- ii. Por tanto, en todo punto del espacio poroso tres presiones son consideradas, la presión del agua, del aceite y del gas. La interacción entre los fluidos se realiza a través de un término de intercambio, el cual describe la transferencia de una fase a otra y viceversa (Khalili & Lorent, 2001).
- iii. El movimiento del fluido y los componentes en el fluido siguen la ley generalizada de Darcy y la difusión de los componentes (Mostaghimi, 2012) sigue la ley de Fick generalizada (Bundschuh & Suarez, 2010). Además, se desprecian efectos viscosos e inerciales.

- iv. Las densidades de las fases son funciones de temperatura y presión, con el gas cumpliendo la ecuación de estado de gas real.
- v. Se supone equilibrio térmico para el sistema  $n$ -fásico, y la conducción de calor sigue la ley de Fourier generalizada (Chen *et al.*, 2009).

En las siguientes secciones se presenta el modelo matemático, teniendo en cuenta estas suposiciones. Inicialmente, se plantea el modelo de balance de masa y finalmente, el modelo de transporte de energía.

## 2.2 Mecanismos de Transporte de Masa

Un componente particular del fluido puede transportarse por difusión molecular y por flujo volumétrico. El movimiento del fluido por medio de estos dos mecanismos es paralelo a la dirección de la transferencia de calor por conducción y convección. De otro lado, los procesos de difusión (Mostaghimi, 2012) y conducción son resultado de las interacciones moleculares, (las cuales se presentan a nivel microscópico), mientras los procesos de flujo volumétrico y convección son fenómenos de tipo macroscópico, regidos por la *ley de Darcy* que describe el flujo de fluidos en medios porosos. Con esto en mente, se parte de conceptos básicos para obtener la ecuación general de transporte de masa en el medio poroso.

## 2.3 Ecuación de Continuidad o Balance de Masa para la Fase $l$ .

El modelo de transporte de las fases fluidas a través de un medio poroso, se basa en dos procesos: difusión debido al gradiente de saturación y un proceso de advección o convección debido al flujo total de las fases. Así, la ley de conservación de masa, aplicada a un REV arbitrario cumple con (Bear, 2018)

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \rho_l \frac{k_{lk}}{\mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \rho_l g_k \right) \right] = \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l S_l) + q^l \quad (2.1)$$

donde  $\rho_l$  es la densidad,  $k_{lk}$  es la permeabilidad intrínseca de la fase fluida. (Se hace notar que esta consideración se mantiene a lo largo del texto),  $\mu_l$  es la viscosidad,  $\rho_l$  la densidad,  $g_k$  es la componente de la aceleración de la gravedad,  $\phi$  es la porosidad,  $S_l$  es la saturación y  $l$  hace referencia a la fase.

## 2.4 Ecuación de Continuidad para el Componente $\alpha$ en la fase $l$ .

Estas ecuaciones de conservación de masa para cada componente  $\alpha$  en la fase  $l$ , son deducidas a partir de las ecuaciones de continuidad de cada fase. Aquí, se plantea la forma general de la ecuación de masa para cada componente  $\alpha$  en cada fase  $l$  en un sistema multifásico, lo cual se puede expresar por extensión de la ecuación de transporte masa de una fase como ( Bear, 2018)

$$\frac{\partial}{\partial t}(y_{\alpha l}\phi S_l\rho_l) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(y_{\alpha l}\rho_l\frac{k_{lk}}{\mu_l}\left(\frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \rho_l g_k\right) + \rho_l D_{\alpha lk}\frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k}\right) + y_{\alpha l}q_l + \sum_{l'}\dot{m}_{\alpha ll'} = 0 \quad (2.2)$$

donde  $y_{\alpha l}$  es la concentración del nanofluido  $\alpha$  en la fase  $l$ ,  $\rho_l$  es la densidad,  $k_{lk}$  es la permeabilidad intrínseca de la fase fluida,  $\mu_l$  es la viscosidad,  $g_k$  es la componente de la aceleración de la gravedad,  $\phi$  es la porosidad,  $S_l$  es la saturación,  $D_{\alpha lk}$  es el coeficiente de dispersión,  $q^l$  es el término másico de fuentes y sumideros y  $\dot{m}_{\alpha ll'}$  es la tasa de transferencia de masa del componente  $\alpha$  de la fase  $l$  a la fase  $l'$ .

### 2.4.1 Términos de Transferencia de Masa Debido a Efectos de Sorción, Retención/Movilización

Los términos de transferencia de masa  $\dot{m}_{\alpha lr}$  del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  con  $l \in \{o, w, g\}$ , se describen a través del modelo de doble sitio ( Zhang, 2012) que se escriben como.

$$\dot{m}_{\alpha l r} = -\frac{(1-\phi)\rho_r}{\phi S_l} \left( \frac{\partial x_{1\alpha l r}}{\partial t} + \frac{\partial x_{2\alpha l r}}{\partial t} \right) \quad (2.3)$$

donde  $x_{1\alpha l r}$  es la concentración en porcentaje en peso del componente  $\alpha$  de la fase  $l$  que es retenida en la roca de forma irreversible,  $x_{2\alpha l r}$  es la concentración del componente  $\alpha$  de la fase  $l$  que es retenida en la roca de forma reversible y  $\rho_r$  es la densidad de la matriz, roca o fase sólida, además la *tasa de adsorción irreversible* del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  se puede escribir como

$$\frac{(1-\phi)\rho_r}{\phi S_l} \frac{\partial x_{1\alpha l r}}{\partial t} = k_{irr,\alpha r} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r,max}} \right) y_{\alpha l} \quad (2.4)$$

donde  $k_{irr,\alpha r}$  es la constante de irreversibilidad entre el componente  $\alpha$  y la roca,  $x_{1\alpha r}$  es la concentración irreversible en porcentaje en peso total del componente  $\alpha$ . De otro lado, se tiene la *retención reversible* y la *movilización*, descrita por

$$\frac{(1-\phi)\rho_r}{\phi S_l} \frac{\partial x_{2\alpha l r}}{\partial t} = k_{ra\alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r,max}} \right) y_{\alpha l} - \frac{(1-\phi)\rho_r}{\phi S_l} k_{rd,\alpha l r} x_{2\alpha r} \quad (2.5)$$

con  $k_{ra\alpha l r}$  como la constante de retención reversible de la roca, asociado al componente  $\alpha$  presente en la fase  $l \in \{o, w, g\}$ ,  $x_{2\alpha r}$  siendo la concentración reversible en porcentaje en peso total del componente  $\alpha$  y  $k_{rd,\alpha l r}$  definida como la constante de movilización de la matriz o roca del componente  $\alpha$ . Esta permite que se movilice y retorne masa del componente  $\alpha$  a la fase  $l$ .

## 2.4.2 Términos de Transferencia de Masa Debidos a Disolución usando Modelo de Partición

La transferencia de masa del componente o la especie  $\alpha$  entre las fases fluidas se considera a través del modelo de partición. Este modelo propone que la concentración del componente  $\alpha$  en la fase de destino, es proporcional a la concentración de esta especie en la fase de referencia. En este modelo se supone que existe equilibrio del potencial químico en la interface, que se relaciona linealmente con una relación de partición como

sucede en la ley de Henry o la ley de Rault (Soulaine, *et al.*, 2011). Así, la constante de proporcionalidad se conoce como el coeficiente de partición  $\varepsilon_{all'}$  y matemáticamente puede ser escrito como

$$y_{\alpha l} = \varepsilon_{all'} y_{\alpha l'} \quad (2.6)$$

con  $l'$  siendo la fase de referencia y  $l \in \{o, g, w\}$ .

## 2.5 Ecuación General de Energía

Teniendo en cuenta que los mecanismos más importantes de transporte de calor, el flujo de energía total debida al flujo de fluido en la dirección  $k$  es la suma de las componentes conductivas, convectivas y debidas a los cambios que experimenta la matriz del medio poroso. Además, considerando que la primera ley de la termodinámica dice que la energía del sistema se debe conservar, se obtiene la siguiente expresión a (Bear, 2018).

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x_k} + v_{lk} \rho_l c_{pl} T_l \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left[ (1 - \phi) \rho_r c_{pr} \Delta T + \phi \sum_{l=1}^{n-1} S_l \rho_l e_l \right] + \dot{Q}_{Tl} \quad (2.7)$$

con  $\rho_l$  y  $e_l$  como la densidad de energía interna por unidad de masa de la fase  $l$ , correspondientemente,  $c_{pl}$  es la capacidad calorífica a presión constante y  $T$  es la temperatura de la fase  $l$ . Luego de presentar las ecuaciones diferenciales asociadas a los campos presentes en el medio poroso. Se presentan las condiciones limite y de frontera para el sistema analizado.

## 2.6 Condiciones Iniciales y de Frontera

Estas condiciones son necesarias para resolver el sistema de ecuaciones de transporte de masa y de energía. A continuación, se presentan las condiciones iniciales y frontera.

### 2.6.1 Condición inicial

La *condición inicial* está asociada con el valor de la variable  $w_i$  en el tiempo  $t_0 = 0$  determinada por la siguiente condición:

$$w(x_1, x_2, x_3, t_0) = w_i, \quad t_0 = 0 \wedge \forall x_k \text{ con } k = \{1,2,3\} \quad (2.8)$$

Donde  $w = P_l(x_1, x_2, x_3, t_0)$  y  $w_i = P_i$  para la ecuación de transporte de masa, son la presión inicial igual a la presión del yacimiento, respectivamente. De otro lado,  $w = T_l(x_1, x_2, x_3, t_0)$  y  $w_i = T_i$  para la ecuación de transporte de energía, son la temperatura inicial igual a la temperatura del yacimiento, correspondientemente.

### 2.6.2 Condiciones de Frontera

En las *fronteras del dominio*, la condición se puede generar desde dos puntos de vista. La primera *condición es tipo Dirichlet* donde la variación de la variable en el tiempo es conocido (Borja, 2013)

$$[w]_{Frontera} = 0 \quad (2.9)$$

Con  $w \in \{P, T\}$ . El segundo tipo de son *condiciones tipo Neumann* (Borja, 2013)

$$[q_l]_{Frontera} = Constante \quad (2.10)$$

donde  $q_l$  es el *flux* de masa o de energía, dependiendo de cual ecuación se está utilizando si transporte de masa o de energía.



### **3. Capítulo 3 - Descripción Estocástica del Transporte de Masa en Medios Porosos**

El capítulo presenta los aspectos más relevantes de la teoría de transporte de masa bajo un marco de referencia estocástico. Por tanto, se muestran los fundamentos básicos de la teoría considerando inicialmente una descripción Euleriana y determinista de las ecuaciones de flujo y luego se hace una formulación Lagrangiana, usando el método de Bargiel (Bargiel & Tory, 2015) y Tyagi (Tyagi, 2010), donde dichas ecuaciones son modeladas por ecuaciones de Chapman – Kolmogorov atrasada o la ecuación de Fokker – Planck. Entonces se muestra la equivalencia de las formulaciones. Posteriormente, se avanza hacia una formulación Lagrangiana basada en representar el REV en términos de partículas o parcelas de fluidos o componentes que evolucionan en el espacio y el tiempo bajo la ecuación de Langevin (Subramaniam, 2013).

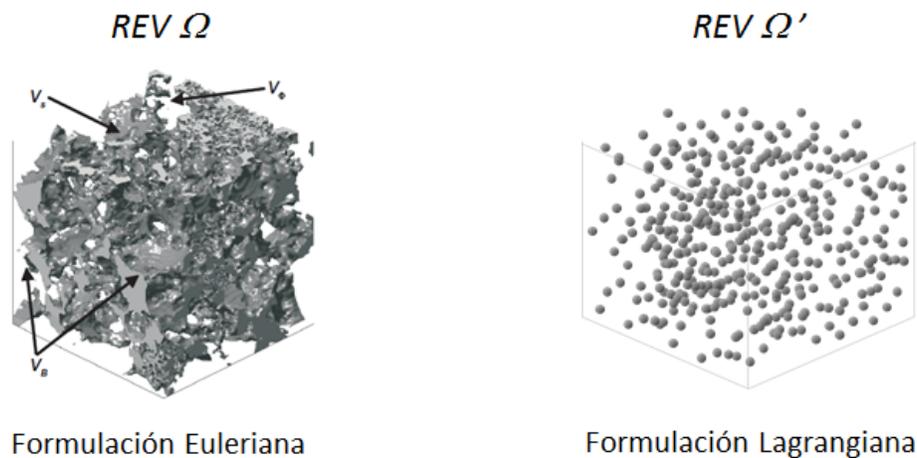
La parte probabilística del método híbrido presenta una ecuación de Langevin (Subramaniam, 2013), asociada a cada partícula computacional que representa una “gota” o parcela de fluido que tiene asociadas características de posición y escalares como tipo de fase, concentraciones de componentes o especies, temperatura, etc. La evolución temporal de la posición contiene un término estadístico, asociado a un proceso Browniano o de Wiener, el cual se distribuye de forma Gaussiana con media cero y varianza proporcional a raíz de la variación temporal.

Finalmente, el método de partículas permitirá describir apropiada y convenientemente los procesos de flujo de materia, los cuales son sometidos a una inyección de nanofluidos, donde se tienen en cuenta tres fenómenos principales:

- i. la evolución del campo de saturaciones y de concentraciones.
- ii. los campos de presión y temperatura, los cuales se representan mediante una malla discreta y se calculan mediante un proceso determinista usando información del método probabilístico.

### 3.1 Modelo Lagrangiano Probabilístico de Transporte de Masa

Para lograr la descripción Lagrangiana del modelo de transporte de masa, se debe pasar de un REV cuyo dominio es  $\Omega$ , a un conjunto de partículas que representan parcelas de cada una de las fases presentes en el REV y cuyo conjunto cumple que su dominio es semejante al REV, es decir  $\Omega' \subseteq \Omega$ . En la **Figura 3-1** se representa esquemáticamente el REV en cada marco de referencia Euleriano y Lagrangiano.



**Figura 3-1.** Representación esquemática del REV en las formulaciones Euleriana y Lagrangiana.

Además, una de las consideraciones que se deben cumplir para describir el flujo de fluidos de forma Lagrangiana, es que las formulaciones en ambos marcos de referencia deben ser equivalentes. Luego se debe plantear bajo que método se soluciona el sistema de ecuaciones. En las siguientes secciones se plantean estos temas

#### 3.1.1 Modelo Lagrangiano Probabilista de Transporte del Componente $\alpha$ en la Fase $l$

A continuación, se muestra la equivalencia entre el método Euleriano y la descripción Lagrangiana, en un proceso difusivo, identificando el cómo evolucionan las

partículas en el medio poroso. Primero, se caracteriza la velocidad y los factores o procesos generadores o aniquiladores de partículas en un REV.

Partiendo de la ecuación (2.2) se tiene un componente  $\alpha$ , (como nanopartícula), en una fase  $l$  entonces la concentración de partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  puede representarse como  $y_{i\alpha l} = w_{i\alpha l} \rho_{\alpha l}^{pn}$  donde  $w_{i\alpha l}$  es el factor de peso de la partícula computacional, la cual pertenece al componente  $\alpha$  en la fase  $l$  y  $\rho_{\alpha l}^{pn}$  es la densidad de número de partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ .

Ahora, usando integración de la expresión (2.2) sobre el volumen de control  $\Omega' \subseteq \Omega$ , se obtiene que el número de partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ ,  $n_{\alpha l}^{\Omega'}$  es (Tyagi, 2010)

$$n_{\alpha l}^{\Omega'} = \int_{\Omega'} \rho_{\alpha l}^{pn} d\Omega' = \int_{\Omega'} \frac{y_{i\alpha l}}{V_{i\alpha l}} d\Omega' \quad (3.1)$$

Paralelamente, retomando la ecuación (2.2) e integrando sobre el volumen de control  $\Omega' \subseteq \Omega$ , se busca obtener el número de partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  así: (Tyagi et al., 2008)

$$\int_{\Omega'} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( -y_{\alpha l} \rho_l \frac{k_{lk}}{\mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} \right) - n^l \rho_l D_{\alpha lk} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right)_i d\Omega' = \int_{\Omega'} \frac{\partial}{\partial t} (y_{\alpha l} \phi S_l b_l)_i d\Omega' + \int_{\Omega'} \left( y_{\alpha l} q^l + \sum_{l'} \dot{m}_{\alpha l l'} \right)_i d\Omega' \quad (3.2)$$

con  $i \in \{1, 2, \dots, np\}$  partículas computacionales. Ahora, usando el teorema de la divergencia de Gauss, se puede desarrollar una expresión equivalente, donde las integrales espaciales se reducen de volumétricas a superficiales. Por tanto

$$\int_{\partial\Omega'} \left( -y_{\alpha l} \rho_l \frac{k_{lk}}{\mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} \right) - n^l \rho_l D_{\alpha lk} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right)_i \cdot \hat{n} dA = \int_{\Omega'} \frac{\partial}{\partial t} (y_{\alpha l} \phi S_l b_l)_i d\Omega' + \int_{\Omega'} \left( y_{\alpha l} q^l + \sum_{l'} \dot{m}_{\alpha l l'} \right)_i d\Omega' \quad (3.3)$$

donde  $\hat{n}$  es el vector unitario normal a la superficie  $\partial\Omega'$ . Además, se identifica que la velocidad en cada dirección  $k$ , con  $k \in \{x_1, x_2, x_3\}$ , la cual corresponde al coeficiente que multiplica el vector  $\hat{n}$ , en el miembro izquierdo de la ecuación (3.3). Conjuntamente, se observa que el término mencionado, se compone de dos términos los cuales se asocian a la velocidad advectiva y la velocidad asociada a efectos dispersivos/difusivos, correspondientemente.

Por otro lado, en la ecuación (3.3) se observa que la fracción del espacio poroso, ocupado por las partículas del componente  $\alpha$  (por ejemplo, nanopartículas) en la fase  $l = \{o, g, w\}$  es la relación entre el volumen que ocupan las partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ ,  $V_{y_{\alpha l}}$  y el volumen total  $V_T$ , así

$$\frac{V_{y_{\alpha l}}}{V_T} = \frac{y_{\alpha l} V_l}{V_T} = y_{\alpha l} \phi S_l b_l \quad (3.4)$$

en adición se tiene que la concentración volumétrica de una partícula  $i$  es  $y_{i\alpha l} = w_{i\alpha l} \rho_{\alpha l}^{pn}$  donde se considera que  $w_{i\alpha l} = V_{i\alpha l}$ , con  $V_{i\alpha l}$  como el volumen de la nanopartícula o partícula del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  y el volumen de la nanopartícula se considera *compresible*, además  $\rho_{\alpha l}^{pn}$  es el número de nanopartículas  $\alpha$  por volumen. Por tanto en  $\Omega$

$$\frac{V_{y_{\alpha l}}}{V_T} = \sum_i y_{i\alpha l} = \rho_{\alpha l}^{pn} \sum_i w_{i\alpha l} \quad (3.5)$$

Ahora, igualando las ecuaciones (3.4) y (3.5) se obtiene

$$\rho_{\alpha l}^{pn} \sum_i V_{i\alpha l} = y_{\alpha l} \phi S_l b_l \quad (3.6)$$

que para una partícula del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  toma la forma

$$\rho_{\alpha l}^{pn} V_{i\alpha l} = (y_{\alpha l} \phi S_l b_l)_i \quad (3.7)$$

donde se remarca que  $V_{i\alpha l} = w_{i\alpha l}$ , es decir se utiliza el factor de peso igual al volumen de la partícula del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ . Considerando que la ecuación (3.3) es aplicada a una partícula computacional  $i$ , se reemplaza la ecuación (3.7) en la ecuación (3.3) y se divide por  $V_{i\alpha l}$ , además se aplica el teorema de Fubini a la derivada temporal, obteniéndose

$$\begin{aligned}
& \int_{\partial\Omega'} \underbrace{\frac{1}{V_{ial}} \left( -y_{\alpha l} \frac{k_{lk}}{\mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} \right) \right)}_{F_{\alpha l, k}} \cdot \hat{n} dA + \int_{\partial\Omega'} \underbrace{\frac{1}{V_{ial}} \left( -\phi b_l S_l D_{\alpha l, k} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right)}_{F_{D\alpha l, k}} \cdot \hat{n} dA = \\
& \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\int_{\Omega'} (\rho_{\alpha l}^{pn})_i d\Omega'}_{n_{\alpha l}^{\Omega'}} + \frac{1}{V_{ial}} \int_{\Omega'} \left( y_{\alpha l} q_l + \sum_{l'} \dot{m}_{y_{\alpha l} l'} \right)_i d\Omega' \quad (3.8)
\end{aligned}$$

con  $F_{\alpha l, k}$  como el *flux* debido a efectos convectivos y asociado a la fase donde se transporta la partícula  $i$  del componente  $\alpha$  en las direcciones  $k \in \{x_1, x_2, x_3\}$ , y  $F_{D\alpha l, k}$  el *flux* generado por fenómenos dispersivos/difusivos asociado a la fase donde se transporta la partícula  $i$  del componente  $\alpha$  en las direcciones  $x_1, x_2$  y  $x_3$ , además, el término del lado izquierdo de la ecuación (3.8) describe la contribución debida al flujo de partículas que cruzan la superficie  $\partial\Omega'$ , en cada posición particular (o donde se localiza la partícula computacional), de otro lado, el primer término del lado derecho de la ecuación (3.8) es la tasa de cambio a la cual el número  $n_{\alpha l}^{\Omega'}$  de partículas computacionales asociadas a las partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  que cambian en el volumen  $\Omega'$ . Los últimos términos del miembro derecho, se asocian a la tasa de variación de partículas que son creadas o exterminadas  $\frac{1}{V_{ial}} \int_{\Omega'} (y_{\alpha l} q_l)_i d\Omega$ , es decir, que entran o salen del volumen  $\Omega'$  y en otro términos son las contribuciones asociadas a transferencia a la fase  $l$  de las partículas del componente  $\alpha$  presentes en las fases fluidas diferentes a la fase  $l$   $\frac{1}{V_{ial}} \int_{\Omega'} (\sum_{l'} \dot{m}_{y_{\alpha l} l'})_i d\Omega$  que pasan hacia la fase  $l'$ , así como la transferencia de las partículas computacionales del componente  $\alpha$  de la matriz o roca hacia la fase  $l$  o viceversa  $\frac{1}{V_{ial}} \int_{\Omega'} (\dot{m}_{y_{\alpha l} r})_i d\Omega$ .

A continuación, se muestra que la evolución de la concentración de la partícula  $y_{ial}$  es consistente con la ecuación determinista (3.2) si las  $i$  partículas son transportadas con velocidad

$$v_{il, k}^* = \frac{F_{ial, k} + F_{iD\alpha l, k}}{y_{ial}} = \frac{F_{ial, k} + F_{iD\alpha l, k}}{(y_{\alpha l} \phi S_l b_l)_i} = \frac{F_{ial, k} + F_{iD\alpha l, k}}{w_{ial} \rho_{\alpha l}^{pn}} \quad (3.9)$$

con  $k \in \{x_1, x_2, x_3\}$ , donde el superíndice \* denota que una cantidad es una propiedad de la partícula y  $w_{ial} = V_{ial}$ . Note que éste es una extensión del modelo propuesto por Tyagi

et al. 2008. Mientras  $v_{il,k}^*$  es la componente de la velocidad de una partícula individual  $i$ , en la fase aceite en la dirección  $k$ ,  $\rho_{\alpha l}^{pn}$  es la densidad de número de partícula en su vecindad. Además, se está considerando que se conoce el *flux* y la densidad de la partícula en la posición donde se localiza ésta. Así la tasa de flujo de partículas computacionales del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  que cruza un elemento de superficie  $dA$  es

$$\rho_{\alpha l}^{pn} v_{il,k}^* n_k dA = \rho_{\alpha l}^{pn} \frac{F_{i\alpha l,k} + F_{iD\alpha l,k}}{y_{i\alpha l}} n_k dA = \frac{F_{i\alpha l,k} + F_{iD\alpha l,k}}{w_{i\alpha l}} n_k dA \quad (3.10)$$

con  $k \in \{x_1, x_2, x_3\}$ , la cual es idéntica a la suma de los argumentos  $\mathcal{F}_{\alpha l,k}$  y  $\mathcal{F}_{D\alpha l,k}$  definidos en la ecuación (3.8). Así, se muestra que la ecuación (3.3) se resuelve de forma consistente, si las partículas evolucionan de acuerdo a las ecuaciones (3.5). Además, es cierto para cualquier volumen  $\Omega' \subseteq \Omega$ , que la solución de partículas converge a la solución exacta si  $|\Omega'| \rightarrow 0$  y el número de partículas se incrementa.

Con el fin de obtener la componente aleatoria asociada al proceso dispersivo, se aplica el procedimiento propuesto por Bargiel (Bargiel & Tory, 2015), al primer término de la ecuación (3.2) o la velocidad asociada al proceso de dispersión, definida en la ecuación (3.10), donde se hace notar que en dicho término se consideran fenómenos a escala de poro que generan efectos dispersivos en las escalas del medio continuo, por ejemplo, debido a las diferencias de presión capilar, difusión molecular y dispersión mecánica. Por tanto es de esperar que a nivel macroscópico no existan frentes infinitamente fuertes, agudos, sostenidos, nítidos o marcados.

Consecuentemente, la dispersión mecánica puede ser tratada a partir de la ley de Fick, en la ecuación (3.2). Ahora, usando el procedimiento de Bargiel, se puede tener la forma de la ecuación de posición para las partículas estocásticas. Para esto se toma el término

$$\frac{\partial}{\partial x_k} F_{iD\alpha l, x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \phi b_l S_l D_{\alpha l x_k} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right)_i \quad (3.11)$$

de la ecuación (3.11), aplicando propiedades de la derivada, se tiene

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k} y_{\alpha l}) \right]_i = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \phi b_l S_l D_{\alpha l x_k} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right)_i + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ y_{\alpha l} \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right]_i \quad (3.12)$$

La ecuación (3.12), se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \phi b_l S_l D_{\alpha l x_k} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k} \right)_i = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k} y_{\alpha l}) \right]_i - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \underbrace{y_{\alpha l} \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k}}_{\substack{\text{velocidad asociado} \\ \text{a dispersion/difusión}}} \right]_i \quad (3.13)$$

donde el *drift*  $b_D(t, x_k)$  se define como

$$b_D(t, x_k) = \frac{1}{\phi S_l b_l} \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial x_k}$$

o aplicando la regla de la cadena

$$b_D(t, x_k) = \frac{1}{\phi S_l b_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \quad (3.14)$$

con el subíndice  $D$  se hace referencia a efectos de dispersión/difusión y los términos asociados a la ecuación diferencial estocástica (SDE) correspondiente al término analizado en la ecuación (3.11) son

$$dX_{D_{\alpha l x_k}}^* = \frac{1}{\phi S_l b_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) dt + \frac{1}{\phi S_l b_l} \sqrt{2\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}} dW_{x_k} \quad (3.15)$$

Sin embargo, se hace notar que en el primer término del miembro derecho de la ecuación (3.3) la variable  $y_{\alpha l}$  está acompañada del coeficiente  $\phi b_l S_l$ , como lo propone la ecuación (3.9). Por tanto, al considerarlo constante para el tiempo de análisis, entonces la ecuación (3.15) toma la siguiente forma, la cual puede ser generalizada para las fases fluidas y para las direcciones así

$$dX_{Dialx_k}^* = \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{alx_k}) dt + \sqrt{2 \frac{D_{alx_k}}{\phi b_l S_l}} dW_{x_k} \quad (3.16)$$

con  $k \in \{x_1, x_2, x_3\}$  y  $l \in \{o.g.w\}$  y  $D$  hace referencia a un proceso dispersivo/difusivo como se ha mencionado. Ahora, se puede tener la ecuación diferencial estocástica que representa la evolución de la posición de la partícula, la cual cambia debido a los efectos advectivo y dispersivo/difusivo. Por tanto,  $dX_{ialx_k}^* = dx_{Aialx_k}^* + dX_{Dialx_k}^*$ , donde  $A$  se asocia al efecto advectivo. Así, usando la ecuación (3.16) se obtiene

$$dX_{ialx_k}^* = \frac{F_{ialx_k}}{\phi S_l b_l} dt + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{alx_k}) dt + \sqrt{2 \frac{D_{alx_k}}{\phi b_l S_l}} dW_{x_k} \quad (3.17)$$

con  $k \in \{x_1, x_2, x_3\}$  y  $l \in \{o.g.w\}$ . Donde se observa que los términos de almacenaje no intervienen en la ecuación de evolución estocástica, o son caracterizados por la presión del fluido y están afectados por las variaciones de las propiedades físicas de los fluidos de cada fase, los campos actuantes sobre el medio poroso y las propiedades de las rocas como (petrofísicas, térmicas y mecánicas).

Ahora se describen las ecuaciones de estado o constitutivas, asociadas con el sistema. Entre las ecuaciones están el número de Peclet, el modelo de mezclado de Curl modificado.

### 3.1.1.1 Numero de Peclet

Este número adimensional relaciona la velocidad de flujo en una longitud determinada del medio, respecto a la difusión que se presenta en dicho medio (Tyagi *et al.*, 2008); (Mostaghimi, 2012); (Coutelieris & Delgado, 2012)

$$Pe = \frac{v \Delta x}{D} \quad (3.18)$$

donde  $\Delta x$  es el tamaño de celda o el espacio utilizado para el SPM y  $v$  es la velocidad Darcy.

### 3.1.1.2 Modelo de Mezclado de Curl

Continuando con las ecuaciones constitutivas, el proceso de dilución o mezclado molecular de concentración, descrito por la ecuación (2.6) se modela como una generalización del modelo de mezcla de Curl modificado (Janicka, *et al.*, 1977), que tiene en cuenta la velocidad. Inicialmente, este modelo describe el intercambio de masa de gotas colisionantes con diferentes concentraciones en dos fases líquidas. Suponiendo similitud entre las gotas y las partículas, el modelo de Curl podría integrarse a esta formulación (Meyer y Jenny, 2009; Meyer *et al.*, 2010). Aquí las partículas intercambian masa en pares. Estas parejas se seleccionan aleatoriamente a través de una variable que se distribuye uniformemente.

$$dy_{\alpha i}/dt = b(y_m - y_{\alpha i}) \quad (3.19)$$

donde  $y_m$  es la media aritmética de las concentraciones del par de partículas que interactúan y  $b$  es un número aleatorio distribuido uniformemente en el intervalo entre 0 y 1. Además,  $y_m = (y_{\alpha i} + y_{\alpha j})/2$ ,  $i$  y  $j$  son índices de dos partículas seleccionadas al azar de una celda de malla determinada. Aunado a lo anterior, la disminución temporal de la desviación estándar de las concentraciones está controlada por el número de pares de partículas  $Np_m$  que participan en el proceso de mezcla durante un paso de tiempo  $\Delta t$ , determinado como (Meyer *et al.*, 2010)

$$Np_m = \frac{k_c Np \Delta t}{\tau} \quad (3.20)$$

Aquí,  $k_c$  es un parámetro del modelo de mezcla que depende del número de Peclet,  $Np$  es el número total de partículas en la celda de la cuadrícula y  $\tau$  es una escala de tiempo que se establece igual a  $L/v$  (Meyer *et al.*, 2010).

## 3.1.2 Modelo Lagrangiano Probabilista de Transporte de la Fase $l$

Aplicando un procedimiento análogo al utilizado en la **Sección 3.2.1** sobre la ecuación (2.2) se obtiene

$$dX_{ilx_k}^* = \frac{F_{ilx_k}}{\phi S_l b_l} dt + \sqrt{2 \frac{D_{lx_k}}{\phi b_l S_l}} dW_{x_k} \quad (3.21)$$

la cual es una ecuación de Langevin para el cálculo de la posición cuando no se consideran efectos Fickianos.

En esta **Sección 3.1**, se ha mostrado la equivalencia y la forma que toma la ecuación de advección-difusión, desde un punto de vista Lagrangiano. Ahora se plantea el modelo de transporte de materia en medios porosos de una forma más general y utilizando la ecuación de Fokker-Planck y la PDF.

## 3.2 Modelo de Transporte de Masa Multifásico y Multicomponente usando PDF

En general la teoría del medio continuo y la teoría de mezclas en este trabajo se consideran teorías deterministas donde básicamente se trabaja con el valor promedio de cada propiedad que caracteriza el sistema. Por ejemplo, la velocidad del fluido está descrita por la ley de Darcy, bajo la condición de flujo laminar, cada una de las propiedades que se usan para el cálculo de dicha velocidad, es el valor promedio de éstas. Así, se puede generalizar este hecho, para cada una de las ecuaciones que conforman el modelo.

La pregunta entonces es como se obtiene la ecuación de masa determinista desde un punto de vista probabilista. La respuesta es que la ecuación de flujo, se obtiene de la ecuación de Chapman – Kolmogorov. Esta ecuación tiene dos variantes adelantada y retrasada. Esta última se conoce como la ecuación de Fokker – Planck. Estas ecuaciones describen la evolución de una función de densidad de probabilidad o (PDF por sus siglas en inglés) en un espacio de probabilidad de la forma  $\psi - m - l - x$ , donde  $\psi \in \mathbb{R}^{d_\psi}$ ,  $l \in \mathbb{I}$  y  $x \in \mathbb{R}^3$  son los espacios muestrales individuales de las variables estocásticas  $\psi(t)$ ,  $L(t)$  y  $X(t)$ , respectivamente.

Luego, con el fin de obtener una ecuación de masa probabilista, por ejemplo para una fase  $l$ , a la ecuación de Fokker – Planck se le aplica el operador promedio de Frave sobre los subespacios de probabilidad  $\psi - m$  y con el operador  $L(t) = l$  se obtiene dicha ecuación de flujo. A continuación, se presentan los aspectos más relevantes del proceso.

Con el fin de acortar la deducción del modelo probabilístico, se parte desde la descripción más general, la cual relaciona la ecuación de transporte de masa del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  y posteriormente, se avanza hacia la obtención del modelo de transporte de masa de la fase  $l$ .

### 3.2.1 Modelo Probabilístico de Transporte de Masa del Componente o Especie $\alpha$ en la Fase $l$

Para aclarar el procedimiento que se usa al considerar los índices y subíndices se define a continuación una serie de vectores, espaciales y de concentración con los cuales se construye el espacio de probabilidad  $\mathbb{R}^d$ , con  $d > 3$ , donde toma valores la ecuación de Fokker - Planck. Adicionalmente, se hace notar que con este procedimiento es trivial la expansión del espacio  $\mathbb{R}^d$ , cuando se desea considerar otras variables como el campo de esfuerzos, la temperatura, reacciones químicas, interacciones electromagnéticas, entre otras.

Inicialmente, se define el vector posición  $x = [x_1, x_2, x_3]$ , que en nuestro caso de estudio pueden ser coordenadas cartesianas  $[x_1, x_2, x_3] = [x, y, z]$ , por tanto, el espacio vectorial generado por las componentes de este vector es  $\mathbb{R}^3$  y el diferencial de volumen es

$$\Delta V_{\mathbb{R}^3} = \Delta x = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 \quad (3.22)$$

De otro lado, se definen el vector de fases líquidas presentes en el sistema  $L = [l_1, \dots, l_{n'}]$  y el vector de componentes o especies en cada fase  $A = [\alpha_1, \dots, \alpha_n]$ , donde  $n'$  y  $n$  son el número de fases líquidas y la cantidad de componentes en cada fase, respectivamente. Además, se considera que  $l \in L$  y  $\alpha \in A$ .

Ahora la idea es construir el diferencial de volumen en el espacio de los componentes en cada fase. Así que el espacio es  $\bar{y} := A \otimes L: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n'} \rightarrow \mathbb{R}^{(n+n')}$  donde  $\bar{y} = [y_{l_1}, \dots, y_{l_{n'}}]$  y  $y_{l_m} =$

$[y_{\alpha_1 l_m}, \dots, y_{\alpha_n l_m}]$  con  $m = [1, \dots, n']$ . Luego el diferencial de volumen en el espacio  $\bar{y} := \mathbf{A} \otimes \mathbf{L}^T: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n'} \rightarrow \mathbb{R}^{(n+n')}$  es

$$\Delta V_{\mathbb{R}^{n+n'}} = \Delta \bar{y} = \prod_{m=1}^{n'} \Delta y_m = \prod_{j=1}^n \prod_{m=1}^{n'} \Delta y_{\alpha_j l_m} \quad (3.23)$$

Finalmente, el diferencial de volumen total en el espacio de posición, fase y composición  $\mathbf{x} \otimes \bar{y}: \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n'} \rightarrow (\mathbb{R}^{3+n+n'})$  es obtenido multiplicando las ecuaciones (3.22) y (3.23)

$$\Delta V = \Delta V_{\mathbb{R}^3} \Delta V_{\mathbb{R}^{n+n'}} = \Delta \mathbf{x} \Delta \bar{y} = \Delta \mathbf{x} \prod_{m=1}^{n'} \Delta y_m = \prod_{k=1}^3 \prod_{j=1}^n \prod_{m=1}^{n'} \Delta x_k \Delta y_{\alpha_j l_m} \quad (3.24)$$

Con lo anterior en mente se procede a obtener la ecuación de Fokker - Planck para un componente  $\alpha_l = \alpha$  en la fase  $l_m = l$ , la cual describe la evolución de la función de distribución de masa (MDF por sus siglas en inglés) para dicho componente en una fase específica.

#### ▪ Ecuación de Fokker – Planck Para Componente $\alpha$ en la Fase $l$

La deducción de esta ecuación se realiza usando la función de distribución de masa MDF (Tyagi, 2010) en los espacios físico y de composición siguiendo el procedimiento de Pope (1985). Así, si  $f^{\alpha l}(\mathbf{y}; \mathbf{x}, t)$  es la PDF de factor de peso másico condicional de  $Y_{\alpha l}$  para la fase  $l$ ,  $\bar{y} = [y_{\alpha_1 l_1}, \dots, y_{\alpha_n l_1}, y_{\alpha_1 l_2}, \dots, y_{\alpha_n l_2}, y_{\alpha_1 l_3}, \dots, y_{\alpha_n l_3}]$ ,  $\mathbf{L} = [l_1, l_2, l_3] = [o, w, g]$ , y  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3]$  con  $x_k$  como la dirección  $k$ , la MDF del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  en el sistema multifásico puede expresarse como  $\mathcal{F}(y_{\alpha l}; \mathbf{x}; t) = \mathcal{F}(\alpha, l, \mathbf{x}; t) = \phi \rho_{\alpha l}(\mathbf{x}, t) S_l(\mathbf{x}, t) f^{\alpha l}(\alpha, l; \mathbf{x}, t)$ , donde la densidad  $\rho_{\alpha l}(\mathbf{x}, t) = \rho_l(\mathbf{x}, t) y_{\alpha l}(\mathbf{x}, t)$ .

Además, por definición  $\mathcal{F}(\alpha, l, \bar{y}; \mathbf{x}; t) dx_1 dx_2 dx_3 dy_{\alpha_1 l_1}, \dots, dy_{\alpha_n l_1}, dy_{\alpha_1 l_2}, \dots, dy_{\alpha_n l_2}, dy_{\alpha_1 l_3}, \dots, dy_{\alpha_n l_3}$  (o simplemente  $\mathcal{F}(\alpha, l, \bar{y}; \mathbf{x}; t) dV$ ), es la masa del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  en un volumen  $dV = dx_1 dx_2 dx_3 dy_{\alpha_1 l_1}, \dots, dy_{\alpha_n l_1}, dy_{\alpha_1 l_2}, \dots, dy_{\alpha_n l_2}, dy_{\alpha_1 l_3}, \dots, dy_{\alpha_n l_3}$  en el espacio  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$  en el tiempo  $t$ . Cualquier momento estocástico de  $y_{\alpha l}$  puede obtenerse si se conoce la MDF, usando el promedio de Favre, así

$$\int y_{\alpha l}^n \mathcal{F}(\alpha, l, \mathbf{x}; t) dy_{\alpha l} = \phi \rho_{\alpha l}(\mathbf{x}, t) S_l(\mathbf{x}, t) \overline{Y_{\alpha l}^n | A = \alpha(\mathbf{x}, t), L = l(\mathbf{x}, t)} \quad (3.25)$$

con  $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$  considerando que  $\overline{Y_{\alpha l}^n | A = \alpha(\mathbf{x}, t), L = l(\mathbf{x}, t)}$  es el momento estadístico  $n$ -ésimo condicional con factor de peso másico de  $Y_{\alpha l}$ . Aquí, la ecuación de conservación de masa para la función de densidad de masa generalizada  $\mathcal{F}(\alpha, l, x_1, x_2, x_3; t) = \mathcal{F}(\alpha, l, \mathbf{x}; t)$ , (la cual se define así, para efectos de compactar la notación al deducir la ecuación diferencial de conservación de masa y para un mejor entendimiento de éste) está dada por la ecuación de Fokker – Planck.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x_1} \left\{ \left\langle \frac{dX_1}{dt} \middle| \alpha, l, dx_1, x_2, x_3; t \right\rangle \mathcal{F} \right\} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_2} \left\{ \left\langle \frac{dX_2}{dt} \middle| \alpha, l, x_1, dx_2, x_3; t \right\rangle \mathcal{F} \right\} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_3} \left\{ \left\langle \frac{dX_3}{dt} \middle| \alpha, l, x_1, x_2, dx_3; t \right\rangle \mathcal{F} \right\} \\ & + \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left\langle \frac{dy_{\alpha l}}{dt} \middle| dy_{\alpha l}, \mathbf{x}; t \right\rangle \mathcal{F} \right\} \quad (3.26) \end{aligned}$$

La cual se deduce de forma análoga a la conservación de masa sobre el REV, el cual tiene la forma de la ecuación (3.24). La ecuación (3.26) representa la masa del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ , en un volumen de control infinitesimal de tamaño  $(dx_1 dx_2 dx_3 dy_{\alpha l_1} \dots dy_{\alpha n l_1} dy_{\alpha l_2} \dots dy_{\alpha n l_2} dy_{\alpha l_3} \dots dy_{\alpha n l_3})$ , el cual conduce a la ecuación de transporte MDF para dicho componente que se escribe de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \{ D_k^x \mathcal{F} \} + \frac{\partial}{\partial y_{\alpha j}} \{ D^{y_{\alpha j}} \mathcal{F} \} = \\ \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{k'}} \{ D_{kk'}^{xx} \mathcal{F} \} + \frac{\partial^2}{\partial y_{\alpha j} \partial y_{\alpha' j}} \{ D^{y_{\alpha j} y_{\alpha' j}} \mathcal{F} \} + \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial y_{\alpha l}} \{ D_k^{xy_{\alpha l}} \mathcal{F} \} + q \mathcal{F} \quad (3.27) \end{aligned}$$

y ésta es una ecuación de Fokker - Planck con coeficientes definidos por (Meyer *et al.*, 2010; Tyagi, *et al.*, 2008)

$$\begin{aligned}
 D_k^x &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \{X_k(t + \Delta t) - X_k(t)\} | \alpha, l, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle \\
 D^{y_{\alpha l}} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \{y_{\alpha l}(t + \Delta t) - y_{\alpha l}(t)\} | \alpha, l, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle \\
 D_{kk'}^{xx} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \langle \{X_k(t + \Delta t) - X_k(t)\} \{X_{k'}(t + \Delta t) - X_{k'}(t)\} | \alpha, l, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle \\
 D^{y_{\alpha l} y_{\alpha l}} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \langle \{y_{\alpha l}(t + \Delta t) - y_{\alpha l}(t)\}^2 | \alpha, l, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle \\
 D_k^{xy_{\alpha l}} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \langle \{X_k(t + \Delta t) - X_k(t)\} \{y_{\alpha l}(t + \Delta t) - y_{\alpha l}(t)\} | \alpha, l, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

y

$$q_{\alpha j} = \frac{1}{M_{\alpha j}(t)} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \{M_{\alpha j}(t + \Delta t) - M_{\alpha j}(t)\} | \alpha, j, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle \tag{3.29}$$

Ahora para evaluar estos coeficientes, se necesitan las evoluciones Lagrangianas de las variables estocásticas  $X_k(t)$ ,  $Y_{\alpha l}(t)$  y  $M_{\alpha l}(t)$ . Para  $X_k(t)$  y  $Y_{\alpha l}(t)$ , se obtienen de las siguientes ecuaciones estocásticas

- **Evolución Espacial de las Partículas del Componente  $\alpha$  en la Fase  $l$**

Esta evolución está compuesta por dos partes, la primera asociada al *Drift* que está descrita por la siguiente ecuación obtenida al comparar los términos de la ecuación (2.2) y (3.27) o (3.11) y (3.27)

$$D_k^x = dX_{i\alpha l x_k}^* = \frac{F_{i\alpha l x_k}}{\phi S_l b_l} dt + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) dt \tag{3.30}$$

Análogamente, una ecuación asociada a la parte estocástica del proceso, se obtiene al comparar la ecuación (2.6) y (3.27)

$$D_{kk'}^{xx} = \sqrt{2 \frac{D_{\alpha l x_k}}{\phi b_l S_l}} dW_{x_k} \tag{3.31}$$

▪ **Evolución en el Espacio de la Concentración de las Partículas del Componente  $\alpha$  en la Fase  $l$**

Ahora la concentración de las partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ , puede ser modificada por el intercambio de masa de este tipo de partículas que pasan de las fases fluidas y de la matriz; mediante procesos de transferencia de masa entre fases líquidas (Tyagi, 2010) (como disolución) o debido al intercambio de masa con otras partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ , por (mezclado molecular) (Meyer *et al.*, 2010). Finalmente, por procesos de absorción (retención) o desorción (movilización) de partículas hacia o desde la matriz (Zhang, 2012).

Así,  $D^{y_{\alpha l}}$  se obtiene de considerar el modelo de doble sitio, (ecuaciones (2.3) a (2.5)), el modelo de partición, dado por la ecuación (2.6) y el modelo de mezclado expresado en la ecuación (3.19). Su forma explícita es

$$\begin{aligned}
 D^{y_{\alpha l}} = & - \underbrace{\sum_{l' \neq l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t}}_{\text{Modelo de Partición}} - \underbrace{\frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r,max}}\right)}_{\text{Modelo de Retención/Mobilización}} y_{\alpha l} \\
 & - \underbrace{\frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r,max}}\right)}_{\text{Modelo de Retención/Mobilización}} y_{\alpha l} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd,\alpha l r} x_{2\alpha r} \\
 & - \frac{\phi S_l}{\tau_{\alpha l r}} (y_{\alpha l} - \bar{y}_{\alpha l}) \quad (3.32)
 \end{aligned}$$

▪ **Evolución en el Espacio de Masa de las Partículas del Componente  $\alpha$  en la Fase  $l$**

Ahora considerando que la masa ganada por el componente  $\alpha$  de la fase  $l$  debe ser igual a la masa perdida en el componente  $\alpha$  de las demás fases  $l'$ , se obtiene que

$$q_{\alpha l} = - \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} \Big|_{A = \alpha, L = l'}$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{x_\alpha(1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l}} k_{irr,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha rmax}}\right) \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \\
 & - \frac{x_\alpha(1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l}} k_{ra,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha rmax}}\right) \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \\
 & - \frac{x_\alpha(1-\phi)^2\rho_r^2}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd,\alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \quad (3.33)
 \end{aligned}$$

Ahora introduciendo las ecuaciones (3.30) ,(3.31), (3.32) y (3.33) en la ecuación (3.27) se tiene la ecuación de Fokker – Planck, explícita para el componente  $\alpha$  en la fase  $l$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \left[ - \frac{y_{\alpha l} k_{rl} k}{b_l S_l \phi \mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \rho_l g e_k \right) + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \right] \mathcal{F} \right\} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{\alpha l l'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r,max}}\right) y_{\alpha l} \right] \mathcal{F} \right\} \\
 & + \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r,max}}\right) y_{\alpha l} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd,\alpha l r} x_{2\alpha r} \right] \mathcal{F} \right\} \\
 & - \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \frac{\phi S_l}{\tau_{\alpha l r}} (y_{\alpha l} - \overline{y_{\alpha l}}) \right] \mathcal{F} \right\} = \\
 & \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{k'}} \left\{ \sqrt{2 \frac{D_{\alpha l x_k}}{\phi b_l S_l}} \mathcal{F} \right\} \\
 & - \left\{ \frac{x_\alpha M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{1\alpha r} | A = \alpha, L = r}{x_{1\alpha rmax}}\right) \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\
 & - \left\{ \frac{x_\alpha M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra,\alpha l r} \left(1 - \frac{x_{2\alpha r} | A = \alpha, L = r}{x_{2\alpha rmax}}\right) \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\
 & + \left\{ \frac{x_{\alpha r} (1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd,\alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \right\} \mathcal{F}
 \end{aligned}$$

$$- \left\{ \frac{1}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} \overline{y_{\alpha l'} | A = \alpha, L = l'} \right\} \mathcal{F} \quad (3.34)$$

▪ **Ecuaciones de Transporte para la Concentración Media Condicional de Favré del Componente  $\alpha$  en la Fase  $l$**

Ahora se puede retomar la ecuación (3.34) y obtener las ecuaciones de momento para cada componente en cada fase, integrando sobre todo el espacio  $\bar{y}$ . (Lo anterior debido a que dicha expresión es una descripción Euleriana). Así las ecuaciones de transporte de concentración del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  son

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l S_l \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l}) - \\ & \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{k_{rl} k}{\mu_l} \left( \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \overline{\rho_l (y_{\alpha l}) | A = \alpha, L = l} g e_k \right) \right] \\ & + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \rho_l S_l \phi \left( \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{D_{\alpha l x_k} | A = \alpha, L = l} \right) \\ & + 2 \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \overline{D_{\alpha l x_k} | A = \alpha, L = l} \right) \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho_l S_l \phi) \right] \\ & + \frac{x_{\alpha} (1 - \phi) \rho_r}{y_{\alpha l}} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{1\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{1\alpha rmax}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \\ & + \frac{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{2\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{2\alpha rmax}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \\ & - \frac{x_{\alpha r} (1 - \phi)^2 \rho_r^2}{y_{\alpha l} S_l \phi} k_{rd, \alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \\ & + \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} \overline{y_{\alpha l'} | A = \alpha, L = l'} \end{aligned}$$

$$= \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{k'}} \left\{ \sqrt{2\phi b_l S_l} \sqrt{D_{\alpha l x_k}} \Big| A = \alpha, L = l \right\} \quad (3.35)$$

que es la *ecuación advección – convección de la concentración*  $y_{\alpha l}$  del componente  $\alpha$  en la fase  $l$

### 3.2.2 Modelo Probabilístico de Transporte de Masa de la Fase $l$

Ahora se puede retomar la ecuación (3.34), la cual es la ecuación de Fokker – Planck para el componente  $\alpha$  en la fase  $l$  y obtener las ecuaciones de momento para la fase  $l$ . Para realizar esto se debe considerar que:

- i. los promedios de Favre son de la forma estricta dada por la ecuación (3.25)
- ii.  $y_{\rho \alpha l} \equiv y_{\alpha l} \rho_l = \rho_l$  ahora es  $\rho_{\alpha l} = \rho_l$  lo que implica que  $\overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l}$  cambia por  $\overline{\rho_l | L = l, \mathbf{x} = \mathbf{x}}$
- iii.  $D_{\alpha l x_k}$  cambia por  $D_{l x_k}$

así

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l S_l) - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\rho_l k_{r_l k}}{\mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \overline{\rho_l | L = l, \mathbf{x} = \mathbf{x}} g e_k \right) \right] + \\ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \phi \rho_l S_l \overline{D_{l x_k} | L = l, \mathbf{x} = \mathbf{x}} \right) \right] = \\ + \phi \rho_l S_l \overline{b_l^m | L = l, \mathbf{x} = \mathbf{x}} \quad (3.36) \end{aligned}$$

la cual es la *ecuación de flujo de fluidos o conservación de la masa para la fase  $l$* .

### 3.2.3 Modelo Probabilístico de Evolución de la Concentración del Componente $\alpha$ de la Fase $l$ en el Espacio de Concentraciones

Otra vez al considerar la ecuación (3.34) y obtener las ecuaciones de momento para cada componente en cada fase, integrando sobre todo el espacio  $\mathbf{x}$ . (Lo anterior debido a que

dicha expresión es una descripción Euleriana). Así las ecuaciones de transporte de concentración en la fase  $l$  son

$$\begin{aligned}
 & \int \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} d\mathbf{x} + \int \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \left[ -\frac{y_{\alpha l} k_{rl} k}{b_l S_l \phi \mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \rho_l g e_k \right) + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \right] \mathcal{F} \right\} d\mathbf{x} \\
 & \int \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{\alpha l l'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd, \alpha l r} x_{2\alpha r} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\phi S_l}{\tau_{\alpha l r}} (y_{\alpha l} - \bar{y}_{\alpha l}) \right] \mathcal{F} \right\} d\mathbf{x} \\
 & = \\
 & \int \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{k'}} \left\{ \sqrt{2 \frac{D_{\alpha l x_k}}{\phi b_l S_l}} \mathcal{F} \right\} d\mathbf{x} \\
 & - \int \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{1\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{1\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} d\mathbf{x} \\
 & - \int \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{2\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{2\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} d\mathbf{x} \\
 & + \int \left\{ \frac{x_{\alpha r} (1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd, \alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \right\} \mathcal{F} d\mathbf{x} \\
 & - \int \left\{ \frac{1}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} \overline{y_{\alpha l'} | A = \alpha, L = l'} \right\} \mathcal{F} d\mathbf{x} \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

De donde, aplicando el teorema de la divergencia de Gauss y al considerar que el flujo en las caras se compensa o suma cero entonces

$$V_T \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t}$$

$$\begin{aligned}
 +V_T \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \begin{aligned} & \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{\alpha l l'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr,\alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} \\ & + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra,\alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd,\alpha l r} x_{2\alpha r} \\ & - \frac{\phi S_l}{\tau_{\alpha l r}} (y_{\alpha l} - \bar{y}_{\alpha l}) \end{aligned} \right] \mathcal{F} \right\} = \\
 -V_T \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr,\alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r} |A = \alpha, L = r}{x_{1\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\
 -V_T \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra,\alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r} |A = \alpha, L = r}{x_{2\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\
 +V_T \left\{ \frac{x_{\alpha r} (1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd,\alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \right\} \mathcal{F} \quad (3.38) \\
 -V_T \left\{ \frac{1}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} \overline{y_{\alpha l'} | A = \alpha, L = l'} \right\} \mathcal{F}
 \end{aligned}$$

Donde  $\mathcal{F}(\alpha, l, \bar{y}; x, t)$  esta dada bajo una descripción Euleriana (note punto y coma, es decir se especifica la posición y el tiempo) y se representa como funciones delta de Dirac, así

$$\mathcal{F}(\alpha, l, \bar{y}; x, t) = \sum_* M^*(t) \delta(\bar{y}^*(t) - y_{\alpha l}) \delta_{L^*(t)l} \quad (3.39)$$

con \* como la propiedad que se asocia a las partículas en el volumen de control, además

$$\sum_* M^*(t) \delta(\bar{y}^*(t) - y_{\alpha l}) \delta_{L^*(t)l} = \phi \rho_l(x, t) y_{\alpha l}(x, t) S_l(x, t) \quad (3.40)$$

Ahora tomando el primer término de la ecuación (3.37)

$$\int \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \sum_* M^*(t) \delta(\bar{y}^*(t) - y_{\alpha l}) \delta_{L^*(t)l} \int dx \quad (3.41)$$

usando la ecuación (3.40) se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathcal{F} dx = V_T(x) \frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho_l(x, t) y_{al}(x, t) S_l(x, t)] \quad (3.42)$$

$V_T$  es el volumen geométrico total del REV que finalmente se expresa

$$\int \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} dx = V_T \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l y_{al} S_l) \quad (3.43)$$

Este procedimiento es aplicado a cada uno de los términos de la ecuación (3.38) y el resultado es el siguiente

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y_{al}} \left\{ \left[ \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{all'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{al'}}{\partial t} + \frac{y_{al}}{x_{ar}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr} y_{alr} \left( 1 - \frac{x_{1ar}}{x_{1ar,max}} \right) y_{al} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{y_{al}}{x_{ar}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra} y_{alr} \left( 1 - \frac{x_{2ar}}{x_{2ar,max}} \right) y_{al} - \frac{y_{al}}{x_{ar}} k_{rd} y_{alr} x_{2ar} \right] \mathcal{F} \right\} = \\ - \left\{ \frac{x_a M_r}{y_{al}} k_{irr} y_{alr} \left( 1 - \frac{x_{1ar} | A = \alpha, L = r}{x_{1ar,max}} \right) \overline{y_{aj} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\ - \left\{ \frac{x_a M_r}{y_{al}} k_{ra} y_{alr} \left( 1 - \frac{x_{2ar} | A = \alpha, L = r}{x_{2ar,max}} \right) \overline{y_{aj} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\ + \left\{ \frac{x_{ar} (1-\phi) \rho_r}{y_{al} S_l \phi} M_r k_{rd} y_{alr} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \right\} \mathcal{F} \\ - \left\{ \frac{1}{y_{al} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{al} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{all'} \frac{\partial}{\partial t} y_{al'} \right\} \mathcal{F} \quad (3.44) \end{aligned}$$

De donde usando (3.41) y (3.43)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l y_{al} S_l)$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{\alpha l l'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{1 \alpha r}}{x_{1 \alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2 \alpha r}}{x_{2 \alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd, \alpha l r} x_{2 \alpha r} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\phi S_l}{\tau_{\alpha l r}} (y_{\alpha l} - \bar{y}_{\alpha l}) \right] (\phi \rho_l y_{\alpha l} S_l) \right\} \\
 & = - \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{1 \alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{1 \alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} (\phi \rho_l y_{\alpha l} S_l) \\
 & - \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{2 \alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{2 \alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} (\phi \rho_l y_{\alpha l} S_l) \\
 & + \left\{ \frac{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd, \alpha l r} \overline{x_{2 r} | A = \alpha, L = r} \right\} (\phi \rho_l y_{\alpha l} S_l) \\
 & - \left\{ \frac{1}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} \overline{y_{\alpha l'} | A = \alpha, L = l'} \right\} (\phi \rho_l y_{\alpha l} S_l) \tag{3.45}
 \end{aligned}$$

Que es la ecuación de evolución de la concentración  $y_{\alpha l}$  del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ . Adicionalmente, despreciando los términos de orden superior a uno para  $y_{\alpha l}$  se obtiene

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l y_{\alpha l} S_l) & = - \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{\alpha l l'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} (\phi \rho_l S_l) \\
 & - \left\{ x_{\alpha} M_r k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{1 \alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{1 \alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} (\phi \rho_l S_l) \\
 & - \left\{ x_{\alpha} M_r k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{2 \alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{2 \alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} (\phi \rho_l S_l) \\
 & + \left\{ \frac{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r}{\phi} M_r k_{rd, \alpha l r} \overline{x_{2 r} | A = \alpha, L = r} \right\} (\phi \rho_l) \\
 & - \left\{ \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} \overline{y_{\alpha l'} | A = \alpha, L = l'} \right\} (\phi \rho_l) \tag{3.46}
 \end{aligned}$$

Donde se muestra la evolución de la concentración en el espacio de concentraciones, obtenida de la ecuación de Fokker – Planck, cuando se halla la PDF marginal de concentración. El **Anexo A** muestra una deducción paso a paso.



# 4. Capítulo 4 – Modelo Numérico y Computacional del Transporte de Masa en Medios Porosos

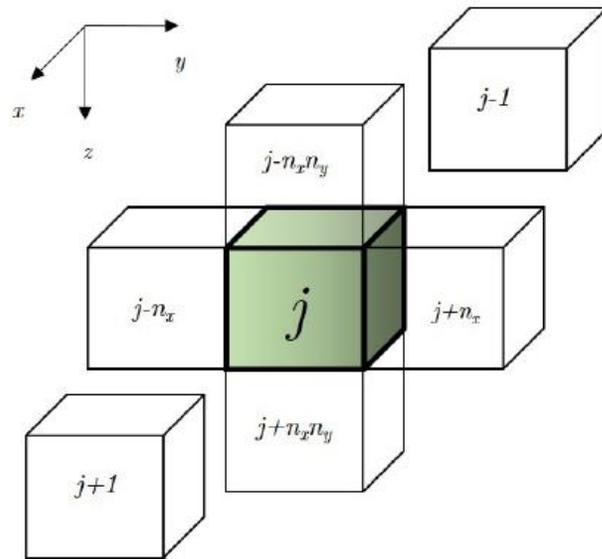
Este capítulo presenta el modelo numérico y el algoritmo de solución del modelo híbrido de transporte de componentes o especies por medio del flujo de fases fluidas en un medio poroso sometido a una inyección de nanofluidos.

## 4.1 Modelo Numérico

Inicialmente, se define la malla de simulación, luego se presentan las aproximaciones usadas, para discretizar el modelo matemático. Finalmente, se muestra el modelo de simulación.

### 4.1.1 Malla de Simulación

La malla utilizada para solucionar el modelo numérico es tridimensional y ortogonal, compuesta por  $n_x \times n_y \times n_z$  bloques. Estos están definidos dentro del dominio o sistema a representar. Cada uno de los bloques comparte su frontera con seis bloques como máximo. Para un bloque particular  $j$  se define un conjunto  $\Psi_j$ , el cual contendrá los bloques vecinos, los cuales son necesarios para obtener la evolución del transporte de alguna propiedad en el medio poroso (Abou-Kassem, *et al.*, 2006). En la **Figura 4-1** se presenta el bloque  $j$  y los bloques vecinos en una malla ortogonal, donde  $\Psi_j \equiv \{j - n_x n_y, j - n_x, j - 1, j + 1, j + n_x, j + n_x n_y\}$



**Figura 4-1** Representación esquemática de la malla ortogonal de simulación, donde se tiene el bloque  $j$  y sus bloques vecinos definidos en el conjunto  $\Psi_j$ . Tomado de Solano (2019)

### 4.1.2 Discretización de las Ecuaciones del Modelo

El modelo numérico toma como base las ecuaciones de conservación de masa y energía, obtenidas en el **Capítulo 2** y basadas en una formulación Euleriana del problema. Estas ecuaciones son expresadas en volúmenes finitos (FVM) (Moukalled, *et al.*, 2016), usando integrales de volumen en una ecuación diferencial parcial (EDP), como la ecuación ( 2.1) de transporte de masa de una fase o la ecuación ( 2.7) que describe la conservación de energía en el medio poroso.

Este REV se asocia a una malla que para este estudio puede asociarse a un sistema cartesiano o rectangular. Esto con el fin de usar este modelo como tipo *sector model*, aplicable a un campo, yacimiento o porción de yacimiento.

Paralelamente, el modelo de transporte de componentes o especies en el medio poroso es deducido desde un punto de vista Lagrangiano y probabilístico. Por tanto se utiliza, solo

para esta parte, el método SPM, se usa para solucionar la ecuación de transporte de componentes probabilista. Así en el REV, o equivalentemente en un bloque de la malla se generan partículas de masa o volumen determinado, las cuales son descritas una a una por la ecuación de movimiento de Langevin, (ecuación (3.17)). Estas ecuaciones de movimiento estocásticas son aproximadas bajo un esquema Runge - Kutta de orden dos. Considerando que el lector ya conoce la discretización determinista, en esta sección solo se deduce el componente probabilístico.

### 4.1.3 Discretización Estocástica asociada con el SPM

La aplicación del modelo SPM en este trabajo conduce al cambio de marco de referencia Euleriano por uno Lagrangiano, donde se pasa de una mirada fija en el espacio (donde la posición no cambia), a una donde se limita un volumen o masa la cual se transporta. Esto genera un cambio de la posición en el tiempo de dicho volumen. Así el REV es cambiado por un número  $m$  de partículas que pueden representar parcelas de fases y/o parcelas o partículas de los componentes que son transportados en las fases fluidas.

Aunado a lo anterior el SPM extendido, como método Lagrangiano presenta las siguientes características: i.) tiene un componente aleatorio asociado a un proceso de Wiener, que modifica la posición de las partículas, ii.) la evolución de la concentración de las partículas es afectada por el modelo modificado de Curl, generando el mezclado de componentes en la cada fase de forma aleatoria, iii.) este método es independiente de la malla de simulación y iv.) se pueden estimar los momentos estadísticos asociados a las saturaciones de las fases y/o concentraciones de los componentes, transportados en las fases presentes en el medio poroso, al igual que las funciones de densidad de probabilidad.

Las siguientes cantidades son necesarias para la evolución de las partículas,  $F, S_l, \nabla P_l$  y  $\nabla D$ , las cuales son variables reportadas a nivel de la malla en la celda donde se encuentra la partícula a ser evolucionada. Con el fin de garantizar el balance de masa se realiza una interpolación lineal del *flux*  $F$  entre las caras de la celda hasta la posición de la partícula. Para estimar  $S_l$ , se toma el promedio obtenido en el punto que representa la celda.

Este modelo está compuesto por  $m$  ecuaciones asociadas a cada partícula presente en el medio. Para obtener la evolución de cada partícula individual, se aplica un esquema Runge Kutta de segundo orden a la ecuación (3.17), obteniéndose

$$x_{i\alpha l x_k}^{*n+1/2} = x_{i\alpha l x_k}^{*n+1/2} + \frac{F_{i\alpha l x_k} dt}{\phi S_l b_l} + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \frac{dt}{2} \quad (4.1)$$

Así en el tiempo  $n + 1$

$$x_{i\alpha l x_k}^{*n+1} = x_{i\alpha l x_k}^{*n} + \frac{F_{i\alpha l x_k} dt}{\phi S_l b_l} + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) dt + \sqrt{2 \frac{D_{\alpha l x_k}}{\phi b_l S_l}} dW_{x_k} \quad (4.2)$$

para componentes o especies, donde  $F_{i\alpha l x_k}$  se evalúa en  $x_{i\alpha l x_k}^{*n+1/2}$ . Claramente, las ecuaciones (4.1) a (4.2) representan la evolución de la partícula de la fase  $l$  y la evolución de la partícula de componente  $\alpha$  en la fase  $l$ . Esta se compone así, la primera parte asociada a la condición en el tiempo  $n$ , que es la posición a  $t = t_n$ , el segundo término, es la distancia recorrida por la partícula debida a la velocidad de la fase donde se transporta, la tercera, es la distancia asociada a efectos difusivos / dispersivos y finalmente, una distancia recorrida debida a un término aleatorio relacionado con un proceso Browniano y descrito por un proceso de Wiener. Además, las partículas se caracterizan con propiedades como la masa o volumen, tipo de componente, concentración, etc. En particular, para obtener la evolución de la concentración de las nanopartículas, se debe considerar efectos como: retención/movilización, dilución e inyección/producción. Para obtener estas evoluciones en la concentración se calcula el número de partículas afectadas por cada fenómeno, se integra sobre el REV. Inicialmente, la *tasa del número de partículas afectadas por retención/movilización*  $\dot{n}_{\alpha l r}$  es

$$\dot{n}_{\alpha l r} = \int_{\Omega'} \frac{\rho_l^{np}}{C_{\alpha l i}} \rho_r (1 - \phi) \frac{\partial x_\alpha}{\partial t} d\Omega \quad (4.3)$$

Ahora, la *tasa del número de partículas que se afectan por dilución*  $\dot{n}_{\alpha l l'}$  es

$$\dot{n}_{\alpha l l'} = \int_{\Omega'} \frac{\rho_l^{np}}{C_{\alpha l i}} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} (C_{\alpha l'} S_l \rho_l \phi) d\Omega \quad (4.4)$$

Finalmente, la *tasa del número de partículas que se afectan por inyección/producción*  $\dot{n}_{\alpha l q}$  es

$$\dot{n}_{\alpha l q} = \int_{\Omega'} q_l \rho_l^{pn} d\Omega \quad (4.5)$$

Así en un tiempo  $\Delta t$ , las partículas son evolucionadas por sus ecuaciones Lagrangianas (4.1) a (4.5), en el volumen de control o REV. Luego de esto se realiza un conteo de estas partículas en un volumen específico, por ejemplo, la malla de simulación generada para realizar la discretización de las ecuaciones de flujo. Este conteo permite estimar los valores de los escalares o propiedades en el volumen seleccionado, como una suma de las propiedades escalares asociadas a cada partícula.

En particular, la saturación de la fase  $l$  y la concentración del componente  $\alpha$ , en cada fase  $l$  o en el REV, se obtienen a partir de las ecuaciones (4.6) y (4.7), respectivamente.

$$\rho_{\alpha l}^N(\mathbf{x}, t) = \frac{\Sigma_* M^*(t) \delta_{L^*(t)l} \delta_{A^*(t)\alpha} \delta(\mathbf{X}^*(t) - \mathbf{x})}{\Sigma_*(M^*(t)/\rho^*(t)) \delta_{L^*(t)l} \delta_{A^*(t)\alpha} \delta(\mathbf{X}^*(t) - \mathbf{x})} \quad (4.6)$$

con

$$\delta(\mathbf{X}^*(t) - \mathbf{x}_k) \approx \begin{cases} 1/V_T & \text{si la partícula se encuentra dentro de } \Omega_k \\ 0 & \text{si la partícula se encuentra fuera de } \Omega_k \end{cases} \quad (4.7)$$

En la ecuación (4.7), se aproxima la función delta de Dirac, como función grano para construir la PDF. Sin embargo pueden existir diferentes formas como: la aproximación como el inverso del volumen o tope del sombrero o a partir de un núcleo trilineal, es decir, proporcional a la relación entre la distancia al gravicentro del REV. Finalmente, los momentos estadísticos de orden superior se calculan a partir de un valor medio condicional o promedio de Favre dado por la ecuación (3.25).

## 4.2 Solución de Sistema de Ecuaciones

El algoritmo se compone de dos etapas, es decir, es un método híbrido que resuelve de forma determinista los cambios en los campos de presión, y térmico, que actúan sobre el yacimiento. Determinando presiones de la fase principal y las saturaciones de las otras fases, así como la temperatura del medio. Conocidas estas variables se calculan las concentraciones de los escalares, componentes o especies que son transportadas en las fases fluidas, usando el SPM descrito en el **Capítulo 3**. A continuación, se describen cada uno de éstos y finalmente, el pseudo código.

Así, las ecuaciones **Error! No se encuentra el origen de la referencia.** de flujo y energía discretizadas usando FVM, son solucionadas con el método Newton-Raphson con el fin de obtener el campo de presiones, saturaciones y temperatura (Bueno, 2019). Esta parte del simulador ha sido desarrollada por grupo de “Dinámicas de flujo y transporte en medios porosos”, de la Universidad Nacional de Colombia – Sede Medellín. Luego se aplican las ecuaciones (4.1) a (4.6), para obtener las concentraciones de los componentes en las fases. Por lo tanto, la solución del sistema de ecuaciones se realiza bajo un esquema IMPISITEC, es decir la presión, saturaciones y temperatura se calculan implícitamente y las concentraciones de componentes o especies se determinan de forma explícita y en este caso son calculadas estocásticamente. Para el caso particular se usa la fase de aceite como la principal; por tanto, las fases agua y gas actúan como fases secundarias.

## 4.3 Algoritmo de Solución

Aquí un procedimiento modificado de Solano en 2019 presenta la solución del sistema de ecuaciones como un pseudocódigo que describe de forma general como se obtienen las variables de interés del sistema (Solano, 2019).

**Algoritmo** Esquema general de la Solución

---

```

1  Entrada Datos yacimiento, componentes, fluidos, interacción roca-fluido y pozos
2  Creación y poblamiento de malla de simulación
3  Inicialización y dimensionamiento del sistema
4   $t \leftarrow 0, m \leftarrow 1$ 
5  While  $t < t_{sim}$  do
6       $iter \leftarrow 1$ 
7       $x^k \leftarrow x^m, R^k \leftarrow R^m$ 
      Determinista
8      While  $R^k < tol$  do
9          If  $iter > iter_{max}$  then
10              $x^k \leftarrow x^m, R^k \leftarrow R^m$ 
11             Reducir  $\Delta t$ 
12              $iter \leftarrow 1$ 
13          Else
14             Inicialización método de solución
15             Calculo de permeabilidad y propiedades petrofísicas en  $k + 1$ 
16             Calculo de vector de residuales  $R^{k+1}$ 
17             Calculo de matriz Jacobiana  $J^{k+1}$ 
18             Estimación  $\Delta x^{k+1}$  con  $J^{k+1}\Delta x^{k+1} = -R^{k+1}$ 
19              $x^{k+1} \leftarrow x^k + \Delta x^{k+1}, R^k \leftarrow R^{k+1}$ 
20              $iter \leftarrow iter + 1$ 
21          End If
22      End While
23       $x^{m+1} \leftarrow x^k, R^{m+1} \leftarrow R^k$ 
24      Calculo de métrica de balance de material EBM
25      If  $EBM > tol_m$  then
26          Reducir  $\Delta t$ 
27      Else
28           $t \leftarrow t + \Delta t, m \leftarrow m + 1$ 
29           $x^m \leftarrow x^{m+1}$ 
30          Calcular presiones, saturaciones
31      Imprimir Presiones, saturaciones

```

- 32    **End If**
- Estocástico*
- 33    Evolución de las partículas para  $t + \Delta t$
- 34    Transferencias a otras fases y mezclado para  $t + \Delta t$
- 35    Calculo de estadísticos (concentración, desviación estándar)
- 36    Calculo de PDF
- 37    **Imprimir** concentraciones y desviaciones estándar.
- 38    **End While**

En el próximo capítulo se presentan varios casos que permiten observar la validez del modelo inicialmente se describen los casos deterministas y posteriormente los del modelo híbrido. La idea es aumentar la complejidad de la simulación a medida que avanza la sección.

## 5. Capítulo 5 – Resultados y Análisis de Resultados.

Este capítulo presenta diferentes tipos de resultados. Inicialmente, se muestra una validación monofásica de dos tipos de componentes o especies (trazadores inertes y nanopartículas) a nivel de la escala de núcleo o laboratorio y se realizan sensibilidades de la herramienta, al tamaño de malla y número de partículas por celda. Luego, se tienen los resultados de escalamiento a nivel de la escala de yacimiento. Después de esto, se tienen los resultados de flujo multifásico y térmico y flujo multidimensional.

### 5.1 Validación de Trazador Inerte 1-D Monofásico

A continuación, se muestran los aspectos relacionados al proceso de validación del transporte de un soluto en un fluido monofásico, en una dimensión a nivel de la escala de núcleo. En esta sección se muestran la validación del método estocástico utilizando los resultados del simulador determinista desarrollado *in house*, que ha sido validado utilizando el *software* comercial CMG. Además, se realizan sensibilidades de modelo asociadas a propiedades geométricas y condiciones de flujo. Adicionalmente, se hace notar que todos los resultados fueron validados con datos experimentales obtenidos de la literatura (Li & Torsæter, 2015).

#### 5.1.1 Validación de la Concentración del Trazador Inerte

En esta sección, se muestra la equivalencia entre formulaciones tanto determinista como estocástica. Incluso estos resultados se validan con datos experimentales. Para esto se considera un problema 1D, donde los resultados se presentan en el espacio de variables adimensionales, definiendo las coordenadas de posición y tiempo adimensionales como  $x_D = x/L$  y  $t_D = vt/L$ , respectivamente.

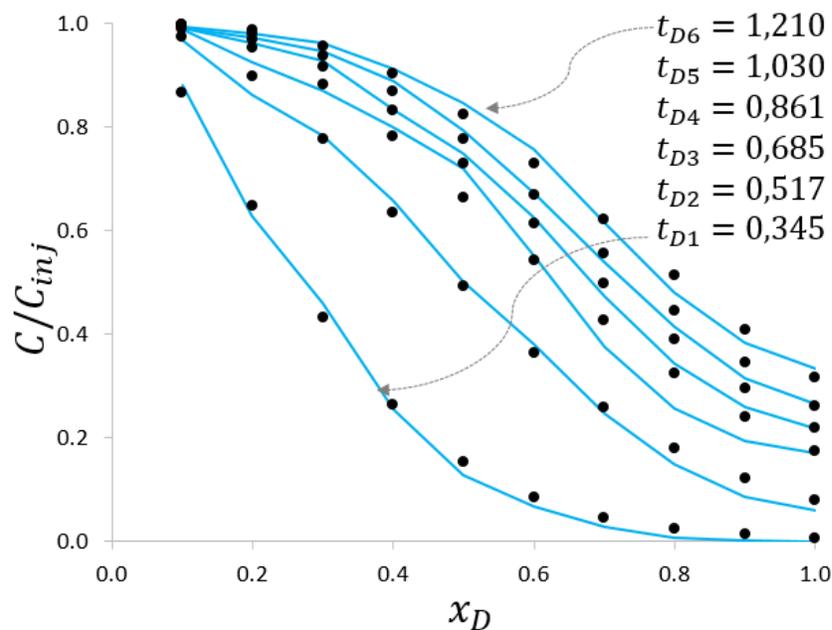
Así se resuelve la ecuación de difusividad, ecuación (2.2) para obtener la presión de la fase y equivalentemente, la velocidad de la fase, a través de la ley de Darcy. Luego, el coeficiente de dispersión mediante la ecuación (3.18), (dicho coeficiente es función de la velocidad) es calculado para todos los valores de la malla. Después, con esta información se evoluciona la posición de las partículas aplicando la ecuación de Langevin, (ecuación (3.17)), sobre cada partícula. Posteriormente, se evoluciona la concentración de las partículas usando el modelo de Curl modificado, ecuación (3.19).

Como base se toma un proceso de inyección de un trazador inerte en un núcleo. La tasa de inyección de fluido es constante pero se tienen dos valores de concentración, el primero a 2000 ppm, hasta 2000 s y luego un cambio a cero (0) hasta 4048 s. Inicialmente, el conjunto de características del medio poroso asociado a las propiedades geométricas, operativas, petrofísicas de la roca y físicas de los fluidos se presentan en la **Tabla 5-1**. Propiedades del medio poroso y condiciones de inyección de componentes..

**Tabla 5-1.** Propiedades del medio poroso y condiciones de inyección de componentes.

Variable	Valor	Variable	Valor
$A_x$ ( $cm^2$ )	11.5	$\mu_w$ (cp)	1.0
$L$ (cm)	7.92	$C_{inj}$ (ppm)	2000
$k_x$ (mD)	316	$q_w$ ( $cm^3/s$ )	0.03333
$\phi$	0.183	$t_{total}$ (s)	4048
$c_t$ (l/lpc)	0.000003	$S_w$	0.98
$P_p$ (lpc)	14.7	$Pe$	3.3
$B_w$ (by/bcn)	1.0	$Np$ (partículas/celda)	10000

Dentro de los resultados, el perfil de la concentración normalizada del trazador se muestra en la **Figura 5-1**. Los puntos y las líneas continuas (en azul) representan los perfiles de la concentración del trazador normalizados de los modelos determinista y estocástico, correspondientemente.

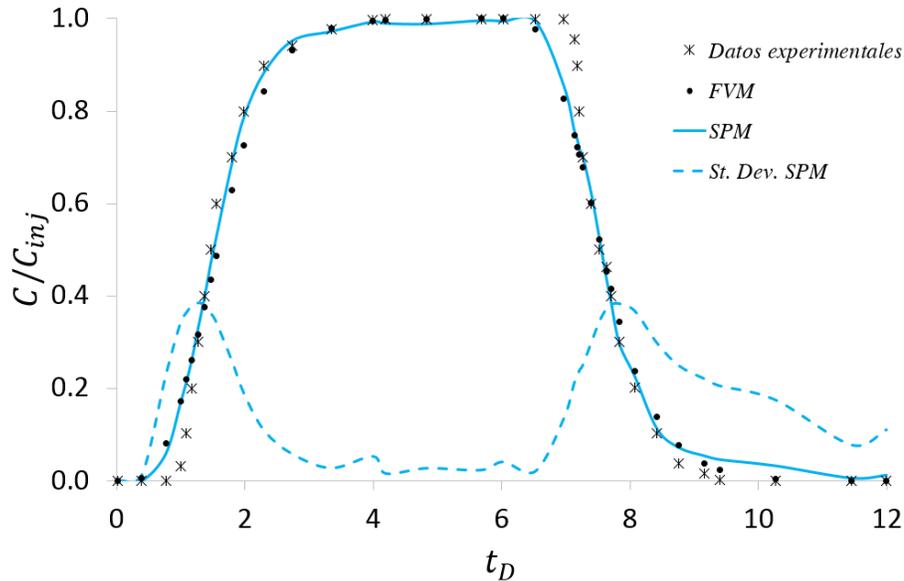


**Figura 5-1.** Perfiles del promedio de concentración normalizada del trazador como función de la posición adimensional para diferentes tiempos adimensionales para los resultados obtenidos con el FVM (puntos) y SPM (curva continua, azul).

Un valor máximo de raíz cuadrada media de 0.011 correspondiente al valor  $t_D$  de 0.685, indica un buen ajuste entre los perfiles de posición determinista y estocástico para cada tiempo adimensional presentado en la **Figura 5-1**. Al principio, cuando los tiempos adimensionales,  $t_D$  son pequeños, menores a 0.517, la concentración normalizada del trazador aumenta en la zona cercana al punto de inyección, es decir, para valores pequeños de posición adimensional  $x_D$ , menores a 0.2. Posteriormente, a medida que el tiempo adimensional aumenta, el trazador avanza cada vez más dentro del medio poroso. Este hecho incrementa la concentración del trazador en  $x_D$  más altas, cercanas a 1.0. Por lo tanto, si se mantiene la concentración de inyección, se espera que el sistema alcance una concentración de equilibrio, cuando la concentración del trazador  $C$  es igual a  $C_{inj}$ , lo que ocurre en esta validación.

En la **Figura 5-2** se muestran los resultados de comparación de la evolución de la concentración normalizada del trazador inerte por la concentración de inyección en función del tiempo,  $C/C_{inj}$ . Esto en el efluente del medio poroso. Aquí, los asteriscos corresponden a los datos experimentales, los puntos representan la solución determinista

obtenida usando el FVM y la curva en línea continua en azul, denota la solución estocástica obtenida por SPM. Por otro lado, la línea semicontinua es la desviación estándar de la concentración normalizada.



**Figura 5-2.** Promedio de concentración normalizada del trazador para los datos experimentales (asteriscos), los resultados usando el FVM (puntos), los valores obtenidos con el SPM (curva continua) y desviación estándar (línea semicontinua) de la evolución en el tiempo en el efluente.

Además, en la **Figura 5-2**, se observa que los estudios de validación 1D del transporte de concentración del marcador en el medio poroso, muestran que el SPM es consistente con el FVM y que los resultados convergen con el comportamiento de los datos experimentales. Además, la desviación estándar presenta dos formas de "domos" con máximos en  $t_D$  de 2 y 7, (línea semicontinua), que están asociadas a fenómenos de mezcla descritos por el modelo modificado de Curl (Curl, 1963; Meyer, *et al.*, 2010), en la ecuación (3.19). En general, el comportamiento observado es congruente con el proceso de inyección / producción y las condiciones físicas consideradas en este caso. Además, la ocurrencia de estos dos domos implica un cambio en la concentración del trazador de cada partícula en el dominio analizado y por tanto, un desequilibrio de concentración de las partículas estocásticas que representan el transporte de este trazador, en el medio poroso durante el tiempo que la desviación estándar no se mantenga constante.

De otro lado, la raíz cuadrática media normalizada de las curvas estocásticas y deterministas con respecto a los datos experimentales es de 0.062 y 0.071, lo que sugiere una buena representatividad de ambos modelos, en la descripción del transporte de trazadores en el medio poroso.

A continuación, se analiza el comportamiento de la desviación estándar presentado en la **Figura 5-2**. Inicialmente, para  $t_D < 2$  la dispersión estadística es nula, pero ésta aumenta a medida que se mezcla la masa de las partículas. Entonces, para el intervalo  $2 < t_D < 6.5$ , se alcanza un equilibrio de mezcla, lo que implica que la masa del trazador es similar, en cada una de las partículas estocásticas, que pertenecen al volumen analizado. Luego, para  $t_D > 6.5$ , cuando las condiciones de inyección varían (de  $C_{inj}$  a 0 ppm), la concentración del trazador de cada partícula varía y causa que de nuevo la desviación estándar se incremente, debido a que aumenta la cantidad de partículas, en dicho volumen, que tienen valores diferentes de masa del trazador. También es importante notar que mientras los valores de la desviación estándar sean distintos de cero (0), se tendrá un proceso de mezclado y el tiempo adimensional que esto dure, se podría relacionar con el tiempo de mezcla o el tiempo en que se alcanzan las condiciones de equilibrio en la concentración en el medio poroso. Finalmente, para  $t_D > 6.5$  esta variable tiende a cero (0) tratando de volver a las condiciones de equilibrio. En la próxima sección se presenta el comportamiento de la función de distribución de probabilidad de concentración del trazador.

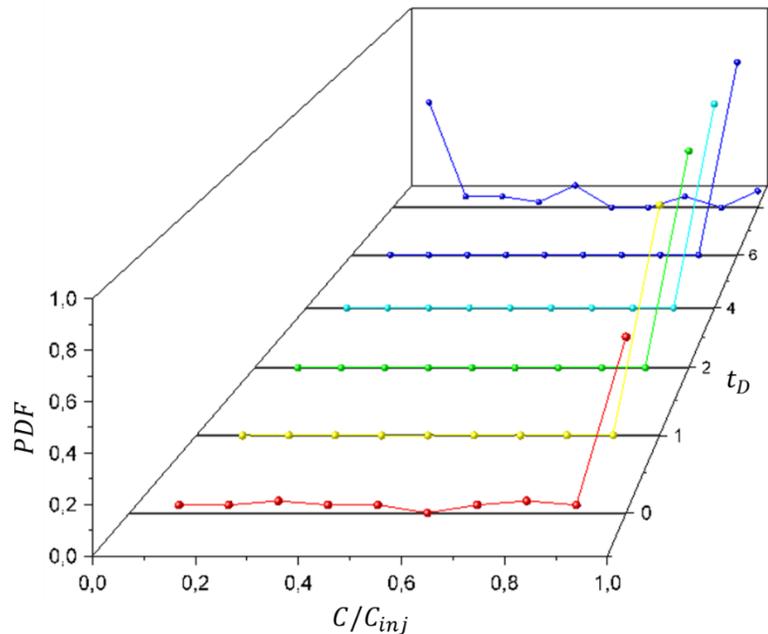
### 5.1.2 Evolución de la Función de Distribución de Probabilidad de Concentración (PDFC) del Trazador

En la **Figura 5-3** se muestra el comportamiento de la PDFC para el trazador en la fase agua, a.) en el bloque 1 y b.) en el bloque 5. Estos corresponden al punto de inyección o punto inicial y al punto medio del núcleo analizado, respectivamente. Además, las **Figuras 5-3** a. y b. presentan seis (6) curvas a asociadas a diferentes  $t_D$ . Inicialmente, para el punto de inyección, se nota que para  $0 < t_D < 6$ , las PDFC tienden a 1.0, comportándose como una función delta de Dirac localizada en  $0.9 < C/C_{inj} < 1.0$ , debido a que la concentración adimensional de las partículas ( $C/C_{inj}$ ) que se inyectan, justamente tienen concentraciones en con valores que están en este intervalo (0.9, 1.0). Sin embargo,

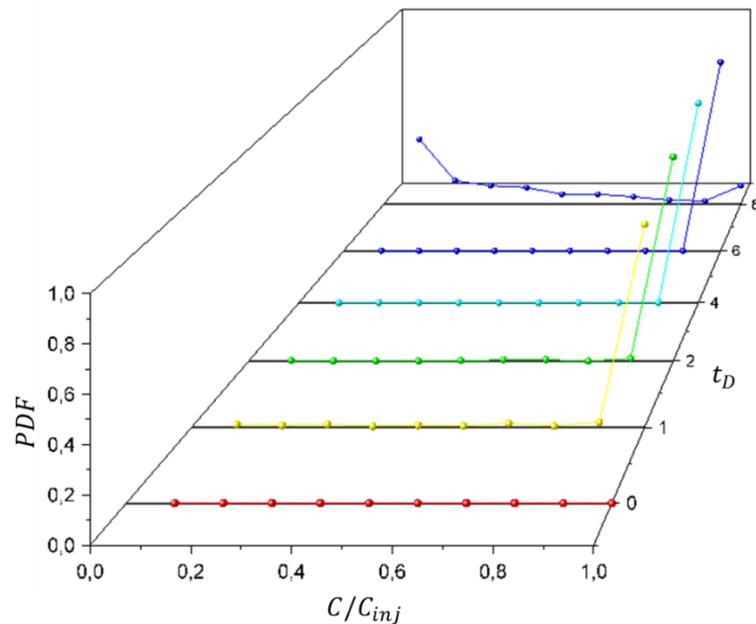
se hace notar que no se alcanza un valor de uno en la PDFC, de un lado, debido al proceso de mezclado que se produce entre las partículas y de otro, se pueden tener pocas partículas con concentración de trazador diferente de cero, en el REV, lo cual hace que haya una dispersión estadística alta. Esto se puede ver claramente en las curvas  $t_D = 0$  y  $t_D = 8$ .

De hecho para la curva  $t_D = 8$ , es importante resaltar que la PDFC, no tiene el comportamiento esperado de una función delta de Dirac. Esto se explica porque a partir de  $t_D = 6.5$ , aproximadamente, se dejó de inyectar trazador. Allí, se ve como la dispersión de la PDFC es más amplia, siendo más probable encontrar partículas con concentraciones adimensionales menores a 0.1

De otro lado, en el punto medio del núcleo (o sistema analizado), se observan comportamientos similares a los obtenidos en el bloque inicial para  $1 < t_D < 6$ , respecto a la PDFC. Pero en  $t_D = 0$ , se nota que la concentración de trazador no ha llegado a la mitad del núcleo en dicho tiempo, lo cual se esperaba. Adicionalmente, para  $t_D = 8.0$ , se observa que hay una dispersión fuerte de la PDFC debido al cambio a cero, en la concentración de inyección en el sistema en  $t_D \approx 6.5$ .



a. PDFC punto de inyección e inicial del sistema (Bloque 1)



b. PDFC de punto medio del sistema, (bloque 5)

**Figura 5-3.** Evolución de las PDFC para el trazador a. en el punto inicial e inyección de sistema poroso (Bloque 1) y b. en el punto medio (Bloque 5) para diferentes tiempos adimensionales.

A continuación, se realizan sensibilidades del modelo numérico y computacional, referentes al número de partículas por celda y al tamaño de la malla.

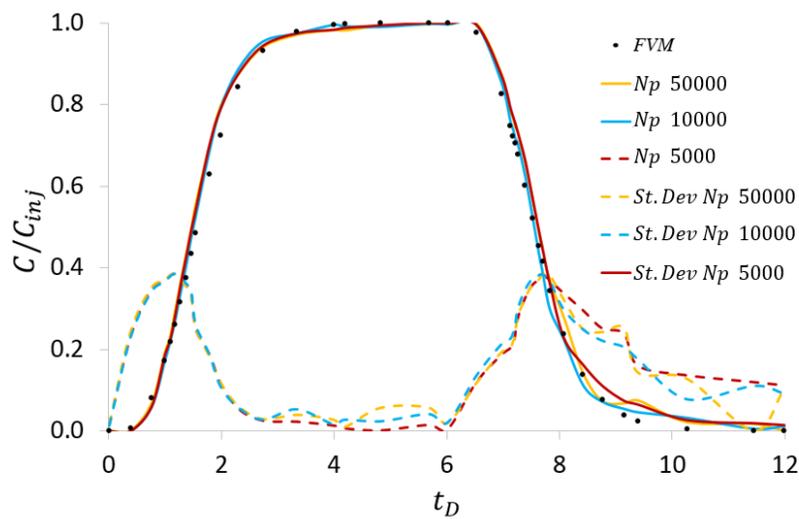
### 5.1.3 Sensibilidades del Transporte del Trazador Respecto al Número de Partículas por Celda y Tamaño de la Malla

En esta sección se realizan dos sensibilidades al modelo estocástico, que consisten en variar el número de partículas por celdas y el tamaño de la malla de simulación. Esto con el fin de evidenciar en el primer caso la representatividad o ajuste apropiado de las concentraciones normalizadas y de la desviación estándar al incrementar o disminuir el número de partículas y en segundo lugar verificar la independencia de la malla, es decir que el incremento o disminución del tamaño no afecte los resultados o a lo sumo que muestre diferencias despreciables respecto a los resultados reales.

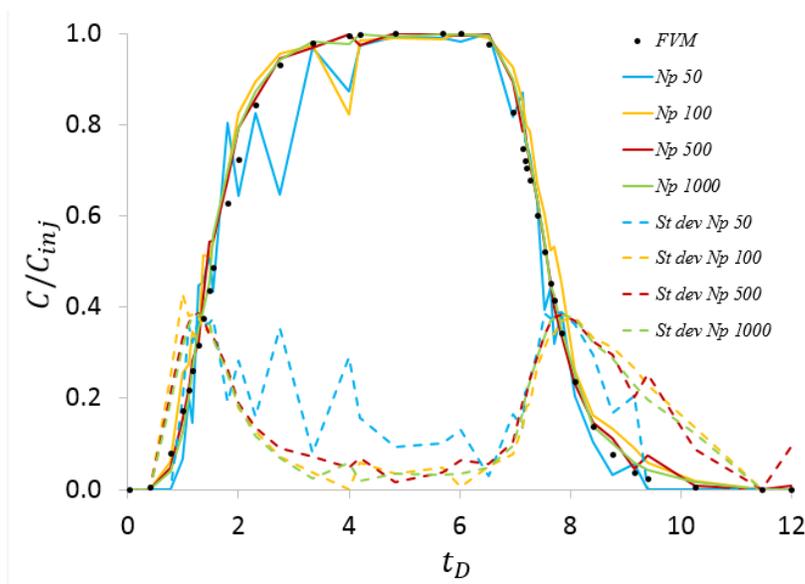
En las **Figura 5-4 a 5-5**, se presentan las sensibilidades del promedio y la desviación estándar de la concentración normalizada del trazador con respecto al número de partículas por celda y el tamaño de ésta, respectivamente. Inicialmente, en la **Figura 5-4**, se observan resultados para valores de sensibilidades de número de partículas por celda de aproximadamente 5000, 10000 y 50000, en la a.) y 50, 100, 500 y 1000 en la b.).

En la **Figura 5-4**, se observa que el número de partículas por celda no tiene un efecto significativo sobre el comportamiento de las curvas de comportamiento del efluente, excepto en la última parte de ésta. Allí, se identifican pequeñas diferencias que podrían asociarse a la eliminación aleatoria de partículas en el efluente. Adicionalmente, las tendencias son iguales en todas las curvas. Por otro lado, la desviación estándar de las curvas de concentración normalizadas muestra incrementos debido a cambios en la concentración de la inyección. Aquí, se observa un comportamiento similar en estas curvas, dos domos en las regiones de  $t_D < 2.5$  y a  $t_D > 6.5$  de las curvas y una tendencia de línea horizontal en la región, con valores cercanos a cero (0) entre  $2.5 < t_D < 6.5$ . A pesar de esto, los valores de la desviación estándar de la concentración normalizada de trazadores obtenidos con un número de partículas por celda de 5000, muestra valores diferentes, con respecto a otros casos, (10000 y 50000 partículas por celda), particularmente, en la parte final del segundo domo. Esto podría estar asociado a una combinación de dos efectos: el primero, al número reducido de partículas y el segundo a la eliminación aleatoria de masa en el efluente, a través del proceso de producción. Además, se obtuvieron valores de la raíz cuadrática media de 0.064, 0.062 y 0.062, cuando el número de partículas por celda utilizada fue 5000, 10000 y 50000, respectivamente.

En contraste, en la **Figura 5-4**, se observa que el número de partículas por celda tiene un efecto significativo sobre el comportamiento de las curvas de comportamiento del efluente, específicamente se nota que a menor  $Np$  mayor el error. Además, se obtuvieron valores de la raíz cuadrática media de 0.088, 0.062, 0.056 y 0.050, cuando el número de partículas por celda utilizada fue 50, 100, 500 y 1000, respectivamente. Estos valores indican que para un número menor de partículas en la celda, el cuadrado medio de la raíz o el error aumenta, lo cual se espera debido a que el error es proporcional al inverso de la raíz cuadrada del número de partículas en la celda  $1/\sqrt{Np}$ .



a. Sentitividad para  $Np$  de 5000, 10000 y 50000

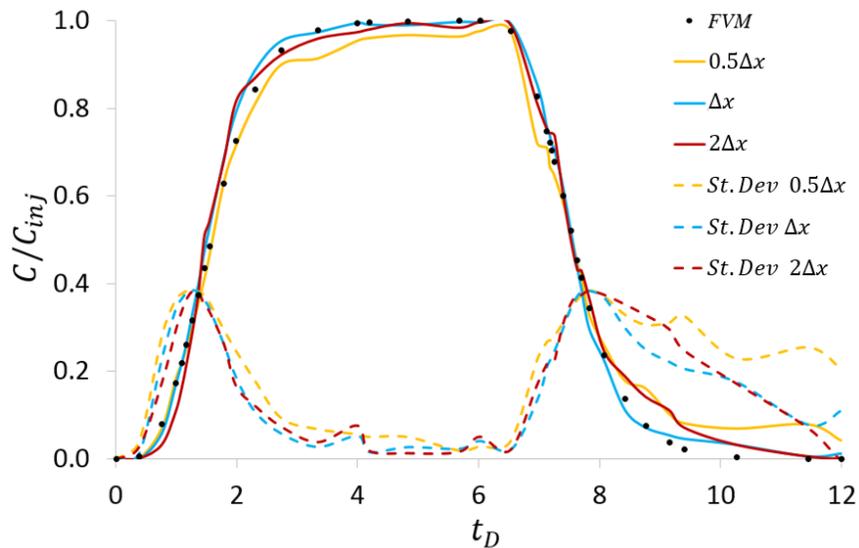


b. Sentitividad para  $Np$  de 50, 100, 500 y 1000

**Figura 5-4.** Efecto sobre el número de partículas sobre el promedio de concentración del trazador ( $Np$ ) y la desviación estándar ( $St.Dev Np$ ) de la evolución en el tiempo en el efluente. a.)  $Np$  toma valores de 5000, 10000 y 50000, b.)  $Np$  toma valores de 50, 100, 500 y 1000.

Continuando con el análisis de la dependencia de malla, en la **Figura 5-5** se muestran las curvas que resultan al dividir y duplicar el tamaño de celda  $\Delta x$  del caso base, pero manteniendo el tamaño o volumen total del sistema constante. Aquí, se pudieron observar

ligeros cambios entre cada caso evaluado. En el caso particular de la curva de valor  $0.5\Delta x$ , éste muestra una mayor diferencia de la concentración normalizada en el efluente que las otras curvas reportadas. Aquí, se observa que estas variaciones están presentes cuando comienza la condición de equilibrio (o cuando la masa del trazador en cada partícula es similar) y la desviación estándar está disminuyendo, es decir en  $2.0 < t_D < 4.0$ . En el gráfico dos regiones exhiben este comportamiento. Una posible explicación podría atribuirse al hecho de disminuir el tamaño de los bloques de malla, lo que disminuye el coeficiente de dispersión, (esto se puede deducir de la ecuación (3.18)), y causa que algunas partículas con concentración diferente de cero no lleguen al bloque efluente donde se realiza la medida, tan rápido como en el caso base. Además, el término estocástico del modelo tiene una dependencia directa del coeficiente de dispersión (ecuación (3.17)). Así, mientras menor sea el coeficiente de dispersión, menor será el efecto asociado con el proceso de dispersión del Wiener, menor es la velocidad a la que se mueven las partículas y por tanto menor es la concentración normalizada en el efluente para los tiempos adimensionales cercanos a  $t_D$  de 2, cuando se reduce el tamaño del bloque de la malla o equivalentemente, cuando decrece el valor del coeficiente de dispersión.



**Figura 5-5.** Influencia del tamaño de la celda de la malla ( $\Delta x$ ) sobre la evolución temporal del promedio y la desviación estándar de concentración del trazador en el efluente.

### 5.1.4 Resumen y Conclusiones sobre el Transporte de Trazadores Inertes

En las **Secciones 5.1.1 – 5.1.3**, se presentan los resultados concernientes al flujo de un trazador inerte en un medio poroso. Estos resultados se dividieron en dos partes. Inicialmente se logra describir el transporte de dicho trazador en el sistema, representado por un núcleo, presentando la evolución de su concentración en el espacio. Además, se valida con datos reales, el comportamiento de la concentración en el efluente a medida que transcurre el tiempo.

En segunda instancia, se realizaron estudios paramétricos de número de partículas e independencia de malla, los cuales muestran una representatividad adecuada del transporte de trazadores a través de un medio poroso, sin importar el tamaño de la malla evaluado y mostrando que a medida que el número de partículas llega a un valor de umbral, en nuestro caso, mayor a 1000 partículas por celda, el ajuste mejora notablemente.

También se hace notar que el comportamiento de las curvas al presentarse en el espacio de variables adimensionales es general. Esto implica que puede representar cualquier sistema físico lineal, es decir, sin importar los valores que tome las variables petrofísicas de la roca, físicas del fluido y geométricas, siempre se tendrá el mismo comportamiento de la curva en un proceso de inyección a tasa constante donde se varié la concentración de inyección desde  $C_{inj}$  hasta cero.

## 5.2 Validación de la Concentración de Nanopartículas (NP's)

Continuando con el proceso de validación, en esta sección se plantea un problema con un grado de complejidad mayor a la inyección de trazadores, presentado en la **Sección 5.1**. Para esto se parte de condiciones similares a las utilizadas en la inyección de trazadores. Por tanto, se usan los datos de la **Tabla 5-1**. Adicionalmente, los resultados mostrados en esta sección, son logrados usando el mismo simulador desarrollado *in*

house. Nuevamente, los resultados fueron validados con datos experimentales obtenidos de la literatura (Li & Torsæter, 2015).

Ahora, se soluciona la ecuación de difusividad, ecuación (2.2) para obtener la presión y velocidad de la fase. Después, se calcula el coeficiente de dispersión usando la ecuación (3.18). Luego, se evoluciona la posición de las partículas aplicando la ecuación de Langevin, (ecuación (3.17)), sobre cada partícula. Entonces, se aplica el modelo de doble sitio con el fin de contabilizar cuanta masa se transfiere desde la fase líquida a la matriz, utilizando el conjunto de ecuaciones de (2.3) a (2.5). Posteriormente, se evoluciona la concentración de las partículas usando el modelo de Curl modificado, ecuación (3.19).

Los parámetros adicionales usados para obtener el ajuste de los datos experimentales para la inyección de nanopartículas se informan en la **Tabla 5-2**. Principalmente, los parámetros de la **Tabla 5-2** se utilizan en el modelo de sitio doble dado por las ecuaciones (2.3) a (2.5). Para la validación del transporte de concentración de NP's se considera que la cantidad de masa retenida inicialmente en la matriz en el medio poroso es nula y nuevamente, se tienen las mismas condiciones de inyección de concentración, excepto que en este caso se cambia el trazador por NP's.

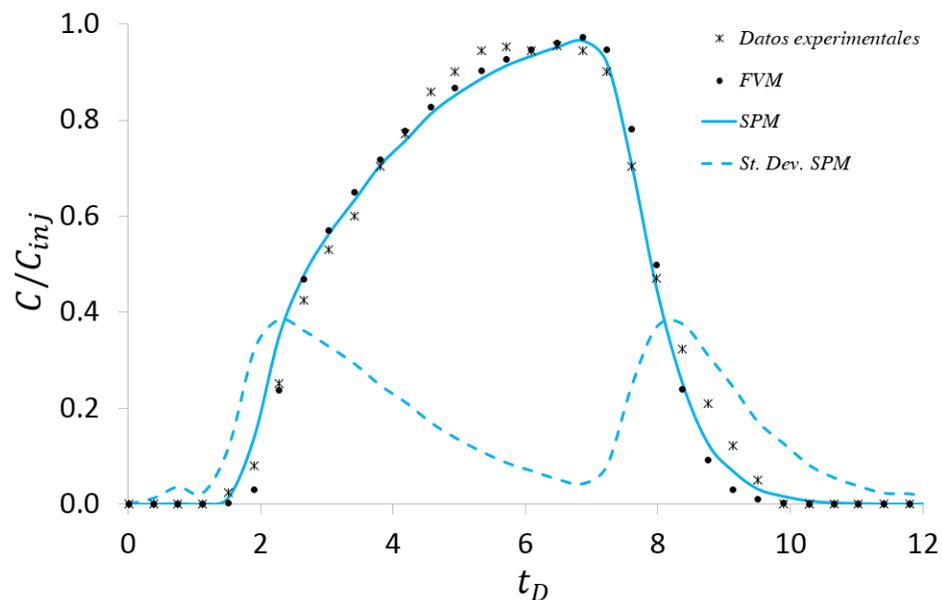
**Tabla 5-2.** Parámetros para el ajuste del modelo de sitio doble, que permiten describir los procesos de retención y movilización de NP's del medio poroso.

Variable	Value
$k_{irr}$ (1/s)	$8.40 \times 10^{-2}$
$k_{ra}$ (1/s)	$2.11 \times 10^{-3}$
$k_{rd}$ (1/s)	$1.00 \times 10^{-6}$
$x_{1max}$ (w/w %)	$7.26 \times 10^{-5}$
$x_{2max}$ (w/w %)	$1.45 \times 10^{-4}$

### 5.2.1 Validación de la Concentración de Nanopartículas en el Efluente

En la **Figura 5-6** se presentan los resultados correspondientes a la evolución de la concentración de NP's normalizadas por la concentración de inyección,  $C_{inj}$  en función del tiempo. De nuevo, como en la **Figura 5-2**, la concentración de NP's se mide en el efluente del medio poroso. También aquí, los asteriscos, puntos, curvas continuas y semicontinuas representan datos experimentales, solución determinista y solución estocástica y desviación estándar, respectivamente.

En la **Figura 5-6**, se obtienen resultados análogos a los obtenidos para la concentración del trazador en el efluente (en referencia al comportamiento de los métodos FVM y SPM) para la evolución de la concentración de NP's. Los estudios de validación 1D del transporte de concentración de NP's en los medios porosos muestran que tanto el modelo SPM como el FVM son pertinentes en la descripción del transporte de NP's en el medio poroso, porque ambos modelos convergen a los datos experimentales.



**Figura 5-6.** Promedio de concentración de NP's y desviación estándar normalizadas de la evolución en el tiempo en el efluente.

Estos presentan forma de joroba asimétrica hacia la izquierda, debido a la combinación de la concentración de inyección y el proceso de retención y movilización en la región de  $2 <$

$t_D < 8$ . Esto se verá posteriormente con mayor claridad cuando se realicen las sensitividades. Además, la desviación estándar presenta dos formas de "domos asimétricos a la derecha" con máximos en  $t_D$  de 2 y 8 aproximadamente de la curva, que podrían asociarse a una combinación de fenómenos de mezcla descritos por el modelo modificado de Curl, (dado por la ecuación (3.19)) y de retención / movilización de NP's, modeladas con el modelo de doble sitio. El comportamiento de la desviación estándar permite observar cambios en la concentración de NP's de cada partícula en el dominio. Inicialmente, la dispersión estadística es nula, pero ésta aumenta a medida que la masa del componente en cada partícula se mezcla con la masa de otras, hasta el valor máximo de 0.40, a  $t_D$  de 2, aproximadamente. Entonces, ésta comienza a disminuir lentamente y se obtiene un valor mínimo de 0.05, en  $t_D$  cercano a 7. En contraste, justo cuando se obtiene este valor mínimo de desviación estándar, se logra el valor máximo de concentración de NP's, en el efluente, y se alcanza una "condición de equilibrio" entre la retención / movilización en el sistema.

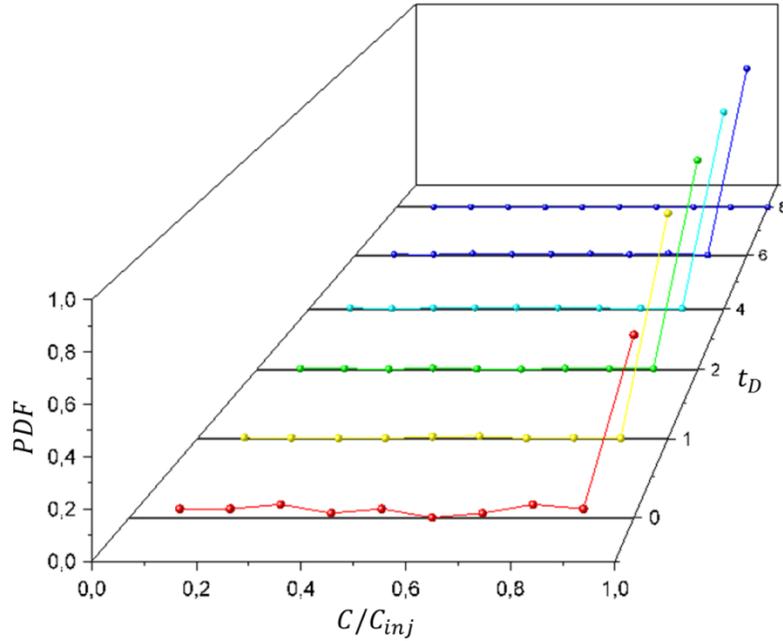
Luego, a partir de este valor se observa el efecto de cambio de concentración de inyección en el efluente. Este efecto, en el  $t_D$  aproximadamente de 7, causa un incremento de la desviación estándar de la concentración de NP's, hasta un valor de 0.40 en  $t_D$  cercano a 8.5. Esta desviación estándar aumenta porque el sistema está en condiciones de desequilibrio desde el punto de vista de la masa del componente (NP's) que tienen las partículas en el volumen del efluente. Posteriormente, después de un tiempo de relajación tanto la concentración como la desviación estándar tienden a cero tratando de volver a las condiciones iniciales del sistema, en el final de los  $t_D$ . Una vez más, la desviación estándar ofrece información adicional sobre el sistema, como el tiempo de relajación de concentración, debido a los procesos de mezcla, retención y movilización de NP's, evaluadas en este caso. Además, la raíz cuadrática media normalizada de las curvas estocásticas y deterministas con respecto a los datos experimentales es de 0.034 y 0.037, lo que sugiere un buen ajuste de ambas descripciones (determinista y estocástica), en la descripción del transporte de NP's en el medio poroso. Análogo a lo presentado en la **Sección 5.1.2** ahora se presenta la evolución de la la función de densidad de probabilidad de la concentración de nanopartículas, (PDFC - NP's).

### 5.2.2 Evolución de la Función de Distribución de Probabilidad de Concentración de las Nanopartículas

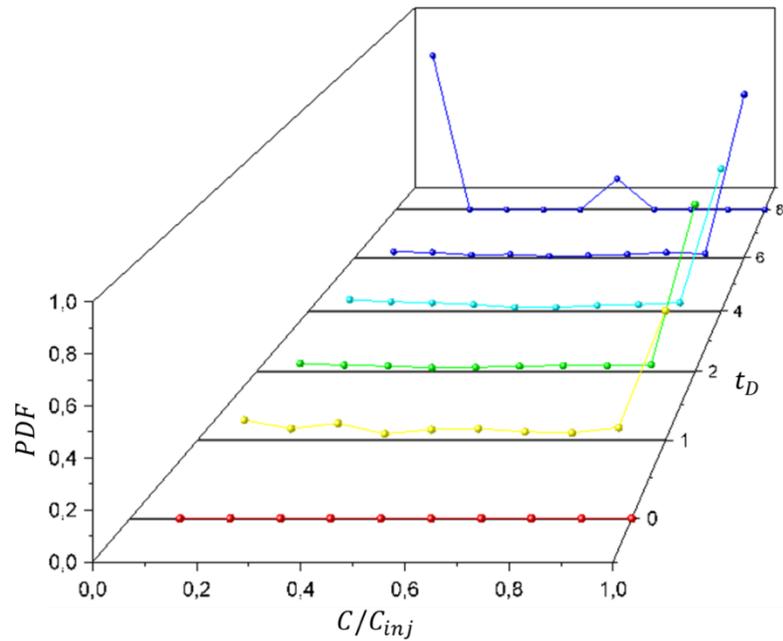
En la **Figura 5-7** se presenta el comportamiento de la PDFC - NP's en la fase agua, a.) en el bloque 1 y b.) en el bloque 5. Estos corresponden al punto de inyección o punto inicial y al punto medio del sistema analizado, respectivamente. Además, las **Figuras 5-7** a.) y b.) presentan seis (6) curvas asociadas a diferentes  $t_D$ . Inicialmente, para el punto de inyección, para  $0 < t_D < 6$ , las PDF tienden a comportarse como una función delta de Dirac, (con valor cercano a 1.0) localizada en  $0.9 < C/C_{inj} < 1.0$ , debido a que la concentración adimensional de las partículas que se inyecta, justamente tienen este rango. Aunque, no se alcanza la unidad, debido a condiciones similares a las expuestas en la **Figura 5-3**. Además, se puede observar que existe dispersión adicional en las curvas de PDFC - NP's, debido al proceso de retención / movilización que ocurre entre la matriz y las NP's.

De otro lado, para  $t_D = 8$ , la curva muestra valores nulos. Esto se explica por el cambio de concentración de inyección a cero, en  $t_D = 7$  y al hecho de tener un efecto de retención irreversible, en el sistema que regula o disminuye la cantidad de nanopartículas que se encuentran disponibles en la fase agua.

De otro lado, en el punto medio del núcleo, se observan comportamientos similares a los obtenidos en el bloque inicial para  $1 < t_D < 6$ , respecto a la PDFC - NP's. Pero en  $t_D = 0$ , la PDFC - NP's es nula, debido a que la concentración de las NP's no ha llegado a la mitad del núcleo a este tiempo. Esto es lógico debido a que si el trazador no llega a este punto, menos lo harán las NP's, que sufren retención en la matriz. Adicionalmente, para  $t_D = 8.0$ , se observa que hay una dispersión fuerte de la PDFC - NP's, debido al cambio a cero, en la concentración de inyección en el sistema en  $t_D = 7$ .



a. PDFC - NP's punto de inyección e inicial del sistema (Bloque 1)



b. PDFC - NP's punto medio del sistema (Bloque 5)

**Figura 5-7.** Evolución de las PDFC - NP's a.) en el punto inicial e inyección de sistema poroso (Bloque 1) y b.) en el punto medio (Bloque 5) para diferentes tiempos adimensionales.

En conclusión, se nota que el comportamiento de la PDFC - NP's es similar al obtenido para el trazador. Sin embargo, hay diferencias en la PDFC - NP's debido a que la masa retenida en la matriz rocosa del medio poroso, lo cual retrasa el frente de concentración. Esto se observa al comparar la **Figura 5-3** y la **Figura 5-7**, específicamente para  $t_D = 0$  y 8, la PDFC para el trazador es menor que para las NP's.

A continuación, se realizan sensibilidades del modelo de doble sitio. Aquí se varían la concentración de inyección, las constantes de retención y movilización, así como las concentraciones máximas de retención en los sitios 1 y 2.

### 5.2.3 Sensibilidades del Modelo de Doble Sitio y sus efectos en el Transporte de Nanopartículas

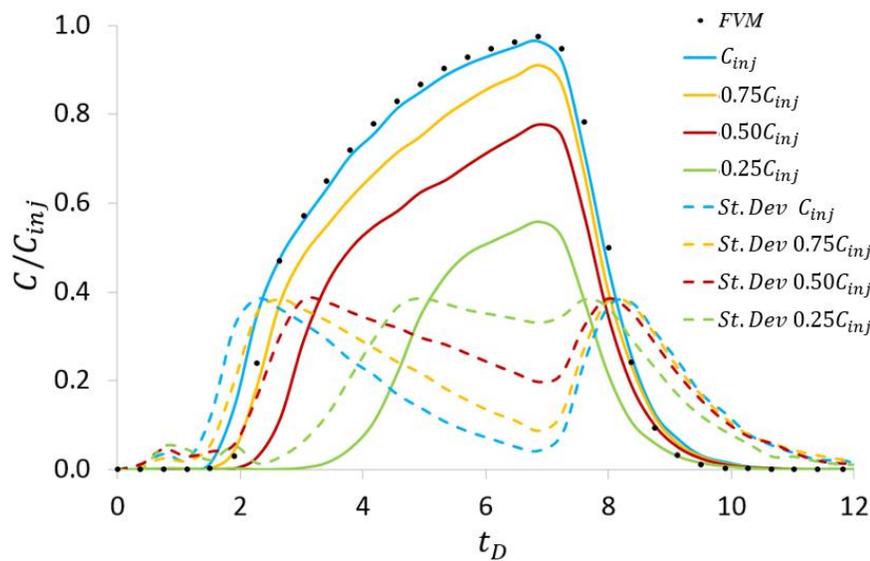
Para realizar las sensibilidades del modelo de doble sitio se considera el mismo sistema, el cual consta de un núcleo cuyas características están reportadas en la **Tabla 5-1** y los parámetros del modelo de doble sitio son presentados en la **Tabla 5-2**.

Cinco sensibilidades se presentan en esta parte del estudio. La primera asociada con el cambio en la concentración de inyección y las demás, asociadas a los parámetros que aparecen en el modelo de doble sitio descrito por las ecuaciones (2.3) a (2.5). Las razones por las cuales se realizan dichas sensibilidades están encaminadas a: primero, el efecto de la concentración de inyección sobre la concentración en el efluente, manteniendo constante los parámetros del modelo de retención y movilización y segundo a discernir los rangos de variabilidad y la identificación de los parámetros más sensitivos del modelo de doble sitio, además, del comportamiento o respuesta de la curva de concentración en el efluente y de la desviación estándar, la cual aporta información relacionada con el equilibrio de mezclado o tiempos de mezclado del sistema.

Con lo anterior en mente, se realiza la sensibilidad a la concentración de inyección. En la **Figura 5-8** se muestra el comportamiento de la concentración y desviación estándar normalizadas de NP's, en el efluente para cuatro (4) valores de concentración de inyección. Las curvas base o de referencia están representadas por los puntos, (asociados al modelo FVM) y la curva continua, de color azul (obtenida con el modelo SPM). Estas curvas base

son resultado de inyectar a una concentración de NP's ( $C_{inj}$ ) de 2000 ppm. Luego se observan tres pares de curvas adicionales, las cuales fueron el resultado de variar la concentración de inyección ( $C_{inj}$ ) en porcentajes de 25%, 50% y 75%, correspondientes a las curvas continuas verde, roja y amarilla.

En la **Figura 5-8** se observa que la curva de concentración normalizada de NP's en el efluente conserva la misma forma de joroba asimétrica a la izquierda que tiene la curva base de concentración de inyección  $C_{inj}$ . Sin embargo, a medida que ésta disminuye desde un 100% a 25%, las concentraciones en el efluente se atenúan, es decir, sufren una reducción en tamaño. Aquí, se nota que al inicio del proceso existe un retraso en el incremento de la concentración normalizada de NP's, esto se extiende hasta un  $t_D > 2.5$ .



**Figura 5-8.** Sensibilidad sobre la concentración de inyección ( $C_{inj}$ ) y la desviación estándar ( $St.Dev C_{inj}$ ), para valores correspondientes a 0.75, 0.50 y 0.25 veces  $C_{inj}$ . Las curvas continuas se refieren a  $C_{inj}$ , (azul) 0.25 (verde), 0.50 (roja) y 0.75 (amarilla) veces  $C_{inj}$ .

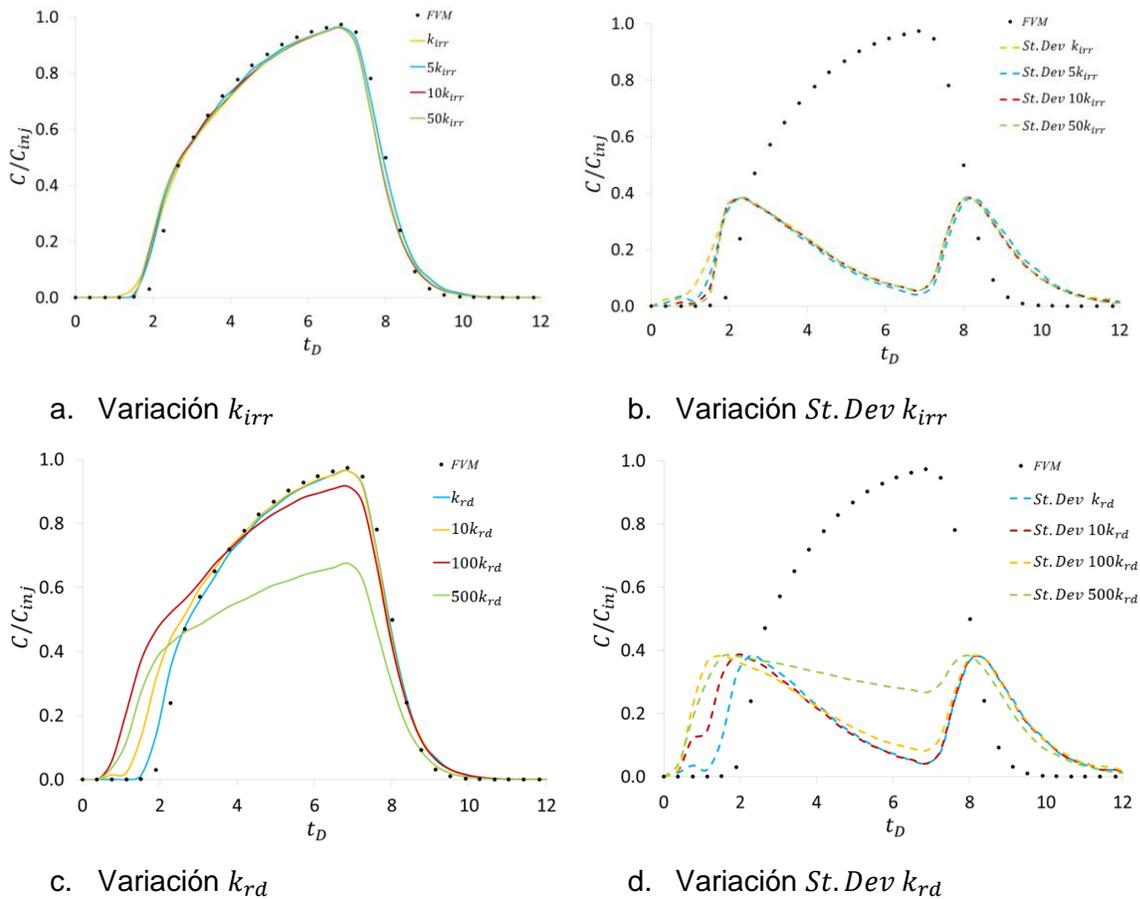
Además, se observa que las curvas cada vez llegan hasta valores máximos de concentración normalizada de NP's, que son menores a medida que disminuye el porcentaje de  $C_{inj}$ . Lo anterior, puede explicarse desde dos puntos de vista, en primer lugar, el modelo de retención y movilización, mantiene sus parámetros intactos o sin cambios, por tanto la misma cantidad de masa es retenida y movilizada en el medio poroso,

sin importar la concentración de inyección y en segundo lugar, hay menos masa de nanopartículas dentro del sistema, debido a que se disminuyó el porcentaje de  $C_{inj}$ .

De otro lado, en la **Figura 5-8** también se presenta el comportamiento de la desviación estándar para los diferentes valores de concentración normalizada de NP's definidos anteriormente. Todas las curvas relacionadas a estas variables muestran dos domos asimétricos a la derecha, asociados a cambios de concentración, ( $C_{inj}$  para  $t_D \in [0,6]$  y cero para  $t_D \in (6,12)$ ). A pesar de lo anterior, es importante resaltar que después de alcanzar el valor máximo del primer domo todas las curvas de desviación estándar deberían decrecer rápidamente tratando de llegar a cero, pero esto no sucede en ningún caso sensitivizado. De hecho, se observa que el sistema se mantiene en “desequilibrio”, (relacionado con la masa de componente que tiene cada partícula en el REV del afluente) para valores de 50%, 75% y 100% de  $C_{inj}$ . Adicionalmente, la desviación estándar para 25% de  $C_{inj}$  muestra una tendencia del sistema a un “equilibrio dinámico”, donde la desviación estándar no es nula, sino que toma un valor constante diferente de cero, (tiempo a tiempo), es decir, el sistema tiene una tasa de intercambio de masa constante con el tiempo, con alta dispersión de dicha concentración de nanopartículas en cada partícula del dominio. Luego, con estos resultados se logra identificar efectos de equilibrio estático y dinámico, cuando las dispersiones son cero (0) o constantes no nulas. Además, se pueden identificar estados de desequilibrio a partir de las curvas de desviación estándar de la concentración normalizada de NP's.

Ahora se procede a realizar la sensibilidad del modelo de doble sitio o retención / movilización. La **Figura 5-9** está compuesta de cuatro gráficos. Los resultados presentados aquí, se obtienen variando de forma logarítmica las variables de retención irreversible  $k_{irr}$  (**Figuras 5-9a. y 5-9b.**) y movilización  $k_{rd}$ , (**Figuras 5-9c. y 5-9d.**). Los valores arbitrarios que toma la retención son 0.5, 1, 5 y 10 veces  $k_{irr}$  y la constante de movilización toma valores de 1, 10, 100 y 500 veces  $k_{rd}$ . Además, la curva de puntos representa los resultados obtenidos con el FVM en todas graficas de la **Figura 5-9**, y éstas se asocian a los resultados del caso base, adicionalmente, los casos sensitivizados con el SPM incrementando los valores de cada variable, son representados por curvas continuas, amarilla, azul, roja y verde, respectivamente. Aunado a lo anterior, y siguiendo un rotulo

similar se observan las desviaciones estándar, (en líneas semicontinuas), en las **Figuras 5-9b. y 5-9d.**



**Figura 5-9.** Sensitividad de la constante de retención irreversible,  $k_{irr}$  (a.), la constante de movilización,  $k_{rd}$  (c.) sobre la concentración de nanopartículas. Sensitividad de las desviaciones estándar de las variables mencionadas (b.) y (d.), respectivamente, en el efluente en función del tiempo. Los puntos se refieren a curva base usando FVM con una vez  $k_{irr}$ , las curvas continuas amarilla, azul, roja y verde son respectivamente para valores de 0.5, 1, 5 y 10 veces  $k_{irr}$  en (a.) y (b.) y para valores de 1, 10, 100 y 500 veces  $k_{rd}$  en (c.) y (d.).

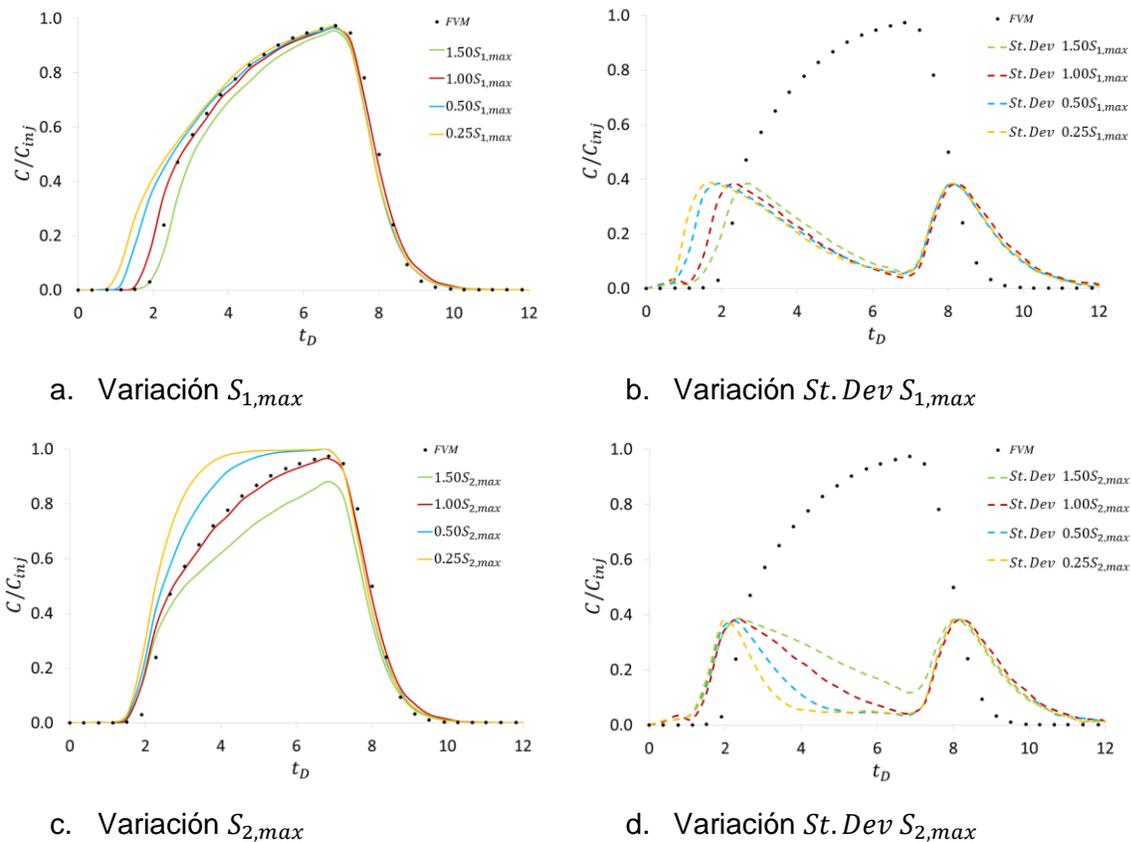
En general en las **Figura 5-9a. y 5-9b.** se observa un comportamiento similar tanto de la curva de concentración como de la desviación estándar para todos los valores de  $k_{irr}$  escogidos. Sin embargo, se hace notar que en la **Figura 5-9b.** hay diferencias leves entre las desviaciones estándar cuando los  $t_D$  son pequeños, (menores a 2). En esta región se

observa que la dispersión se incrementa más rápido cuando  $k_{irr}$  se disminuye a la mitad de su valor original. En contraste, la desviación estándar se retrasa si los valores de  $k_{irr}$  se incrementan. A pesar de esto, dichas variaciones no se aprecian fácilmente en la curva de concentración de efluente. Luego, para efectos prácticos la variación de  $k_{irr}$  tiene una influencia mínima en este experimento.

En contraste a lo anterior, en la **Figura 5-9c y 5-9d** se presentan diferencias, respecto al caso base, de las curvas de concentración y desviación estándar para los valores de  $k_{rd}$  escogidos. En general, el efecto de la variación logarítmica de  $k_{rd}$  muestra un adelanto en el incremento de la concentración y de la desviación estándar en el efluente, (respecto al caso base), al inicio del proceso de inyección, para valores menores a  $t_D < 2$ . Este incremento se observa en el tiempo, primero para los valores más altos de  $k_{rd}$  (100 y 500 veces  $k_{irr}$ , respectivamente) y luego para un valor de 10 veces  $k_{irr}$  hasta llegar al mínimo valor sensibilizado o caso base. Se hace notar un retroceso en el comportamiento al pasar de 500 a 10 veces  $k_{irr}$ , lo cual se puede asociar a la cantidad de masa que hay absorbida en la roca. De otro lado, en la **Figura 5-9d**, esto ocurre en cada curva de desviación estándar, hasta un valor máximo de la desviación estándar de aproximadamente 0.40 de  $C/C_{inj}$  y durante un  $t_D$  de aproximadamente 2. Además, las curvas presentan dos formas de domos, las cuales se explican por el cambio en la concentración de inyección.

Lo expuesto en los dos párrafos, muestra el efecto de la variación logarítmica de los parámetros  $k_{irr}$  y  $k_{rd}$ . Aquí, la desviación estándar vuelve a mostrar un comportamiento, en la región comprendida entre  $2 < t_D < 8$ , que tiende a verse como una meseta en vez de dos domos, (ver **Figura 5-8**), lo cual, puede asociarse a una fuerte dispersión entre los valores de masa o concentración de NP's que tienen las partículas en el REV o volumen de control, que físicamente podría interpretarse como una tendencia a un equilibrio dinámico, debido a que la desviación estándar tiende a ser un valor constante diferente de cero. Adicionalmente, los resultados presentados en la **Figura 5-9**, muestran que bajo las condiciones de simulación a escala de núcleo las variaciones de los parámetros  $k_{irr}$  y  $k_{rd}$  deben ser al menos un orden de magnitud para observar cambios en la retención y movilización del medio poroso.

Para terminar esta sección la **Figura 5-10** está compuesta de cuatro gráficos. Los resultados mostrados en ésta, son obtenidos modificando los parámetros de máximas concentraciones de NP's en el sitio 1,  $S_{1,max}$  (**Figuras 5-10a. y 5-10b.**) y en el sitio 2  $S_{2,max}$ , (**Figuras 5-10c. y 5-10d.**) del modelo de doble sitio, dado por las ecuaciones (2.3) a (2.5). Los valores que toman dichas variables son 1.50, 1.00, 0.50 y 0.25 veces  $S_{i,max}$  con  $i \in \{1,2\}$ . Además, se tiene que los puntos corresponden al caso base con FVM, las curvas continuas con colores verde, rojo, azul y amarillo hacen referencia al SPM para valores desde 1.50 a 0.25 veces  $S_{i,max}$ . Adicionalmente y siguiendo un rotulo similar se observan las desviaciones estándar, en las **Figuras 5-10b y 5-10d.**



**Figura 5-10.** Sensibilidad de la concentración máxima en el sitio 1 ( $S_{1,max}$ ) (a.), la concentración en el sitio 2 ( $S_{2,max}$ ) (c.) sobre la concentración de nanopartículas y las desviaciones estándar de las variables mencionadas (b.) y (d.), respectivamente, en el efluente en función del tiempo.

En la **Figura 5-10a**, se observa un comportamiento semejante a una joroba para todas las curvas, en el efluente, además se nota que la disminución del valor de  $S_{1,max}$  adelanta el incremento de concentración de NP's respecto al valor base y viceversa. Sin embargo todas las curvas llegan a un valor cercano a la  $C_{inj}$  en un  $t_D$  de 7.0 aproximadamente. Un comportamiento análogo, respecto al adelanto en la desviación estándar se puede notar en la **Figura 5-10b**, donde se presentan dos domos, los cuales son característicos en este proceso de inyección/producción acompañado de cambio en la concentración de inyección en  $t_D = 7.0$ . Así, de las **Figura 5-10a y 5-10b** se puede concluir que el efecto del parámetro  $S_{1,max}$  afecta las curvas de concentración de NP's y desviación estándar en los tiempos adimensionales tempranos de 0 a 2 en el efluente.

De otro lado, en la **Figura 5-10c y 5-10d** se presenta el comportamiento de las curvas de concentración y desviación estándar para los valores de  $S_{2,max}$  escogidos y mencionados. Claramente se observa que las diferencias más notorias se presentan entre valores de  $t_D$  de 2 a 7. Allí, se nota que un incremento de la pendiente a medida que disminuye el valor de  $S_{2,max}$ , y específicamente para la curva de  $0.25S_{2,max}$  la curva de concentración normalizada de NP's se asemeja al caso de la inyección de trazadores, (ver **Figura 5-2**). Además, en la **Figura 5-10d** se aprecian diferencias en las desviaciones estándar, justamente, en el intervalo de tiempo adimensional mencionado. Aquí nuevamente, se advierte que la curva con menor valor de  $S_{2,max}$  tiene el mismo comportamiento de la curva de trazador inerte. Por lo tanto, los resultados presentados en la **Figura 5-10** indican que  $S_{1,max}$  tiene una incidencia inicial sobre el comportamiento de la curva de concentración normalizada de NP's, adelantando el incremento de la concentración en el efluente, en el intervalo de  $t_D$  de 0 a 2. De otro lado, el parámetro  $S_{2,max}$  afecta la curva de concentración desde 2 hasta un  $t_D$  de 7, aproximadamente. Allí, este parámetro modula la pendiente de la concentración y la desviación estándar, asemejándose el proceso a la inyección de un trazador inerte cuando éste parámetro es pequeño (de 0.25 veces  $S_{2,max}$ ) y el comportamiento es similar a una menor inyección (ver **Figura 5-8** para 25% de  $C_{inj}$ ), si el valor de esta variable aumenta.

### 5.2.4 Resumen y Conclusiones Sobre Sensitividades del Modelo de Retención / Movilización.

En las **Secciones 5.2.1 – 5.2.3**, se presentaron los resultados asociados a la interacción entre las nanopartículas con la matriz del medio poroso y el fluido de transporte donde viaja este componente. Estos resultados se dividieron en dos partes. Inicialmente se logra describir el transporte de las nanopartículas en el sistema, (que nuevamente es un núcleo), mostrando la evolución de su concentración normalizada en el espacio. Además, se presenta y valida el comportamiento de la concentración en el efluente a medida que transcurre el tiempo, usando datos reales.

Luego se realizaron estudios paramétricos de la tasa de inyección y las constantes de las cuales depende el modelo de doble sitio. En general, en la **Figura 5-8** al disminuir la tasa de flujo se observa que el comportamiento del domo o la concentración en el efluente, mengua o disminuye, debido a la cantidad de masa que es transferida a la matriz desde la fase fluida es la misma que aquella obtenida para el caso base. Esto debido a que inicialmente los coeficientes del modelo de doble sitio no son modificados. Así, en la fase fluida queda menos masa de componente que es transportado y por tanto dicha concentración, en el fluido es menor. En contraste, si se incrementa la concentración de inyección, el domo que se observa en el efluente, tiende a asemejarse a aquel obtenido cuando se inyecta un trazador inerte. Esto se debe a que existe tanta cantidad de materia del componente entrando en el medio poroso que se suple casi “instantáneamente” la cantidad de masa que puede transferirse a la matriz. De otro lado, el comportamiento de la desviación estándar en este experimento presenta los mismos dos domos asociados a cambios en las masas o concentración de las partículas en el efluente. Sin embargo, en la región comprendida entre dichos domos, se observa que esta variable tiende a disminuir linealmente, pero a medida que la concentración de inyección disminuye la magnitud de la pendiente disminuye, observándose que a valores de  $0.25C_{inj}$  la pendiente es cercana a cero (ver **Figura 5-8**). Esto podría interpretarse como una tendencia del sistema a un equilibrio dinámico donde la dispersión es constante.

Adicionalmente, la variación de los parámetros del modelo de doble sitio, (descrito por las ecuaciones (2.3) a (2.5)), presentan diferentes comportamientos. Inicialmente, en la

**Figura 5-9** se observa que las variables  $k_{irr}$  y  $k_{rd}$  deben tener cambios logarítmicas para poder obtener variaciones significativas en la curva de concentración en el efluente. Ahora, al analizar la **Figura 5-10**, donde se variaron las concentraciones máximas en los sitios 1 y 2, ( $S_{1,max}$  y  $S_{2,max}$ ), se nota que  $S_{1,max}$  afecta la primera parte de la rampa de incremento de concentración en el efluente, adelantando o retrasando su aparición conforme, ésta disminuya o aumente, respectivamente. Un comportamiento similar ocurre con la desviación estándar. Esto claramente se debe a la cantidad de masa que es transferida de la fase fluida a la matriz. Continuando con la **Figura 5-10b**, la variación de  $S_{2,max}$  por su parte, afecta la segunda parte de la rampa de incremento de concentración. El valor de éste, incrementa o decrece la pendiente de la rampa mencionada y hace que el componente reactivo (nanopartículas) pierda ésta cualidad si  $S_{2,max}$  es bajo, es decir, el componente tiende a comportarse como un trazador inerte. Un comportamiento contrario y más parecido al descrito cuando se varía la tasa de inyección del componente, se obtiene cuando es  $S_{2,max}$  grande. Inclusive, como se observó al variar la concentración de inyección (ver **Figura 5-8** caso 25% de  $C_{inj}$ ), la desviación estándar de la concentración presenta un comportamiento similar al descrito allí, esto significa que hay un comportamiento lineal decreciente entre los dos domos que presenta esta curva, y la magnitud de sus pendientes se incrementa a medida que aumenta  $S_{2,max}$ .

Ahora, se introduce la sección de escalamiento desde una escala de núcleo a una escala de yacimiento.

### 5.3 Escalamiento del Flujo de Componentes a Nivel de Yacimiento

En esta parte del trabajo se quiere realizar el escalamiento del sistema desde el nivel de laboratorio o núcleo, es decir, desde el orden de centímetros y pulgadas, hacia la escala de yacimiento, donde las dimensiones son cientos de metros o pies.

Para esto se toma como base los datos de escala de laboratorio reportados por Li y Torsæter (2015) y se llevan al espacio de variables adimensionales, con el fin de abolir la dependencia de los datos de las propiedades físicas que inicialmente, se reportaron para

dicho núcleo, (Ver **Tablas 5-1** y **5-2**). Por lo tanto, si se realiza un escalado apropiadamente, el comportamiento de la concentración en el efluente tanto para el trazador como para las nanopartículas o en general cualquier componente o especie, deberá ser el mismo, bajo las condiciones de inyección.

Este escalado se realiza bajo la consideración de conservación del momento lineal en el sistema. Para esto se escoge arbitrariamente un valor de escalado para la longitud,  $R_L$ , se parte de la ley de Darcy y se realiza un proceso de análisis inductivo para llegar al escalado apropiado. La forma de la ecuación de Darcy escalada es

$$\frac{q R_L^2}{A R_L^2} = \frac{k \partial P R_L}{\mu \partial x R_L} \quad (5.1)$$

donde la presión  $P$  se escala multiplicándola por  $R_L$ . Además, el área tiene dimensión  $L^2$ , entonces el factor de escalamiento de ella y de la tasa es  $R_L^2$ . Así, siguiendo este mismo proceso de análisis y observando la ecuación de difusividad, se nota que el término de almacenaje, tiene una derivada temporal de presión de primer orden. Por lo tanto, el tiempo se escala por un factor  $R_L$ . Continuando con los términos asociados a la ecuación de difusividad como las transferencias de masa entre la fase fluida y la matriz o roca, se tiene que las constantes asociadas al modelo de doble sitio, retención irreversible, retención reversible y la constante de movilización se escalan por un factor de  $1/R_L$ . Las demás variables como petrofísicas de la roca y físicas del fluido se mantienen inmutables en este análisis, es decir que la movilidad de las fases fluidas no es necesario escalarlas en este procedimiento. La **Tabla 5-3** resume los factores de escalamiento de cada una de las variables del proceso.

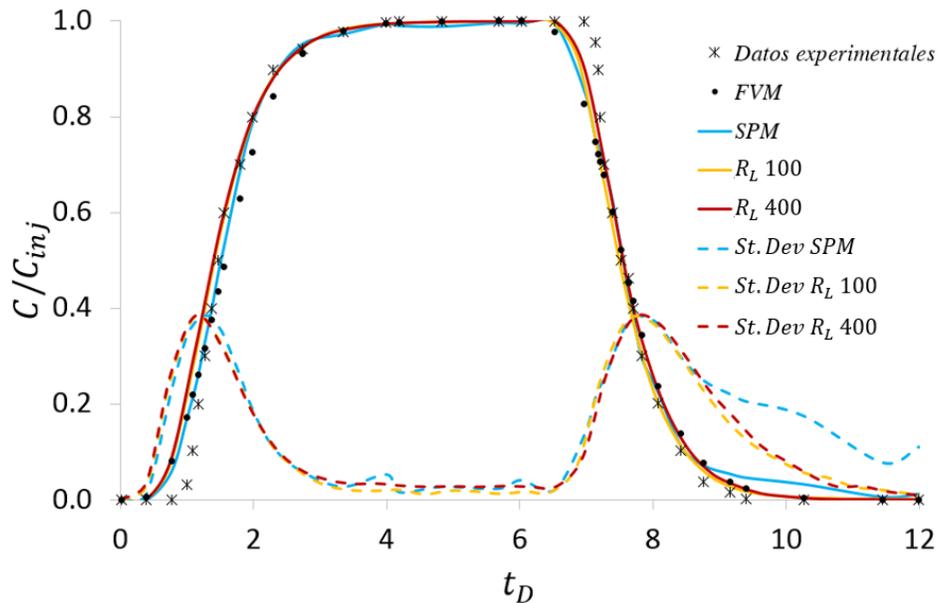
A continuación, se presentan los resultados obtenidos al realizar el escalamiento de los componentes trazador y nanopartículas. Se realizan dos escalamientos tomando valores arbitrarios de  $R_L$ . Estos valores son 100 y 400 veces la longitud inicial del sistema a escala de laboratorio

**Tabla 5-3.** Factores de escalamiento para proceso de inyección de componentes en el medio poroso.

Variable	Valor	Variable	Valor
$A_x$ ( $cm^2$ )	$R_L^2$	$\mu_w$ ( $cp$ )	1.0
$L$ ( $cm$ )	$R_L$	$C_{inj}$ ( $ppm$ )	1.0
$k_x$ ( $mD$ )	1.0	$q_w$ ( $cm^3/s$ )	$R_L^2$
$\phi$	1.0	$t_{total}$ ( $s$ )	$R_L$
$c_t$ ( $l/pc$ )	1.0	$S_w$	1.0
$P_p$ ( $lpc$ )	$R_L$	$Pe$	1.0
$B_w$ ( $by/bcn$ )	1.0	$Np$ ( $partículas/celda$ )	1.0
<i>Modelo de doble sitio</i>		<i>Modelo de doble sitio</i>	
$k_{irr}$ ( $1/s$ )	$1/R_L$	$k_{ra}$ ( $1/s$ )	$1/R_L$
$k_{rd}$ ( $1/s$ )	$1/R_L$	$S_{1,max}$ ( $w/w \%$ )	1.0
$S_{2,max}$ ( $w/w \%$ )	1.0		

### 5.3.1 Escalamiento de la Concentración de Trazador en el Efluente

En la **Figura 5-11** se muestran los resultados correspondientes a la evolución de la concentración de trazador normalizada por el proceso de inyección en función del tiempo. De nuevo, como en la **Figura 5-2**, la concentración del trazador se mide en el efluente del medio poroso. También aquí, los asteriscos, puntos y curva continua azul representan datos experimentales, solución determinista y solución estocástica, respectivamente. Adicionalmente, se presentan dos curvas en amarillo y rojo, las cuales hacen referencia a factores de escalamiento  $R_L$  de 100 y 400, correspondientemente. Aunado a lo anterior, se hace notar que para cada caso estocástico, se presenta su respectiva desviación estándar representada con curvas semicontinuas.



**Figura 5-11.** Comparación de escalamiento  $R_L$  de la evolución temporal de la concentración y desviación estándar normalizadas del trazador en el efluente. Los asteriscos, puntos y línea continua representan los datos experimentales y los resultados deterministas y estocásticos, respectivamente. Además, las curvas continuas amarilla y roja hacen referencia a los resultados estocásticos al escalar 100 y 400 veces, correspondientemente.

En la **Figura 5-11**, se observa que los casos de escalamiento, donde  $R_L$  toma valores de 100 y 400, presentan comportamientos similares al caso base estocástico. Además, se nota que dichos resultados también se ajustan a los datos experimentales y los resultados obtenidos con el simulador determinista (FVM). Esto muestra que el escalamiento no afectó los resultados de concentración en el efluente. De hecho, esto era lo requerido. De otro lado, aunque los comportamientos de la desviación estándar de la concentración normalizada de trazador presentan la misma forma, se nota un desplazamiento del caso base respecto a las desviaciones obtenidas en ambos escalamientos. Es así como se observa que las desviaciones de los casos escalados son más suaves que la curva obtenida para el caso base. Este efecto puede asociarse justamente a la relación de los tamaños de las partículas y de las celdas donde se encuentran.

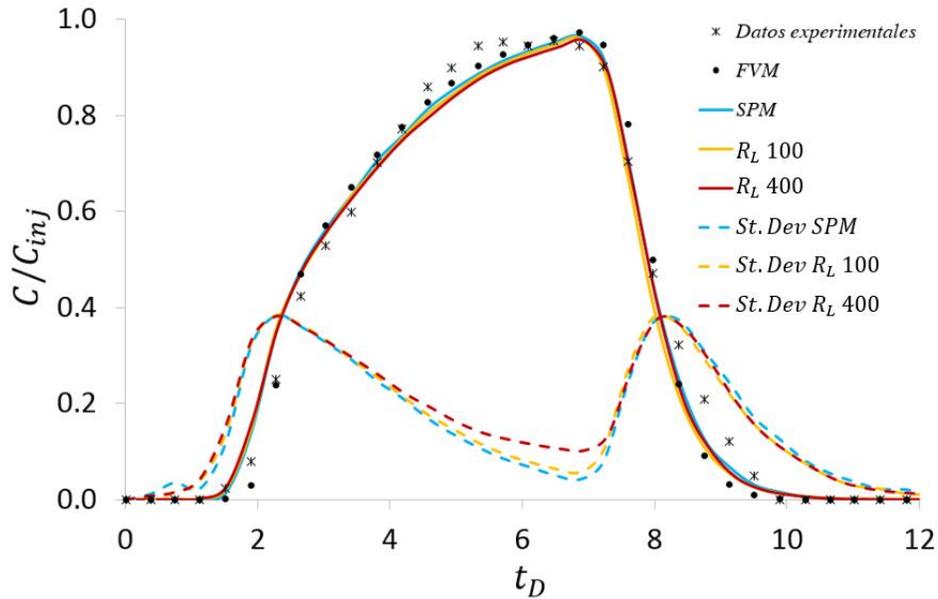
A continuación, se presentan los resultados del escalamiento del proceso de inyección de nanopartículas usando el modelo de doble sitio. Aquí, nuevamente se escala el sistema por un factor de 100 y de 400 veces el sistema inicial.

### 5.3.2 Escalamiento de la Concentración de Nanopartículas en el Efluente

Para obtener el escalamiento de inyección de nanopartículas (NP's) es necesario, escalar los valores de las **Tabla 5-1** y **5-2** y considerar los factores de escalamiento de la **Tabla 5-3**. Los modelos de transporte y de retención / movilización siguen siendo los mismos, debido a que el proceso obedece la misma física. Para el escalamiento se consideran las condiciones iniciales de validación del transporte de concentración de NP's que considera retención inicial en la matriz del medio poroso igual a cero (0).

Así, en la **Figura 5-12** se presentan los resultados asociados con la evolución de la concentración normalizada de NP's por el proceso de inyección en función del tiempo adimensional, en el efluente del medio poroso. Además, los asteriscos, puntos, curvas continuas (azul, amarilla y roja) representan datos experimentales, solución determinista y las soluciones estocásticas, respectivamente. Estas últimas curvas continuas hacen referencia a factores de escalamiento  $R_L$  de 1, 100 y 400, correspondientemente. Asimismo, se presentan las desviaciones estándar asociadas a cada resultado estocástico.

También, en la **Figura 5-12**, se observa que los resultados se ajustan a los datos experimentales y los resultados obtenidos en forma determinista. Esto muestra que el escalamiento no afectó los resultados de concentración de NP's en el efluente. Nuevamente, esto era lo requerido. De otro lado, las curvas de la desviación estándar de la concentración normalizada de NP's tienen el mismo comportamiento excepto, al final de la región de tiempos adimensionales entre 2.5 y 7.0. Allí, se observa que el tiempo de relajación o de homogenización del mezclado en las partículas dentro del volumen, donde se encuentra el efluente, es mayor a medida que el factor de escalamiento aumenta de 1 a 400.



**Figura 5-12.** Comparación de escalamiento  $R_L$  de la evolución temporal de la concentración y desviación estándar de nanopartículas en el efluente. Los asteriscos, puntos y líneas continuas (azul, amarilla y roja) representan los datos experimentales y los resultados deterministas y estocásticos, respectivamente. Además, las curvas continuas hacen referencia a los resultados estocásticos al escalar 1, 100 y 400 veces, correspondientemente.

### 5.3.3 Conclusión del Proceso de Escalamiento de Componentes (Trazadores y Nanopartículas)

En las **Secciones 5.3.1 – 5.3.2**, se realizaron los escalamientos del sistema a nivel de núcleo hasta la escala de yacimiento, para el flujo de un componente en una fase. Esto se efectuó al considerar un factor de escalamiento de 100 y de 400, veces la longitud inicial del núcleo que era de  $7.92 \text{ cm}$ . Los resultados presentados en las **Figura 5-11** **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** y **5-12** muestran que el escalamiento no afecta el modelo desarrollado. Esto quiere decir que es apropiado usar la conservación del momento lineal, descrito por la ley de Darcy y un análisis inductivo para obtener la forma apropiada de escalamiento de cada una de las variables involucradas en el proceso de

transporte de componentes en el medio poroso, como operacionales y geométricas. Aunado a esto el comportamiento de la desviación estándar es similar en cada caso presentado en la **Figura 5-11** y **5-12**, conservando la misma forma y tamaño en todo el tiempo adimensional analizado.

Luego de realizar un análisis monofásico e isotérmico del transporte de componentes en un medio poroso, se quiere aumentar la complejidad del sistema analizado, levantando estas dos consideraciones.

## **5.4 Transporte de Componentes en Flujo Multifásico No Isotérmico.**

En esta sección se realiza el proceso de validación del transporte de un soluto en un medio poroso donde al menos se encuentran dos fases, es decir, existe flujo multifásico. Esto adiciona fenómenos a la descripción del proceso como la transferencia de estos solutos, a otra fase. Para esto se considera un nuevo caso de simulación basado en medidas experimentales (Cardona, 2017). Este se considera como el caso de campo que el modelo pretende describir.

Como en las secciones anteriores esta **Sección 5.4** muestra la validación del método estocástico utilizando los resultados del simulador determinista desarrollado *in house*, que ha sido validado usando datos de laboratorio (Cardona, 2017). Este simulador es el mismo que se ha estado usando a lo largo del estudio.

### **5.4.1 Datos de Transporte de Componentes en Flujo de Multifásico No Isotérmico.**

En esta sección, como en las **Secciones 5.1 y 5.2**, se muestra la equivalencia entre formulaciones tanto determinista como estocástica. Incluso estos resultados se validan con datos experimentales. Para esto se considera un problema 1D, donde los resultados se presentan en el espacio de variables adimensionales, definiendo las coordenadas de posición y tiempo como  $x_D = x/L$  y  $t_D = vt/L$ , respectivamente.

El modelo aumenta en complejidad debido a que se deben considerar hasta tres fases, lo que implica resolver las ecuaciones de difusividad asociadas a cada fase, a saber aceite, gas y agua, representadas por la ecuación (2.2). Además, se considera la ecuación de conservación de energía descrita por la ecuación (2.7). Con estas se obtiene las presiones, las saturaciones de las fases presentes y la temperatura del sistema. Luego, se calculan los coeficientes de difusión mediante la ecuación (3.18). Después, con esta información se evoluciona la posición de las partículas aplicando la ecuación de Langevin, (ecuación (3.17)), sobre cada partícula. Posteriormente, se evoluciona la concentración de las partículas usando el modelo de Curl modificado, ecuación (3.19). Todo en cada fase presente en el medio poroso. Finalmente, se aplica el modelo de coeficientes de partición, dado por la ecuación (2.6) donde las concentraciones en las fases de destino son funciones directas de la concentración de la fase de referencia.

Para realizar el proceso de validación se realiza un proceso de inyección de agua con una calidad dada, que lleva un trazador inerte en un medio poroso, donde están presentes dos fases, agua y aceite. Esto hace que la inyección involucre vapor y con esto se superan los objetivos planteados en el estudio, respecto a la inyección de nanofluidos. El conjunto de características del medio poroso asociado a las propiedades geométricas, operativas, petrofísicas de la roca y físicas del agua se presentan en la **Tabla 5-4**.

**Tabla 5-4.** Propiedades del medio poroso y condiciones de inyección de componentes bajo condición de flujo multifásico.

Variable	Valor	Variable	Valor
$A_x$ ( $cm^2$ )	31.51	$\mu_w$ ( $cp$ )	1.0
$L$ ( $cm$ )	7.62	$B_w$ ( $by/bcn$ )	1.01066
$k_i$ ( $mD$ ) $i \in \{x, y\}$	9080	$C_{inj}$ ( $ppm$ )	2000
$k_z$ ( $mD$ )	4540	$t_{total}$ ( $d$ )	800
$\phi$	0.38	$S_o$	0.3338
$c_t$ ( $l/lpc$ )	0.000004	$S_w$	0.6662
$P_p$ ( $lpc$ )	265	$Pe$	1.0
$T_y$ ( $^{\circ}f$ )	298	$Np$ ( $partículas/celda$ )	10000

Además, la **Tabla 5-5** muestra las propiedades operacionales en el pozo de inyección durante todo el tiempo de simulación. Allí se presenta el tiempo, la temperatura, la tasa, la calidad del agua inyectada (vapor / agua) y la concentración del trazador. Las propiedades de esta tabla son iteradas para cada tiempo de simulación.

**Tabla 5-5.** Condiciones operacionales de inyección para transporte del componente en flujo multifásico no isotérmico.

<b>Tiempo</b> ( <i>min</i> )	<b>Temperatura</b> ( <i>°f</i> )	<b>Caudal</b> ( <i>cm/min</i> )	<b>Calidad</b>	<b>Concentración</b> ( <i>ppm</i> )
224	353.15	0.5	0.1	2000
464	358.15	0.0	0.1	0
800	483.15	1.5	1.0	0

Adicionalmente se hace notar que el simulador se corre bajo un esquema composicional donde la ecuación de estado de Peng - Robinson (Whitson & Brulé, 2000) es usada y la composición del fluido y las propiedades físicas se presentan en la **Tabla 5-6**. Aquí, la composición del fluido es expresada en términos de cuatro componentes conocido como análisis SARA, lo cual hace referencia a Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfáltenos, que normalmente se encuentran en un hidrocarburo (Bueno, 2019). Esta descripción SARA ayuda a disminuir los tiempos de cálculo, asociados con la ecuación de estado de Peng - Robinson.

**Tabla 5-6.** Propiedades físicas y coeficientes de interacción del hidrocarburo presente en el medio poroso (Bueno, 2019).

	<b>Saturado</b>	<b>Aromático</b>	<b>Resina</b>	<b>Asfáltenos</b>
$Z_i$	0.171	0.2638	0.3427	0.2225
$\omega_c$	0.927940	1.017304	1.050025	1.157582
$P_c$ ( <i>lpc</i> )	400.980	383.376	379.319	479.257
$T_{cr}$	934.448	1154.950	1046.025	1184.983
$MW$	268.043	318.043	338.043	398.043
$v_c$	3.921674	3.8154338	3.3248062	2.7745158
$T_{eb}$	1060.156	1166.477	1271.903	1467.207
<b>Coefficientes de interacción</b>				
	Saturado	Aromático	Resina	Asfálteno
Saturado	0.000000000	0.000000000	0.016840886	0.008155626
Aromático	0.000000000	0.000000000	0.028171559	0.008693350
Resina	0.016840886	0.028171559	0.000000000	0.003038934
Asfálteno	0.008155626	0.008693350	0.003038934	0.000000000

Aunado a esto en la **Tabla 5-7** se presentan las tablas de permeabilidad relativa aceite / gas y aceite / agua, utilizada para realizar los cálculos de las movilidades y velocidades de las fases de hidrocarburos presentes en el medio poroso.

**Tabla 5-7.** Permeabilidades relativas para flujo de fluidos trifásico, aceite / gas y aceite / agua (Morales, 2019).

Tabla de aceite gas				Tabla aceite agua			
$S_g$	$k_{rg}$	$k_{ro}$	$P_{cgo}$	$S_w$	$k_{rw}$	$k_{ro}$	$P_{cow}$
0.005	0.000	0.740	0	0.360	0.00000000	0.79070000	0
0.040	0.005	0.650	0	0.379	0.00000002	0.61079700	0
0.120	0.026	0.400	0	0.398	0.00000037	0.46349400	0
0.200	0.058	0.250	0	0.417	0.00000209	0.34459200	0
0.280	0.100	0.150	0	0.456	0.00001834	0.17664500	0
0.360	0.156	0.082	0	0.494	0.00007662	0.07915930	0
0.440	0.222	0.040	0	0.532	0.00022296	0.02896840	0
0.520	0.300	0.012	0	0.571	0.00052313	0.00754070	0
0.560	0.348	0.005	0	0.590	0.00075721	0.00308867	0
0.600	0.400	0.000	0	0.609	0.00106403	0.00097728	0
0.680	0.505	0.000	0	0.628	0.00145793	0.00019304	0
0.760	0.620	0.000	0	0.647	0.00195471	0.00001207	0
0.840	0.740	0.000	0	0.666	0.00257160	0.00000000	0

Para completar el conjunto de datos para simular el transporte de componentes en flujo multifásico no isotérmico, es necesario conocer las propiedades térmicas y las tablas de coeficientes de partición, los cuales se presentan en la **Tabla 5-8**. Dentro de las propiedades térmicas se tienen las conductividades térmicas,  $\lambda$ , de cada una de las fases fluidas y la roca, presentes en el medio poroso, así como el coeficiente de transferencia de calor de las rocas adyacentes al yacimiento  $h_{cr}$ . Además, se presenta la tabla de valores de coeficiente de partición con los cuales se realiza la transferencia entre las fases fluidas.

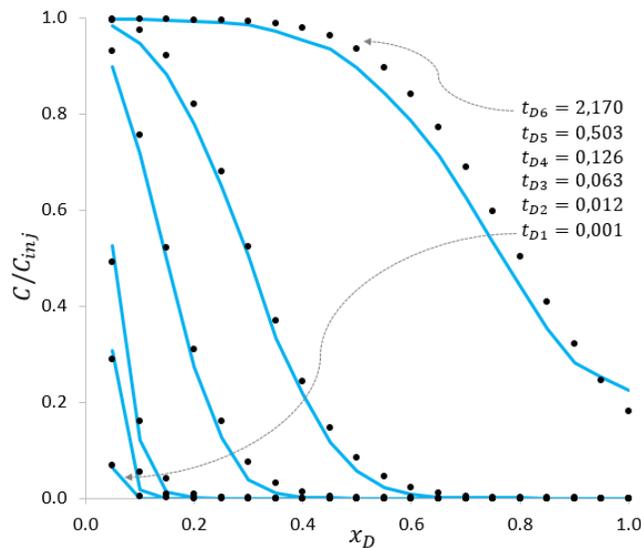
Con las ecuaciones del modelo descritas al inicio de esta sección y la información de la **Tabla 5-4** a la **Tabla 5-8**, se obtienen los resultados de la siguiente sección.

**Tabla 5-8.** Propiedades térmicas de las fases presentes en el medio poroso y sus alrededores y tabla de coeficientes de partición en función de presión y temperatura (Morales, 2019).

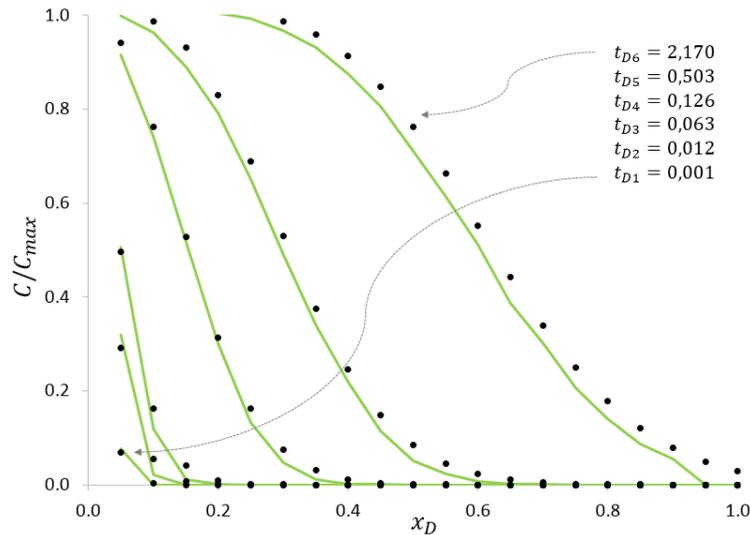
Propiedades térmicas		Modelo de partición		
$\lambda_o(W/m^{\circ}F)$	1.896	$T(^{\circ}f)\backslash P(lpc)$	14.7	5000
$\lambda_g(W/m^{\circ}F)$	0.333	15	33.683	33.683
$\lambda_w(W/m^{\circ}F)$	8.047	1500	33.683	33.683
$\lambda_r(W/m^{\circ}F)$	2053.56			
$h_{cr}(W/m^2^{\circ}F)$	20			

### 5.4.2 Validación de la Concentración del Trazador Inerte Bajo Flujo Multifásico.

Inicialmente, en la **Figura 5-13** los puntos y las líneas continuas representan los perfiles en el agua (**Figura 5-13a**) y en aceite (**Figura 5-13b**) de la concentración del marcador normalizados de los modelos determinista y estocástico, respectivamente. Se hace notar que en ambos casos, se normaliza la concentración con el máximo valor de concentración obtenido en cada fase. Para el agua dicha concentración es la concentración de inyección  $C_{inj}$ .



a. Perfiles de concentración normalizada del trazador en fase agua para diferentes  $t_D$



b. Perfiles de concentración normalizada del trazador en fase aceite para diferentes  $t_D$

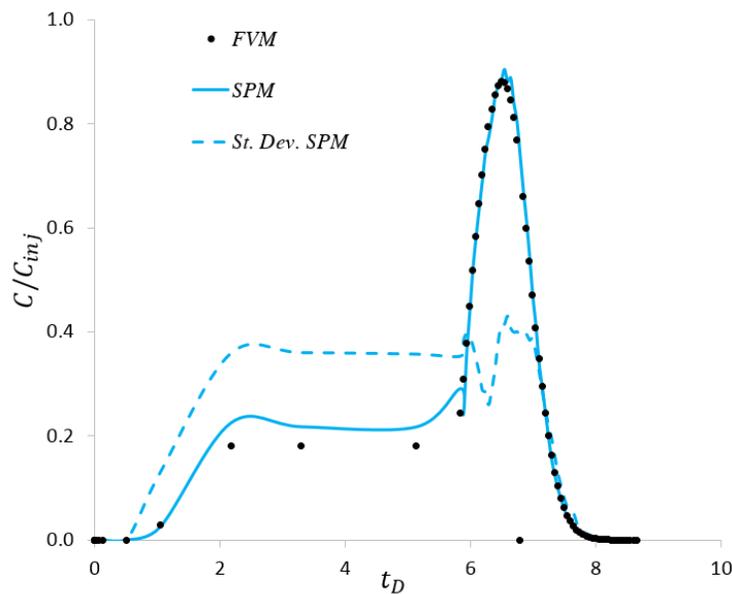
**Figura 5-13.** Perfiles en fase agua a. y aceite b. del promedio de concentración normalizada del trazador como función de la posición adimensional para diferentes tiempos adimensionales para los resultados obtenidos con el FVM (puntos) y SPM (curva continua).

Aquí se obtienen valores máximos de raíz cuadrada media de 0.024 para perfiles de concentración de trazador en el agua y 0.059 para el aceite, los cuales corresponden al mismo valor de  $t_D$  de 2.174 en ambas fases. Estos valores indican un buen ajuste entre los perfiles de posición determinista y estocástico para cada  $t_D$  presentado en la **Figura 5-13**. Al principio, cuando los  $t_D$  son tempranos, menores a 0.126, las concentraciones normalizadas del trazador en las fases agua y aceite, aumenta en la zona cercana al punto de inyección, es decir, para valores pequeños de posición adimensional,  $x_D$ , menores a 0.2. Luego, el trazador avanza cada vez más dentro del medio poroso, en ambas fases, con el incremento del  $t_D$ . Este comportamiento es similar al caso monofásico mostrado en la **Figura 5-1**, cuando se analiza cada fase por separado.

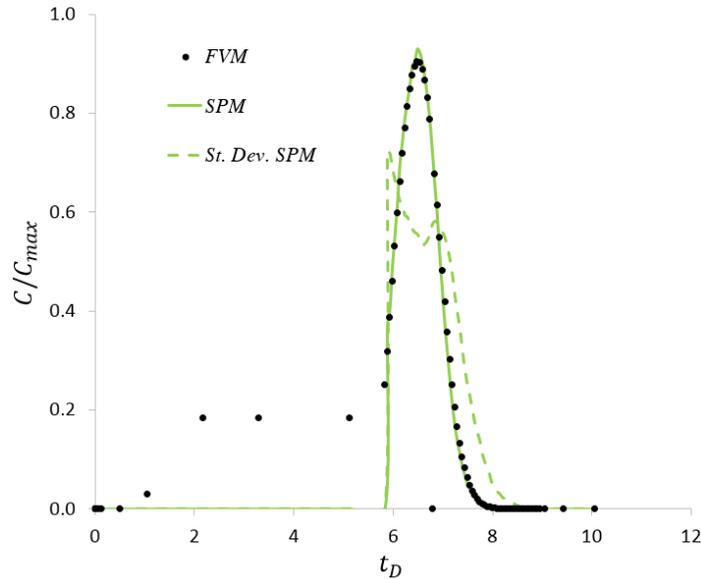
Estas concentraciones normalizadas del trazador en cada fase aumentan hasta valores cercanos a 1.0. Así, si se mantiene la concentración de inyección, se espera que el sistema alcance una concentración de equilibrio, cuando la concentración del trazador  $C$  es igual a  $C_{inj}$ , en la fase agua. En contraste la concentración en la fase aceite será un máximo, que generalmente es diferente a la concentración de inyección, debido a que depende de las

dinámicas y características propias de la fase de destino, (en este estudio la fase aceite), respecto a la cantidad de trazador que puede ser alojado en dicha fase. En particular en esta validación la concentración máxima en la fase aceite fue de 3610 ppm, lo que contrasta con la concentración de inyección ( $C_{inj}$ ) de 2000 ppm, en la fase de referencia o agua.

Continuando con el análisis en el efluente, en la **Figura 5-14** se muestran los resultados de comparación de la evolución de la concentración normalizada del trazador inerte en función del  $t_D$ . Aquí, los asteriscos corresponden a los datos experimentales, los puntos representan la solución determinista obtenida usando el FVM y la curva en línea continua denota la solución estocástica obtenida por SPM. Por otro lado, en la línea punto-semicontinua, la desviación estándar de la concentración normalizada se muestra en esta gráfica.



a. Concentración normalizada del trazador en fase agua en el efluente, para diferentes  $t_D$ .



b. Concentración normalizada del trazador en fase aceite en el efluente para diferentes  $t_D$

**Figura 5-14.** Promedio de concentración normalizada del trazador usando el FVM (puntos), resultados obtenidos con el SPM (curva continua) y desviación estándar (línea con puntos semicontinua) de la evolución en el tiempo en el efluente, para la fase agua a. y fase aceite b.

Al observar el comportamiento de los resultados de ajuste en la **Figura 5-14**, los estudios de validación 1D del transporte de concentración del trazador en el medio poroso bajo condición de flujo multifásico y condiciones no isotérmicas, muestran que el SPM es consistente con el FVM y que los resultados convergen con el comportamiento de los datos experimentales, tanto en la fase agua (**Figura 5-14a.**) como en la fase aceite (**Figura 5-14b.**). Además, muestra la validez del usar el modelo de coeficientes de partición, para describir la disolución del trazador desde una fase de referencia a una fase de destino. Aunado a lo anterior, la desviación estándar presenta un hombro y dos formas de "domos" para ambas fases, que están asociadas a fenómenos de mezcla descritos por el modelo modificado de Curl (Curl, 1963; Meyer, *et al.*, 2010), dado por la ecuación (3.19) y al esquema de inyección.

Los valores de la raíz cuadrática media normalizada de las concentraciones en el efluente, entre las curvas determinista y estocástica es de 0.085, para la fase agua y 0.396 para la fase aceite, lo que sugiere una buena representatividad del modelo, en la descripción del

transporte de trazadores en flujo multifásico y no isotérmico en el medio poroso. A continuación, se analiza el comportamiento de la desviación estándar.

Inicialmente, en la **Figura 5-14a**, la desviación estándar normalizada es nula, debido a que no hay ruptura del fluido inyectado en el sistema. Después de presentarse esta condición, se observa una rampa de pendiente positiva que incrementa el valor de esta variable a 0.40 aproximadamente, a un  $t_D$  de 3.3, donde hay un cambio en la concentración de  $C_{inj}$  a cero (0). Entonces esta condición se mantiene hasta un  $t_D$  cercano a 5.8, donde aparece un primer domo, con valor máximo de 0.38 en  $t_D$  cercano a 6. Nuevamente, esto se debe a un desequilibrio en el proceso debido a cambio en la condición de inyección de  $0.0 \text{ cm}^3/\text{s}$  a  $1.5 \text{ cm}^3/\text{s}$  y de una calidad de 0.1 a 1.0. Luego, la desviación estándar disminuye a un valor de 0.26 e inmediatamente se incrementa hasta 0.41, formándose el segundo domo. Posteriormente, la dispersión tiende a cero, al igual que la concentración. Así, cada uno de los cambios que sufre la dispersión se asocia directamente al cambio de la tasa de inyección y al cambio de concentración de las partículas en el REV del efluente. Este programa de inyección puede verse en la **Tabla 5-5**.

De otro lado, en la **Figura 5-14b**, la desviación estándar normalizada es nula, debido a que el modelo estocástico presenta una condición de concentración cero hasta un  $t_D$  de 5.8. A partir de este tiempo el comportamiento de la desviación en la fase aceite, es similar al comportamiento de esta variable en la fase agua, notándose una dependencia directa entre las dos desviaciones, que también se puede relacionar con el modelo de partición. Así, a partir del valor de  $t_D$  mencionado se presentan dos domos en la curva de dispersión, el primero, asociado a los cambios en la concentración de inyección de  $C_{inj}$  a cero (0), y el segundo por cambio de tasa. Además, se observa que los domos son asimétricos, produciéndose una mayor dispersión en el primer domo, cerca a  $t_D = 6$ , con un valor máximo de 0.72. En contraste cerca a  $t_D$  igual a 6.9, se tiene el valor máximo de 0.58 para el segundo domo. Esto de nuevo se asocia a cambios en la tasa de inyección de agua que pasa de  $0.0 \text{ cm}^3/\text{s}$  a  $1.5 \text{ cm}^3/\text{s}$ . En la próxima sección se describe el comportamiento de las funciones de distribución de masa.

### 5.4.3 Evolución de las Funciones de Distribución de Probabilidad de Concentración del Trazador para flujo Multifásico

En la **Figura 5-15** se muestra el comportamiento de la PDFC para el trazador en la fase agua a. punto inicial o inyección y b. punto medio, además, del trazador en la fase aceite c. punto inicial y d. punto medio del núcleo o sistema poroso.

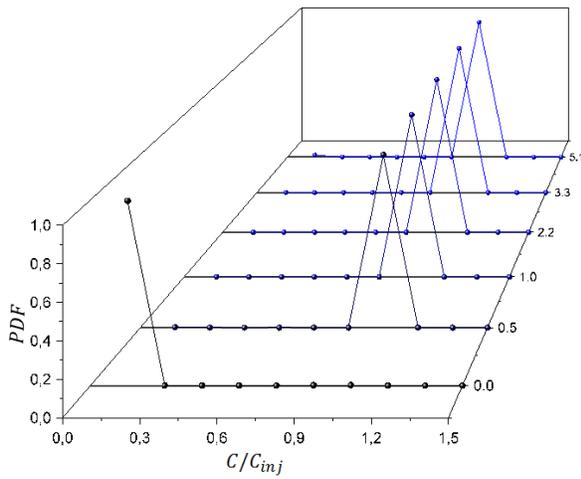
Claramente, para las **Figuras 5-15** a. y b. se observa que las PDFC del trazador en la fase agua, se asemejan a una función delta de Dirac, posicionada en  $0.9 < C/C_{inj} < 1.0$ , para  $0.5 < t_D < 5.1$ . Esto se espera, cuando se inyecta en el sistema el trazador a una concentración constante, es decir, a medida que transcurre el tiempo de inyección, el sistema llega a su concentración máxima que este caso en la concentración a la cual se inyecta el trazador de  $\sim 2000 ppm$ . Sin embargo, para  $t_D = 1 \times 10^{-4}$ , en el punto de inyección (**Figura 5-15** a.), se observa que la PDFC tiende a un valor de 1.0, para  $0.0 < C/C_{inj} < 0.10$ , lo cual se debe a dos fenómenos: el hecho de existir una concentración de trazador baja, (o equivalentemente tener pocas partículas con concentración diferente de cero) y al proceso de mezclado que ocurre entre las partículas con y sin concentración de trazador. Siguiendo con la interpretación, en este tiempo inicial, en el punto medio del sistema, (**Figura 5-15** b.) la PDF es nula lo que implica que ninguna partícula con concentración de trazador ha llegado a esta posición en este tiempo. Lo cual es lógico porque se está empezando el proceso de inyección.

En otro orden de ideas, para las **Figuras 5-15** c. y d. se observa que nuevamente las PDFC del trazador en la fase aceite, se asemejan a una función delta de Dirac, posicionada en  $1.75 < C/C_{inj} < 2.0$ , para  $1.0 < t_D < 5.1$ . Este comportamiento se explica por dos razones: primero, se debe a la transferencia de partículas con concentración (o masa) del trazador desde la fase agua a la fase aceite. (Esta fase recibe la misma cantidad de masa por partícula, pero muestra que las partículas quedan con concentraciones máximas ( $\sim 3900 ppm$ ) de casi el doble de  $C_{inj}$ , ( $2000 ppm$ ), debido a que la masa de una partícula de aceite es menor a la masa de una partícula de agua), segundo, a un coeficiente de transferencia del trazador desde la fase agua a la fase aceite mayor a la unidad, lo cual

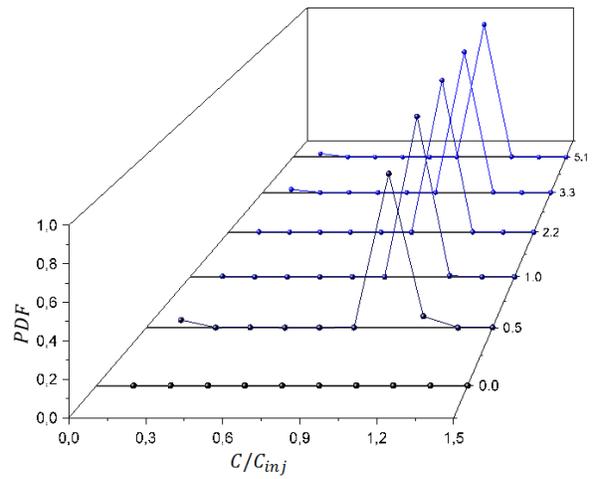
incrementa la cantidad de masa de trazador en la fase aceite, durante el proceso de inyección.

Ahora para valores de  $t_D = 1 \times 10^{-4}$ , en el punto de inicial (**Figura 5-15 c.**), se nota que la PDFC del trazador en la fase aceite, tiende un valor de 1.0, para  $C/C_{inj} < 0.1$ , lo cual se debe a dos fenómenos, de un lado, el hecho de existir una concentración de trazador bajo, (o equivalentemente tener pocas partículas con concentración diferente de cero, en esta fase aceite), del otro, al proceso de mezclado que ocurre entre las partículas con y sin concentración de trazador. Luego, para  $t_D = 0.5$ , se tiene que en intervalo  $1.25 < C/C_{inj} < 2.25$ , los valores de la PDFC son 0.02, 0.03, 0.04, 0.76 y 0.08, para incrementos de 0.25, iniciando en 1.25. Esto muestra una dispersión de la concentración, lo cual se puede explicar por el proceso de mezclado, que está ocurriendo en la fase aceite.

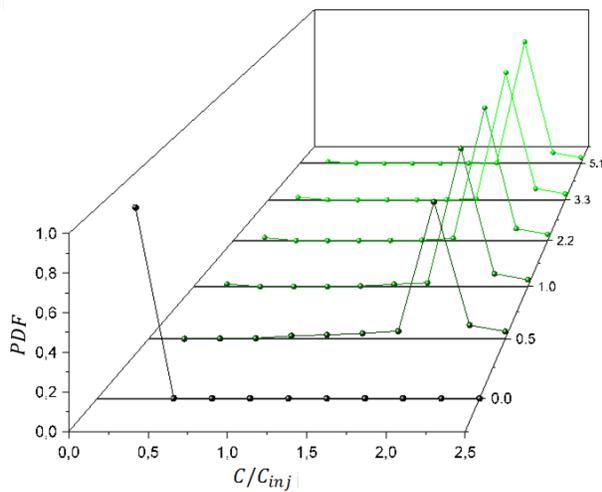
Siguiendo el análisis, para  $t_D = 1 \times 10^{-4}$  en el punto medio del sistema poroso, (**Figura 5-15 d.**) la PDFC de trazador es nula, lo que se esperaba debido a que ninguna partícula con concentración de trazador ha llegado a esta posición en este tiempo. Para  $t_D = 0.5$ , se tiene que en intervalo  $0.50 < C/C_{inj} < 1.50$ , los valores de la PDF son 0.01, 0.03, 0.07, 0.55 y 0.34, para incrementos de 0.25, iniciando en 0.50. La explicación es similar a la expuesta en el párrafo anterior, para este mismo tiempo adimensional. Se nota que los valores de la PDFC de trazador están retrasados, es decir en este punto medio, el intervalo donde la PDF toma valores no nulos, está corrido a la izquierda. Esto se explica debido a que el avance de la concentración del trazador en el medio poroso apenas está llegando a dicho punto en el  $t_D = 0.5$ .



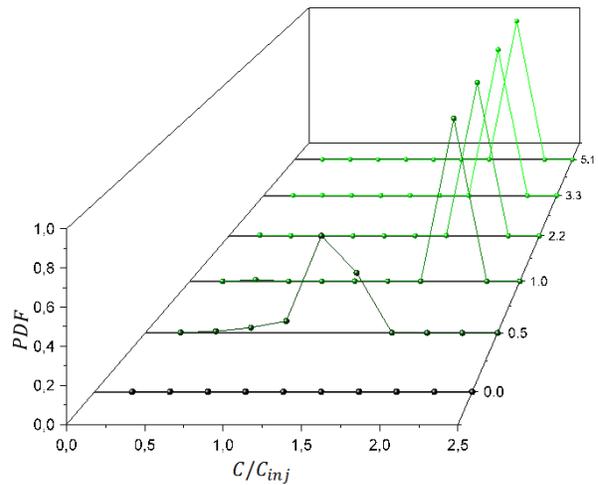
a. PDF punto inyección fase Agua



b. PDF punto medio fase Agua



c. PDF punto inyección fase Aceite



d. PDF punto medio fase Aceite

**Figura 5-15.** Evolución temporal de las funciones de distribución de probabilidad de concentración para el trazador para el punto de inyección o inicial y el punto medio del sistema poroso para la fase agua a. y b. además, para la fase aceite c. y d., correspondientemente.

#### 5.4.4 Validación de la Concentración del Nanopartículas Bajo Flujo Multifásico No Isotérmico.

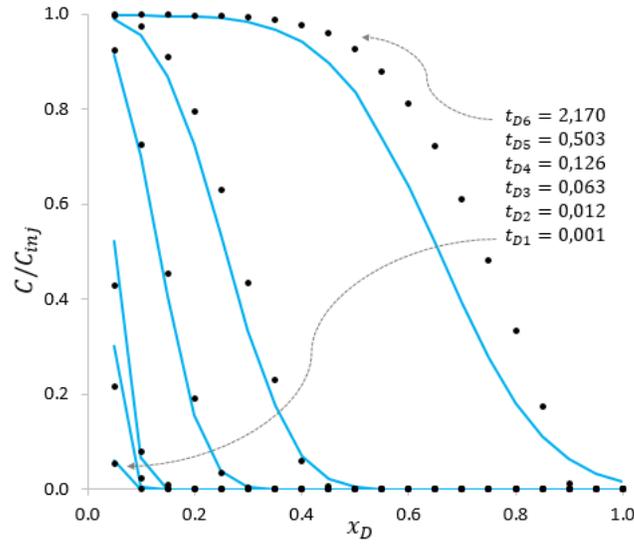
Para obtener los resultados de la evolución espacio - temporal de las nanopartículas en el medio poroso bajo las condiciones de flujo multifásico no isotérmico, es necesario considerar la información, reportada de la **Tabla 5-4** a la **Tabla 5-8**, las

ecuaciones del modelo descritas al inicio de la **Sección 5.4.1**, además de adicionar las ecuaciones del modelo de doble sitio y tener en cuenta los parámetros de este modelo, presentadas en la **Tabla 5-9**. Adicionalmente, el modelo considera que la transferencia de masa se presenta entre la fase agua y la matriz, debido a que es la fase que se encuentra en contacto con la roca, es decir, el medio poroso es humectable al agua.

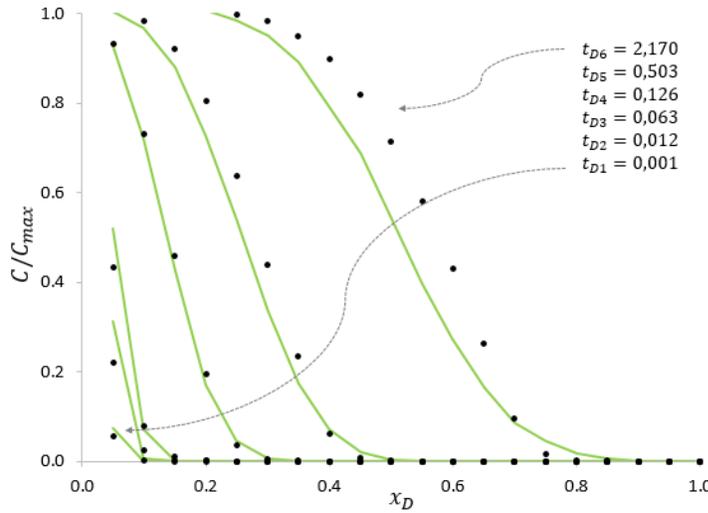
**Tabla 5-9.** Parámetros del modelo de sitio doble, para describir los procesos de retención y movilización de nanopartículas en flujo multifásico no isotérmico.

Variable	Value
$k_{irr}$ (1/s)	$9.40 \times 10^{-3}$
$k_{ra}$ (1/s)	$3.11 \times 10^{-3}$
$k_{rd}$ (1/s)	$2.00 \times 10^{-8}$
$x_{1max}$ (w/w %)	$5.26 \times 10^{-5}$
$x_{2max}$ (w/w %)	$1.45 \times 10^{-5}$

A continuación, se presentan los resultados del transporte de nanopartículas. Similarmente, como se realizó la **Sección 5.4.2** para los trazadores inertes, en la **Figura 5-16** **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** los puntos y las líneas continuas representan los perfiles en el agua a.) y en aceite b.) de la concentración del marcador normalizados de los modelos determinista y estocástico, respectivamente. Se hace notar que ambos casos, se normaliza con la concentración máxima del trazador. Para el agua dicha concentración es  $C_{inj}$ .



b. Perfil de avance de concentración normalizada de nanopartículas en fase agua para diferentes tiempos adimensionales



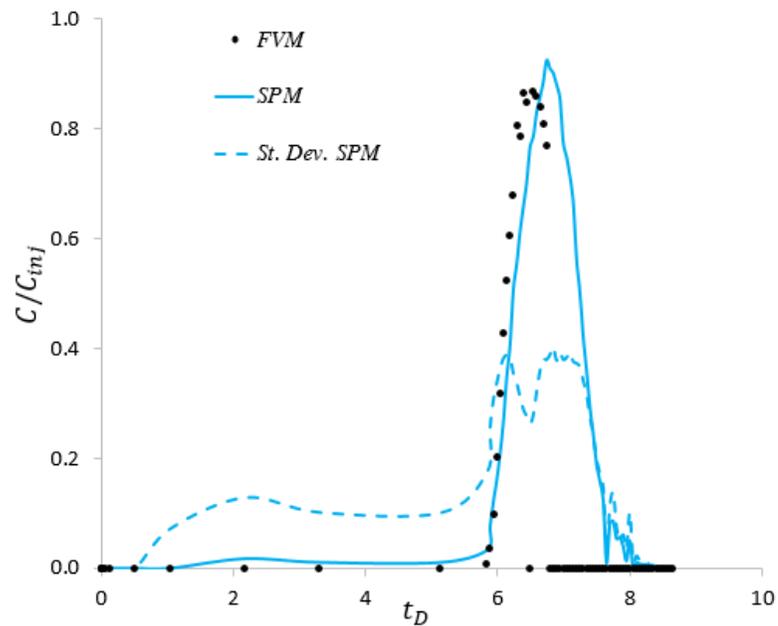
b. Perfil de avance de concentración normalizada de nanopartículas en fase aceite para diferentes tiempos adimensionales

**Figura 5-16.** Perfiles en fase agua a.) y aceite b.) del promedio de concentración normalizada de nanopartículas como función de la posición adimensional para diferentes tiempos adimensionales para los resultados obtenidos con el FVM (puntos) y SPM (curva continua).

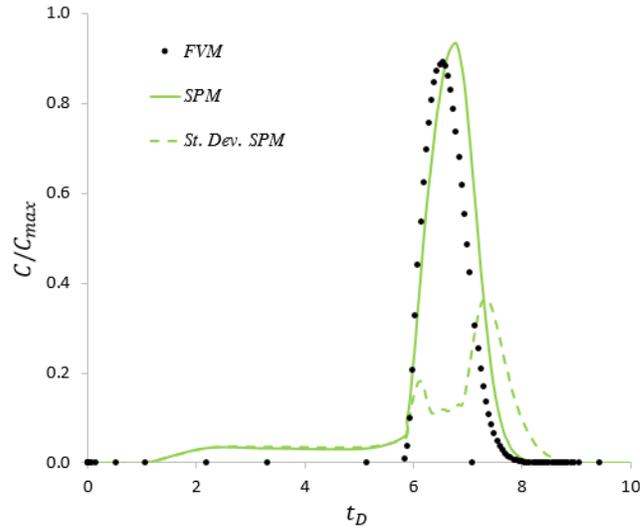
Valores máximos de raíz cuadrada media de 0.011 para ambos perfiles de concentración normalizada de nanopartículas en el agua y en el aceite, correspondientes a un valor de

$t_D$  de 2.174, son obtenidos en el ajuste. Otra vez, estos resultados corroboran la validez del modelo estocástico respecto al determinista para cada uno de los perfiles que se presentan en la **Figura 5-16**. Además, efectos similares a los observados a lo largo del estudio asociados con el avance del frente se pueden usar en el análisis de esta figura.

Ahora en la **Figura 5-17** se presentan la evolución de la concentración normalizada de las NP's en función de  $t_D$ . Esto en el efluente del medio poroso. Aquí, los puntos representan la solución determinista obtenida usando el FVM y la curva en línea continua denota la solución estocástica obtenida por SPM. Por otro lado, la desviación estándar de la concentración normalizada se representa por la línea con puntos semicontinua.



- b. Concentración normalizada de las nanopartículas en fase agua en el efluente, para diferentes tiempos adimensionales.



b. Concentración normalizada de las nanopartículas en fase aceite en el efluente para diferentes tiempos adimensionales

**Figura 5-17.** Promedio de concentración normalizada de nanopartículas usando el FVM (puntos), resultados obtenidos con el SPM (curva continua) y desviación estándar (línea con puntos semicontinua) de la evolución en el tiempo en el efluente, para la fase agua a. y fase aceite b.

Ahora en la **Figura 5-17**, se presentan los estudios de validación 1D del transporte de concentración normalizada de NP's en el medio poroso bajo la condición de flujo multifásico y condiciones no isotérmicas. Aquí se muestra que el SPM es consistente con el FVM, tanto en la fase agua (**Figura 5-17a.**) como en la fase aceite (**Figura 5-17b**). En adición, se muestra la validez del usar el modelo de coeficientes de partición, para describir la disolución de las NP's desde una fase de referencia a una fase de destino, y el modelo de doble sitio, que representa la transferencia de masa entre la fase agua y la roca. Además, la desviación estándar presenta un hombro y dos formas de "domos" para ambas fases y un hombro en su parte inicial para el agua, representada por la curva de línea y punto semicontinua), estos resultados son similares a los obtenidos en la **Sección 5.3.2**, que están asociadas a fenómenos de mezcla descritos por el modelo modificado de Curl (Curl, 1963; Meyer, *et al.*, 2010), en la ecuación (3.19), y las condiciones de inyección en el sistema, presentadas en la **Tabla 5-5**.

Continuando con el análisis, los valores de la raíz cuadrática media normalizada de las concentraciones en el efluente, entre las curvas determinista y estocástica es de 0.306, para la fase agua y 0.344 para la fase aceite, lo que sugiere una representatividad aceptable del modelo, en la descripción del transporte de NP's en flujo multifásico y no isotérmico en el medio poroso. De hecho se presenta un retraso en la concentración de NP's en el efluente a partir de  $t_D$  de 6 y éste se extiende hasta el final donde  $t_D$  es 8.5. A continuación, se analiza el comportamiento de la desviación estándar.

Inicialmente, en la **Figura 5-17a**, la desviación estándar normalizada es nula, debido a que no hay ruptura del fluido inyectado en el sistema. Después de presentarse esta condición, se observa una rampa de pendiente positiva variable que incrementa el valor a 0.15 aproximadamente, a un  $t_D$  de 3.3, donde hay un cambio en la concentración de  $C_{inj}$  a cero (0), en el programa de inyección (ver **Tabla 5-5**). Entonces esta condición se mantiene hasta un  $t_D$  de 5.8, aproximadamente, donde aparece el primer domo, con valor máximo de 0.39 en  $t_D$  6. Como se ha mencionado, esto se debe a un desequilibrio en el proceso causado por un cambio en la condición de inyección de  $0.5 \text{ cm}^3/\text{s}$  a  $1.5 \text{ cm}^3/\text{s}$  y de una calidad de 0.1 a 1.0. Luego, la desviación estándar disminuye a un valor de 0.26 e inmediatamente se incrementa hasta 0.39 formándose el segundo domo. Posteriormente, la dispersión tiende a cero (0), al igual que la concentración. Así, cada uno de los cambios que sufre la dispersión se asocian directamente al cambio de la tasa de inyección y al cambio de concentración en dicha tasa, que puede verse en la **Tabla 5-5**.

De otro lado, en la **Figura 5-17b**, la desviación estándar normalizada es nula, debido a que el modelo estocástico presenta una condición de concentración cero hasta un  $t_D$  de 1.0. A partir de este  $t_D$  el comportamiento de la desviación en la fase aceite, tiene un comportamiento similar a la concentración, hasta un  $t_D$  de 6. Así, a partir del valor de  $t_D$  mencionado se presentan dos domos en la curva de dispersión, primero, asociados a los cambios en la concentración de inyección de  $C_{inj}$  a cero (0), y el segundo por cambio de tasa. Además, se observa que los domos son asimétricos, produciéndose una menor dispersión en el primer domo, cerca a  $t_D$  igual a 6, con un valor máximo de 0.20. En contraste cerca a  $t_D$  igual a 6.9, se tiene el valor máximo de 0.58 para el segundo domo. Esto de nuevo se asocia a cambios en la tasa de inyección de agua que pasa de  $0.5 \text{ cm}^3/\text{s}$  a  $1.5 \text{ cm}^3/\text{s}$ .

### 5.4.5 Evolución de las Funciones de Distribución de Probabilidad Concentración de las Nanopartículas para flujo Multifásico

Similarmente, a como se realiza el procedimiento para el trazador (**Sección 5.4.3**), ahora se muestra información relacionada con la PDFC - NP's. En la **Figura 5-18** se muestra el comportamiento dichas PDF en la fase agua a. punto inicial o inyección y b. punto medio, además, del trazador en la fase aceite c.) punto inicial y d.) punto medio del núcleo.

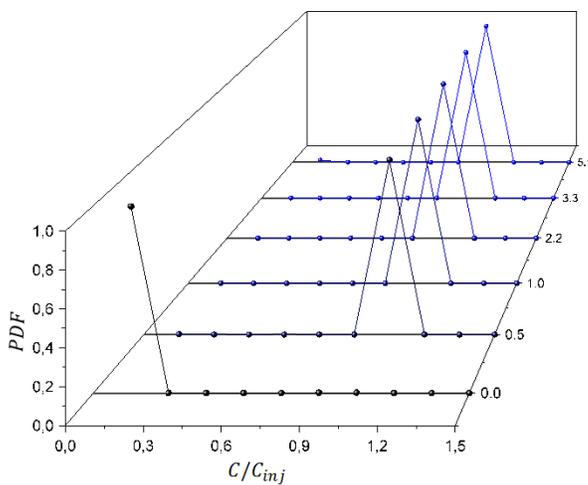
En las **Figuras 5-18** a. y b. se observa que las PDFC - NP's, son similares a una función delta de Dirac, posicionada en  $0.9 < C/C_{inj} < 1.0$ , para  $0.5 < t_D < 5.1$ . Esto se esperaba al inyectar NP's en el núcleo a una concentración constante. Sin embargo, para  $t_D = 1 \times 10^{-4}$ , en el punto de inyección (**Figura 5-18** a.), se nota que la PDF tiende un valor de 1.0, en el intervalo  $0.0 < C/C_{inj} < 0.10$ . Aunado, a esto, para  $t_D = 1 \times 10^{-4}$  en el punto medio del sistema, (**Figura 5-18** b.) la PDFC - NP's es nula lo que implica que ninguna partícula con concentración de NP's ha llegado a esta posición en este tiempo.

Paralelamente, para las **Figuras 5-18** c. y d. se observa que las PDFC - NP's, se asemejan a una función delta de Dirac, posicionada en  $1.75 < C/C_{inj} < 2.0$ , para  $1.0 < t_D < 5.1$ . Este comportamiento se explica por dos razones: primero, se debe a la transferencia de partículas con concentración (o masa) del trazador desde la fase agua a la fase aceite. (Esta fase recibe la misma cantidad de masa por partícula, pero muestra que las partículas quedan con concentraciones máximas ( $\sim 3600$  ppm) menor que para el trazador debido a procesos de retención, segundo, a un coeficiente de transferencia de nanopartículas desde la fase agua a la fase aceite mayor a la unidad, lo cual incrementa la cantidad de masa de NP's en la fase aceite, durante el proceso de inyección.

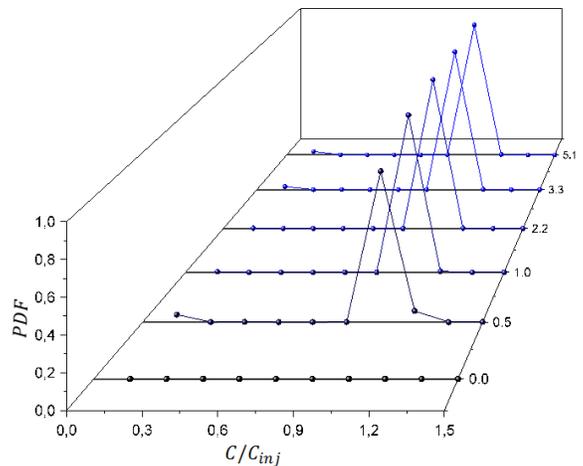
Ahora para valores de  $t_D = 1 \times 10^{-4}$ , en el punto de inicial (**Figuras 5-18** c.), se observa que la PDFC - NP's en la fase aceite tiende a un valor de 1.0, para  $C/C_{inj} < 0.1$ , lo cual se debe a la poca concentración de NP's que ha sido transferida desde la fase agua y por supuesto al tiempo. Luego, para  $t_D = 0.5$ , se tiene que en intervalo  $1.0 < C/C_{inj} < 2.25$ , los valores de la PDF son 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.77, 0.08 y 0.04, para incrementos de 0.25,

iniciando en 1.0. Comparado con el comportamiento de la PDF del trazador esto muestra una mayor dispersión y una menor cantidad de masa o concentración de NP's en la fase aceite, debido a los efectos combinados de la transferencia de masa desde la fase agua y la retención de NP's en la matriz del sistema poroso.

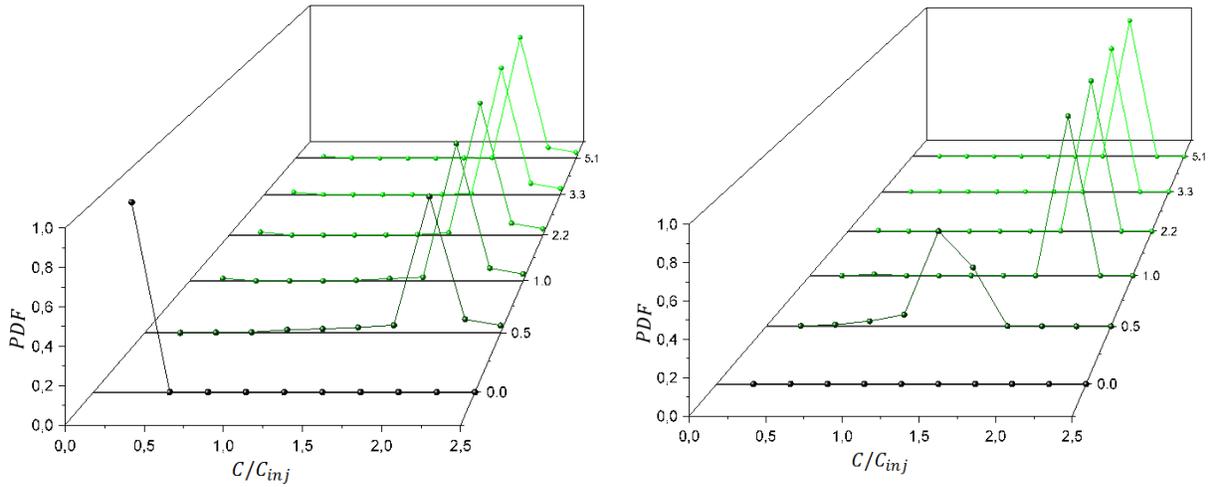
Continuando el análisis, para  $t_D = 1 \times 10^{-4}$  en el punto medio del sistema, (**Figuras 5-18** d.) la PDF es nula, lo que se esperaba debido a que ninguna partícula con concentración de NP's ha llegado a esta posición en este tiempo. Luego, para  $t_D = 0.5$ , se tiene que en intervalo  $0.5 < C/C_{inj} < 1.5$ , los valores de la PDF son 0.01, 0.03, 0.07, 0.55 y 0.34, para incrementos de 0.25, iniciando en 0.5. Comparado con el comportamiento de la PDF del trazador esto muestra un retraso y una menor cantidad de masa o concentración de NP's en la fase aceite, debido a los efectos, mencionados para el sistema en el punto inicial, de transferencia de masa y de retención de NP's en la matriz del sistema poroso. Adicionalmente, se observa gran dispersión de la concentración, lo cual se puede explicar por el proceso de mezclado, que está ocurriendo en la fase aceite.



a. PDF punto inyección fase Agua



b. PDF punto medio fase Agua



c. PDF punto inyección fase Aceite

d. PDF punto medio fase Aceite

**Figura 5-18.** Evolución temporal de las funciones de distribución de probabilidad de concentración para las nanopartículas para el punto de inyección o inicial y el punto medio del sistema poroso para la fase agua a. y b. además, para la fase aceite c. y d., correspondientemente.

### 5.4.6 Resumen y Conclusiones sobre el Transporte de Componentes o Especies en Flujo Multifásico y No Isotérmico.

En las **Secciones 5.4.2 – 5.4.5**, se presentan los resultados concernientes al transporte de dos tipos de componentes, un trazador inerte y nanopartículas, en flujo multifásico no isotérmico en un medio poroso. En primer lugar, se logra describir el transporte de dichos componentes a escala de laboratorio, usando datos reales (Cardona, 2017). Esta descripción se realiza usando los resultados de ajuste del simulador determinista, correspondientes a la evolución espacial y temporal de concentración en el yacimiento y el efluente, respectivamente.

En general, en las curvas de evolución temporal de la concentración normalizada en el efluente, (**Figura 5-14** y **Figura 5-17**), se observó que las desviaciones estándar en cualquiera de las fases que fluyen en el medio poroso bajo condiciones no isotérmicas, siguen dependiendo de los cambios en las condiciones operativas del problema, (en el

caso de estudio de las condiciones reportadas en la **Tabla 5-5**). Esto quiere decir que cambian con variaciones de concentración, tasa y calidad de vapor inyectado.

De otro lado en las **Figura 5-15** y **Figuras 5-18**, se observa que la PDF de concentración en cualquier fase y para cualquier componente o escalar (trazador o nanopartículas), muestran una forma de función delta de Dirac, para  $t_D \geq 1.0$  o para  $t_D \rightarrow 0.0$ . Para valores de  $0 < t_D < 1.0$ , se observa dispersión de la PDF alrededor de  $0.9 < C/C_{inj} < 1.0$ , para la fase agua y  $1.75 < C/C_{inj} < 2.0$  para la fase aceite. Este comportamiento lo explican los fenómenos considerados en la descripción de este proceso, transporte, inyección y dilución. Además, en el caso de nanopartículas, el proceso de retención y movilización.

## 5.5 Transporte de Componentes en Flujo Multifásico no Isotérmico Multidimensional.

A lo largo del **Capítulo 5**, se ha validado el modelo bajo diferentes escenarios y escalas. Sin embargo, siempre se han considerado casos unidimensionales. Esta parte del estudio se dedica a problemas multidimensionales. Inicialmente, se considera un caso de dos dimensiones

### 5.5.1 Datos de Transporte de Componentes en Flujo de Multifásico No Isotérmico en Dos Dimensiones.

A partir de los datos usados en la sección anterior se plantea un caso arbitrario en dos dimensiones. Así, las variaciones principales de éste se concentran en: el cambio las longitudes en las direcciones  $x$  y  $y$ , el incremento de la tasa de inyección. Los cambios a considerar se presentan en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** y **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** . Además, el modelo sigue considerando las ecuaciones de difusividad asociadas a cada fase, a saber aceite, gas y agua, representadas por la ecuación (2.2), la ecuación de conservación de energía descrita por la ecuación ( 2.7). La ecuación de Langevin, (ecuación (3.17)), sobre cada partícula, el modelo de Curl modificado, ecuación (3.19), con el fin de calcular: presiones y saturaciones de las fases además de concentraciones del componente que se transporta

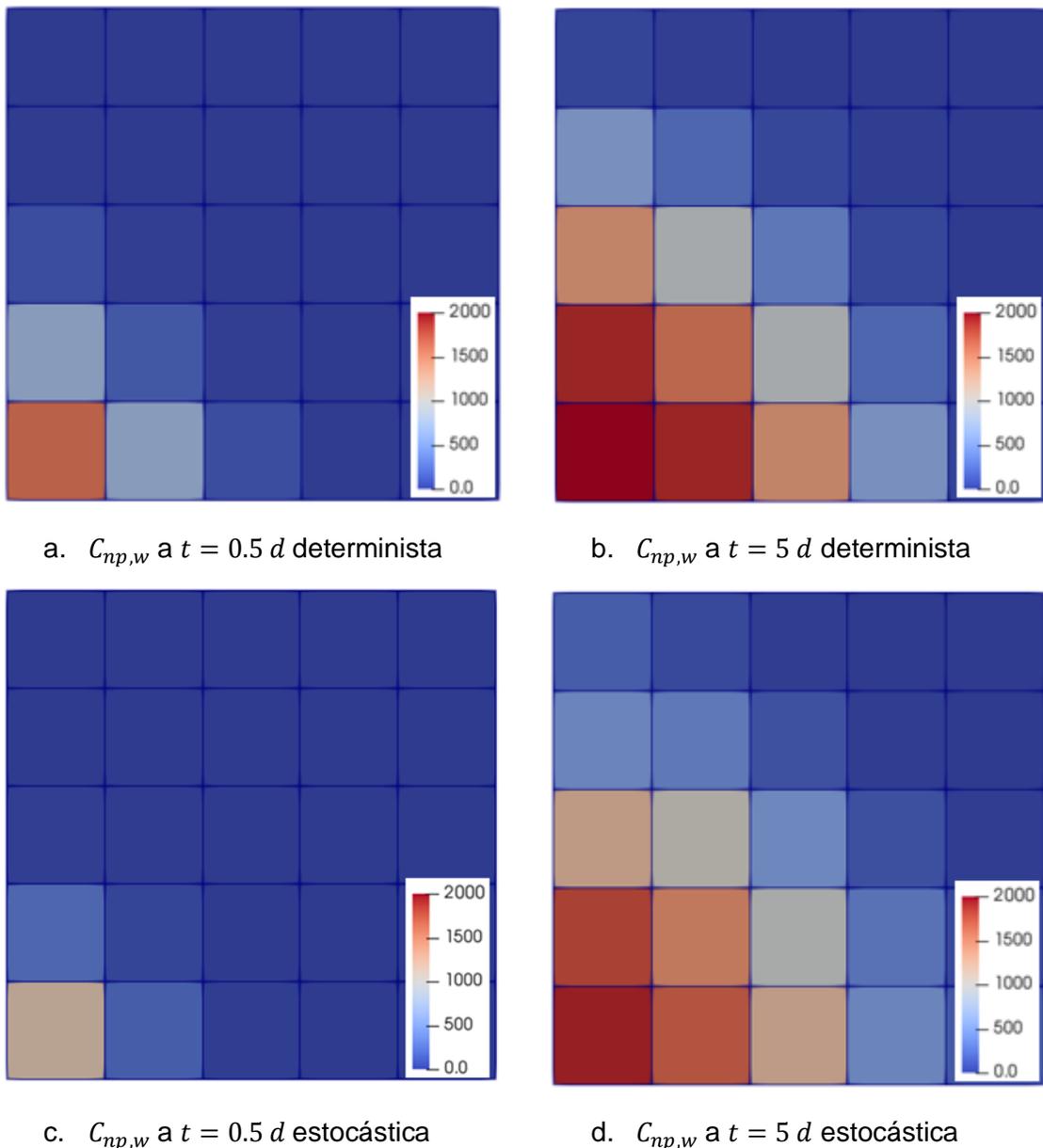
en las fases. Nuevamente, el simulador se corre bajo un esquema composicional. Esto quiere decir que se sigue el mismo procedimiento de la sección anterior y se consideran los datos de la **Tabla 5-4** a la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**, excepto que incrementa la dimensionalidad en la coordenada  $y$ .

### **5.5.2 Resultados del Transporte de la Concentración del Nanopartículas Bajo Flujo Multifásico No Isotérmico Multidimensional.**

Para obtener los resultados de la evolución espacio - temporal de las nanopartículas se consideran las condiciones expuestas en la **Sección 5.5.1** y parte de los datos presentados en la **Sección 5.4.1**. Nuevamente, el modelo considera que la transferencia de masa se presenta entre la fase agua y la matriz, debido a que el medio poroso es humectable al agua.

Con lo anterior en mente, se muestran los siguientes resultados. La **Figura 5-19 ¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** está compuesta de cuatro gráficos de a. – d. y presenta una vista en planta de la evolución de concentración de nanopartículas deterministas y estocásticas, en la fase agua, para tiempos de 0.5 y 5 *min* de iniciado el proceso de inyección, en una malla de simulación de  $5 \times 5$ , en variables adimensionales  $x_D$  y  $y_D$ .

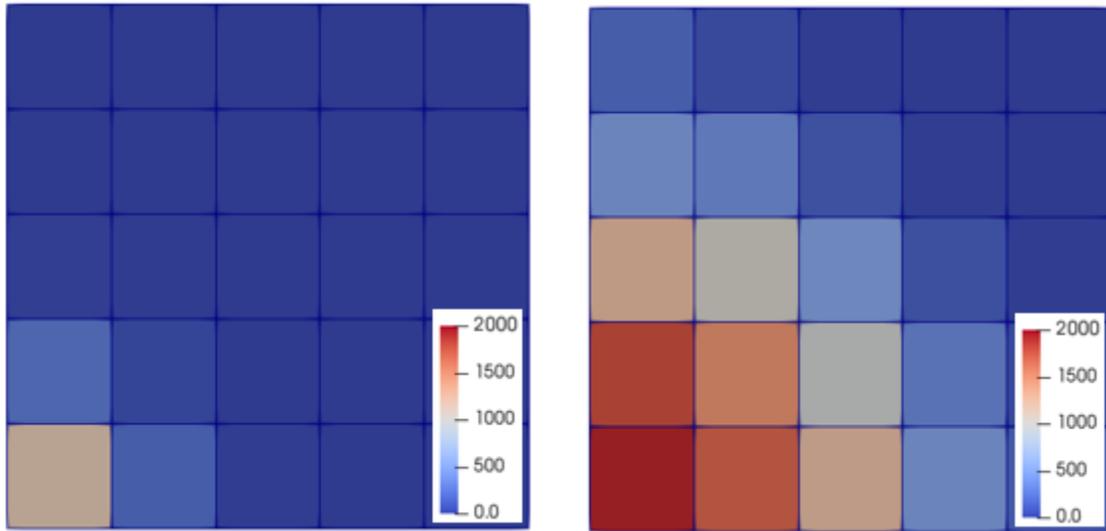
En la **Figura 5-19** se observa que hay un comportamiento similar entre el caso determinista y estocástico, respecto a la evolución de la superficie de concentración en ambos tiempos presentados. En la parte inferior izquierda de cada una de las gráficas que componen esta **Figura 5-19**, se identifican los valores más altos de concentración debido a que en dicha posición se encuentra el pozo inyector. En contraste, en la parte superior derecha de las gráficas mencionadas, la concentración de nanopartículas es mínima.



**Figura 5-19.** Superficies de concentración de nanopartículas en la fase agua para tiempos de 0.5 y 5  $d$ , determinista a. y b. y estocástica c. y d.

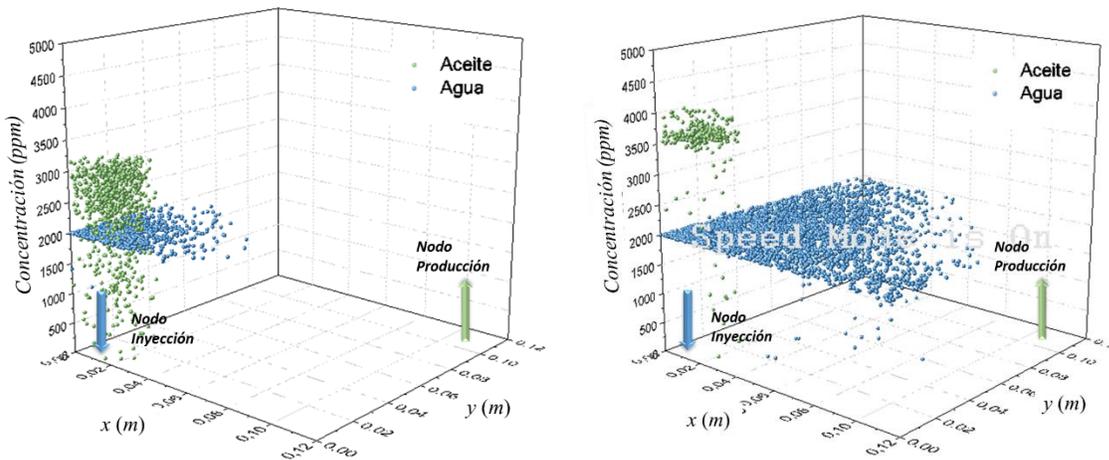
De otro lado, en la **Figura 5-20** se presenta información adicional sobre el sistema que se puede obtener al contar con una descripción estocástica y Lagrangiana. En primer lugar en la **Figura 5-20** a. y b. se tiene la evolución de la desviación estándar de la concentración de la especie o componente, en este caso nanopartículas, para tiempos de 0.5 y 5  $d$ , donde se observa altos valores de esta variable en el punto de inyección, justo en la esquina inferior izquierda, lo cual es congruente con el comportamiento de la concentración de

nanopartículas visualizado en la **Figura 5-19**. En segundo lugar, en la **Figura 5-20** c. y d. se presenta la posición de las partículas para cada fase en cada tiempo.



a.  $St. dev. C_{np,w}$   $t = 0.5 d$  estocástica

b.  $St. dev. C_{np,w}$  a  $t = 5 d$  estocástica



c. Avance partículas en  $t = 0.5 d$

d. Avance partículas en  $t = 5 d$

**Figura 5-20.** Superficies de concentración de nanopartículas en la fase agua para tiempos de 0.5 y 5  $d$ , determinista a. y b., estocástica c. y d., y la desviación estándar de dicha concentración.

En la **Figura 5-20** a. y b. se observa un comportamiento análogo a la desviación estándar respecto a la distribución superficial del promedio de la concentración de nanopartículas. Además, es claro que en el pozo inyector, localizado en el nodo de la esquina inferior

izquierda se tiene un mayor valor de la desviación estándar, es decir, en este sector se tiene la mayor dispersión de la concentración en el sistema. Adicionalmente, en la **Figura 5-20** c. y d., muestra la posición y la concentración de nanopartículas de las gotas o partículas en la fase agua (azules) y en la fase aceite (verdes). Allí se nota que las nanopartículas en agua alcanzan valores máximos de  $\sim 2000$  ppm, en la zona cercana al nodo de inyección. En contraste, debido a que el coeficiente de partición es mayor a la unidad entre la fase aceite y la fase agua y además considerando que la masa de las partículas de aceite es menor a las partículas de fase agua, las concentraciones de las partículas en la fase aceite son mayores a 2000 ppm. Esto sucede en la zona cercana a la inyección.

De otro lado se observa el avance del frente de inyección, el cual se propaga hacia el pozo productor, (que se encuentra en el extremo opuesto de una diagonal imaginaria entre los dos pozos). Esto genera un frente de concentración que se asemeja a una porción circular y corresponde a la descripción sin malla de la **Figura 5-19**. Así, se hace notar que se necesita parcialmente la malla de simulación y esto permite identificar donde está localizado el frente de concentración con mayor precisión que el caso representado por la malla. Además, se observa un fuerte gradiente de concentración justo en el borde donde está posicionado el frente de concentración el cual es difícil de visualizar en los métodos que utilizan solo mallas.



## 6. Conclusiones y Recomendaciones.

Finalmente, a partir de los objetivos propuestos, el modelo físico y matemático planteado y de los resultados obtenidos se pueden obtener las siguientes conclusiones y recomendaciones.

### 6.1 Conclusiones

Inicialmente, se logra desarrollar un modelo fenomenológico capaz de representar el transporte de componentes o especies (trazadores inertes y nanopartículas) en flujo multifásico considerando efectos no isotérmicos. Este modelo es híbrido debido a que describe los campos de presión, saturaciones y temperatura de forma determinista a través de una formulación Euleriana, basado en la mecánica del medio continuo o la teoría de mezclas y usando las leyes de conservación de la masa, el momento y la energía. De otro lado, el carácter híbrido surge al realizar una descripción Lagrangiana, probabilista de la ecuación de transporte de componentes o especies, la cual se expresa equivalentemente a través de un número de ecuaciones de Langevin, asociadas cada una a una partícula. Estas partículas son generadas al transformar el volumen elemental representativo, lo cual equivale a considerar una formulación Lagrangiana. Además, el carácter probabilístico se obtiene al considerar un término adicional en cada ecuación de Langevin, relacionado con un ruido blanco, proceso Wiener o movimiento Browniano que se le asocia a cada partícula y que depende de la dispersión molecular.

A partir de la formulación física y matemática descrita en el párrafo anterior, se propuso el modelo numérico y computacional con el fin de resolver el sistema de ecuaciones mencionado. Para esto las ecuaciones deterministas fueron discretizadas usando el método de volúmenes finitos y solucionadas bajo un esquema IMPISIT, donde la presión, saturaciones y temperatura son solucionadas implícitamente, usando el método de Newton-Raphson, desarrollado en el grupo de Dinámica de Flujo y Transporte en Medios

Porosos de la Universidad Nacional de Colombia – sede Medellín. Ahora, para resolver la parte estocástica del modelo, se propuso una discretización de las ecuaciones de Langevin, usando el método Runge-Kutta de segundo orden y se utilizó el cálculo de Ito para resolver la integral asociada a la parte estocástica. Luego para disminuir el tiempo de simulación y garantizar una simulación más eficiente, que permitiera resolver las concentraciones de los componentes (trazador y nanopartículas), se tomó un esquema explícito para concentraciones.

Dentro de los resultados obtenidos se logra validar la concentración estocástica del trazador inerte y de las nanopartículas usando datos reales reportados por Li y Torsaeter, en el efluente del sistema, el cual era un flujo monofásico en un núcleo, (es decir, a escala de laboratorio). Esto cuantitativamente se respalda por valores de la raíz cuadrática media de los resultados estocásticos y deterministas, respecto a los datos experimentales es máximo de 0.062 y 0.064, respectivamente.

Respecto a las sensibilidades de la concentración de inyección y de los parámetros del modelo de doble sitio, cuando se modela el transporte de nanopartículas, se observa que la tasa y la concentración máxima en el sitio 2,  $S_{2,max}$ , son los parámetros más relevantes en el proceso de retención y movilización del componente en el sistema. Si la concentración de inyección es alta o si la  $S_{2,max}$  es baja, es posible que se llenen rápidamente los sitios 1 y 2, lo cual causa que el componente se comporte como un trazador inerte.

Adicionalmente, se pudo escalar el procedimiento a través de un método inductivo y la conservación del momento lineal. Esto permitió pasar de la escala de laboratorio a la escala de yacimiento, sin afectar los resultados, obtenidos en el caso base, a nivel de la escala de núcleo.

Posteriormente, se valida el transporte de componentes o especies (trazador o nanopartículas) en medios porosos con flujo de fluidos multifásico y bajo condiciones no isotérmicas a través de datos de laboratorio y a escala de yacimiento. Allí se observó que los resultados obtenidos por ambos procedimientos (determinista y estocástico), son similares.

En cada caso validado en el estudio tanto para trazador inerte como para nanopartículas, información adicional es obtenida. Específicamente, se obtuvo el comportamiento de la desviación estándar. En general, cada que hay cambio de concentración en el sistema hay un incremento de los valores de esta variable a un valor que es una fracción de la concentración máxima en el medio poroso. Adicionalmente, esta variable genera información asociada con procesos que llegan al equilibrio en el sistema, como mezclado y transferencia de masa entre fases fluidas y fase sólida. Aunado a lo anterior el comportamiento de esta variable permite identificar tiempos en los cuales el sistema se encuentra en equilibrio estático o dinámico, al igual que tiempos en los cuales esto no ocurre.

Se logra desarrollar una herramienta computacional con base fenomenológica, la cual considera un método de solución híbrido determinista/probabilista, la cual permite la descripción del transporte de componentes o especies en flujo de fluidos multifásico no isotérmico en medios porosos, sometidos a operaciones de inyección y producción. En particular, inyección de nanopartículas en agua caliente. Esto se obtiene tanto a escala de laboratorio como a nivel de la escala de yacimiento.

## 6.2 Recomendaciones

En general se pueden realizar desarrollos no lineales del problema de transporte y flujo multifásico bajo condiciones no isotérmicas en un medio poroso. Por ejemplo, las propiedades del sistema como, petrofísicas, mecánicas, térmicas, cinéticas, pueden depender en general de los campos que actúen sobre este medio poroso, a saber, campo de presiones, temperatura, concentraciones, gravitacional y demás.

Adicionalmente, la formulación se puede extender a múltiples dominios y otras geometrías. Esto implica que se puedan considerar yacimientos naturalmente fracturados con uno o varios sistemas de fracturas naturales o con sistemas vugulares (como calizas) que generen múltiples porosidades y permeabilidades. Ahora desde el punto de vista, geométrico se puede extender el modelo a descripciones fractales del medio poroso o se

pueden generar modelos multiescala, que logren capturar la fenomenología más relevante a nivel de la escala que representen.

Extender el transporte a otras especies como surfactantes, polímeros etc, considerando los efectos que estos componentes puedan generar en el medio poroso como cambios en la humectabilidad de la roca, cambios en la viscosidad y la permeabilidad, lo cual se refleja en la movilidad de las fases fluyentes en el medio poroso. Además, considerar sus cinéticas tanto de adsorción en la roca como de dilución en otras fases fluidas.

Incluir otros mecanismos de transporte asociados al flujo de nanopartículas en el medio poroso, como degradación mecánica, química, térmica, aglomeración, deformación física, sitios de bloqueo, proceso de maduración y exclusión por tamaño (Babakhani, Bridge, Doong, & Phenrat, 2017). Incluso identificando el comportamiento de la nanopartícula en el medio poroso, el cual puede categorizarse en tres grupos: modelos resumidos, (los cuales analizan el flujo de materia o son modelos de múltiples dominios, representados por ecuaciones algebraicas y no capturan toda la fenomenología asociada), mecanísticos (que se enfocan en las partículas considerando fuerzas, torques y energía de partícula y su interacción con el medio) y modelos a escala continua, (basados en principios de continuidad como conservación de la masa o partículas en un volumen y en un tiempo dado, usando ecuaciones diferenciales parciales).

Considerar otros tipos de regímenes de flujo asociados a difusión molecular, difusión Knudsen (Tartakovsky & Dentz, 2019), efecto Klimklemberg y de transición asociados con la escala y el tamaño de poro donde se presenta el flujo. Igualmente considerar de regímenes de flujo no Darcy, donde se tengan en cuenta flujo no Darcy o el flujo de un fluido no Newtoniano como tipo Bingham y ley de potencia.

Realizar un tratamiento más específico del coeficiente de dispersión. Esto implica considerar la fenomenología asociada al medio poroso y a la especie o componente que se difunde (Coutelieris & Delgado, 2012). Esto conduce a tener en cuenta coeficientes de difusión longitudinal y transversal, propiedades petrofísicas del medio poroso como la tortuosidad, diámetro de poro y gargantas de poro, así como el camino medio recorrido por las moléculas que se difundan. Por tanto, a partir del número de Knudsen se puede

identificar el régimen de flujo presente en el medio poroso y así los tipos de difusión presentes en el medio.



# A. Anexo: Deducciones de Coeficientes de la Ecuación de Fokker – Planck.

En esta sección se toma la ecuación de Fokker – Planck, la cual representa la evolución de la función de densidad de probabilidad, *PDF*.

## A.1 Coeficientes de la Ecuación de Fokker – Planck

Específicamente, se hace necesario resolver el coeficiente de evolución en el espacio de masa de las partículas del componente  $\alpha$  en la Fase  $l$ . Este esta descrito de manera general en la ecuación (3.29) y su forma es

$$q_{\alpha j} = \frac{1}{M_{\alpha j}(t)} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle \{M_{\alpha j}(t + \Delta t) - M_{\alpha j}(t)\} | \alpha, j, \bar{y}, \mathbf{x} \rangle \quad (3.29)$$

Para realizar una evaluación adecuada de este término se consideran los siguientes fenómenos que causan o actúan como fuentes o sumideros en el sistema.

### A.1.1 Evolución en el Espacio de la Concentración de las Partículas $\alpha$ en la Fase $l$

La concentración de las partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ , puede ser modificada por el intercambio de masa de este tipo de partículas que pasan de las fases fluidas y de la matriz; mediante procesos de transferencia de masa entre fases líquidas (como disolución) o debido al intercambio de masa con otras partículas del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ , por (mezclado molecular) (Tyagi, 2010). Así, por procesos de absorción (retención) o desorción de partículas hacia o desde la matriz (T. Zhang, 2012).

- **Proceso de disolución interfacial del componente  $\alpha$ .**

El proceso de disolución o intercambio de concentración interfacial del componente  $\alpha$  entre fases  $l'$  y  $l$  es modelado por el modelo de partición, donde la transferencia de masa a las fases de destino  $l'$  es proporcional a la masa que se encuentra en la masa de referencia  $l$ . La forma de este modelo es .

$$\frac{\partial y_{\alpha l l'}}{\partial t} = r_{\alpha d}^{l l'} = -\frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial y_{\alpha l}}{\partial t} \quad (6.1)$$

Donde  $\varepsilon_{\alpha l l'}$  es el coeficiente de partición de disolución del componente  $\alpha$  entre las fases  $l'$  y  $l$ . Además,  $y_{\alpha l'}$  es la concentración del componente  $\alpha$  en la fase de destino  $l'$  y  $y_{\alpha l}$  es la concentración del componente  $\alpha$  en la fase  $l$ .

- **Proceso de retención y movilización del componente  $\alpha$ .**

Finalmente, la tasa de transferencia de masa debida a los procesos de retención y movilización  $r_{\alpha, ab-d}$  del componente  $\alpha$ , pueden describirse como un balance entre la capacidad de retención y movilización desorción del sistema como (Zhang, 2012)

$$\begin{aligned} \dot{x}_{T \alpha r} = r_{\alpha, ab-d} = & -\frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr, \alpha l r} \left(1 - \frac{x_{1 \alpha r}}{x_{1 \alpha r, max}}\right) y_{\alpha l} \\ & -\frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra, \alpha l r} \left(1 - \frac{x_{2 \alpha r}}{x_{2 \alpha r, max}}\right) y_{\alpha l} + k_{rd, \alpha l r} x_{2 \alpha r} \end{aligned} \quad (6.2)$$

donde  $x_{1 \alpha r, max}$  y  $x_{2 \alpha r, max}$  es la capacidad de adsorción sobre la superficie del sustrato o matriz o sólido [ $M/L^2$ ],  $k_{irr, \alpha l r}$  y  $k_{ra, \alpha l r}$  son coeficientes de tasa de retención reversible e irreversible [ $1/\theta$ ], y  $k_{rd, \alpha l r}$  es el coeficiente de tasa de movilización [ $1/\theta$ ]. Ahora la evolución del componente  $\alpha$  en la fase  $l$  puede obtenerse combinando las ecuaciones (6.1) a (6.2).

$$\frac{dM_{\alpha l}(t)}{dt} = \underbrace{-\sum_{l' \neq l} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t}}_{\text{Transferencia a fase}} - \underbrace{\frac{M_r \phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr, \alpha l r} \left(1 - \frac{x_{1 \alpha r}}{x_{1 \alpha r, max}}\right) y_{\alpha l}}_{\text{Tasa de retención irreversible}} \quad (6.3)$$

$$-\frac{M_r \phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra,alr} \left(1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r, \max}}\right) y_{\alpha l} + \frac{M_r k_{rd,alr} x_{2\alpha r}}{\text{Tasa de movilización}}$$

*Tasa de retención reversible*

De otro lado, por definición  $M_{\alpha l} = M_l y_{\alpha l} / \rho_l$  se tiene

$$\frac{dM_{\alpha l}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{M_l y_{\alpha l}}{\rho_l} \right) \quad (6.4)$$

de lo cual

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{M_l y_{\alpha l}}{\rho_l} \right) = \frac{M_l}{\rho_l} \frac{dy_{\alpha l}}{dt} + \frac{y_{\alpha l}}{\rho_l} \frac{dM_l}{dt} - \frac{M_l y_{\alpha l}}{\rho_l^2} \frac{d\rho_l}{dt} \quad (6.5)$$

En este punto se considerará que la masa y la densidad de la fase  $l$  no varía, debido a variaciones en la concentración del componente  $\alpha$ , es pequeña o despreciable. Esto implica que la contribución de la tasa de cambio de dicha masa en un intervalo de tiempo,  $\Delta t$  es muy pequeña en comparación a la masa de la fase mencionada. Por tanto, el segundo término en la ecuación (6.5) se anula, así usando  $M_{\alpha l} = M_l y_{\alpha l} / \rho_l$  se tiene

$$\frac{1}{M_{\alpha l}} \frac{dM_{\alpha l}}{dt} = \frac{1}{y_{\alpha l}} \frac{dy_{\alpha l}}{dt} \quad (6.6)$$

para el componente  $\alpha$  en la fase  $l$ . Luego sustituyendo la ecuación (6.6) dentro de la ecuación (6.3) se obtiene la ecuación de evolución de la concentración para este componente

$$\begin{aligned} \frac{dy_{\alpha l}}{dt} = & - \sum_{l' \neq l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr,alr} \left(1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r, \max}}\right) y_{\alpha l} \\ & - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra,alr} \left(1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r, \max}}\right) y_{\alpha l} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd,alr} x_{2\alpha r} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Luego, retomando  $D^{y_{\alpha l}}$  se puede obtener la forma explícita de la ecuación (6.7) como

$$\begin{aligned}
D^{y_{\alpha l}} = & - \sum_{l' \neq l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} \\
& - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} \frac{\phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd, \alpha l r} x_{2\alpha r}
\end{aligned} \tag{6.8}$$

▪ **Evolución en el espacio de la masa de las partículas  $\alpha$  en la fase I**

Ahora considerando que la masa ganada por el componente  $\alpha$  de la fase  $l$  debe ser igual a la masa perdida en el componente  $\alpha$  de las demás fases  $l'$ , entonces se puede decir que

$$\left\langle \delta_{A\alpha} \delta_{Ll} \frac{dM_{\alpha l}(t)}{dt} \right\rangle = - \sum_{l' \neq l} \left\langle \delta_{A\alpha} \delta_{Ll'} \frac{dM_{\alpha l'}(t)}{dt} \right\rangle \tag{6.9}$$

además, debe mantenerse o conservarse. Ahora, considerando que en cualquier tiempo específico, la pérdida de masa del ensamble de todas las partículas  $\alpha$  en la fase  $l$ , es proporcional a la tasa de cambio de su propia masa, entonces

$$\frac{dM_{\alpha l}(t)}{dt} = - \frac{M_{\alpha l}}{\langle M_{\alpha l}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Ll} \rangle} \sum_{l' \neq l} \left\langle \delta_{A\alpha} \delta_{Ll'} \frac{dM_{\alpha l'}(t)}{dt} \right\rangle \tag{6.10}$$

y utilizando la ecuación (6.10) en la (6.3) se tiene que la variación en su masa es

$$\begin{aligned}
\frac{dM_{\alpha l}(t)}{dt} = & \frac{M_{\alpha l} \langle M_{\alpha r}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Lr} \rangle}{\langle M_{\alpha l}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Ll} \rangle} \frac{M_r \phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r} | A = \alpha, L = r}{x_{1\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \\
& + \frac{M_{\alpha l} \langle M_{\alpha r}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Lr} \rangle}{\langle M_{\alpha l}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Ll} \rangle} \frac{M_r \phi S_l}{(1-\phi)\rho_r} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r} | A = \alpha, L = r}{x_{2\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = l} \\
& - \frac{M_{\alpha l} \langle M_{\alpha r}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Lr} \rangle}{\langle M_{\alpha l}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Ll} \rangle} M_r k_{rd, \alpha l r} x_{2r} \overline{y_{\alpha l} | A = \alpha, L = r} \\
& + \frac{M_{\alpha l}}{\langle M_{\alpha l}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Ll} \rangle} \sum_{l' \neq l} \langle M_{\alpha l'}(t) \delta_{A\alpha} \delta_{Ll'} \rangle \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \left. \frac{\partial}{\partial t} y_{\alpha l'} \right| A = \alpha, L = l'
\end{aligned} \tag{6.11}$$

De otro lado, para las partículas  $\alpha$  en la fase  $l$ . Por definición de masa se tiene para las fases fluidas que  $\langle M_{\alpha l'}(t)\delta_{A\alpha}\delta_{Ll'} \rangle / \langle M_{\alpha l}(t)\delta_{A\alpha}\delta_{Ll} \rangle = (y_{\alpha l'} S_{l'} \phi V_T) / (y_{\alpha l} S_l \phi V_T) = (y_{\alpha l'} S_{l'}) / (y_{\alpha l} S_l)$  o para la fase roca  $\langle M_{\alpha r}(t)\delta_{A\alpha}\delta_{Lr} \rangle / \langle M_{\alpha l}(t)\delta_{A\alpha}\delta_{Ll} \rangle = (x_\alpha(1-\phi)\rho_r V_T) / (y_{\alpha l} S_l \phi V_T) = (x_\alpha(1-\phi)\rho_r) / (y_{\alpha l} S_l \phi)$  y por tanto, reemplazando en la ecuación (6.11) se tiene

$$\begin{aligned} \frac{dM_{\alpha l}(t)}{dt} = & \frac{M_{\alpha l} x_\alpha M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{1\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{1\alpha rmax}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \\ & + \frac{M_{\alpha l} x_\alpha M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{2\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{2\alpha rmax}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \\ & - \frac{M_{\alpha l} x_\alpha (1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd, \alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \\ & + \frac{M_{\alpha l}}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{all'} \left. \frac{\partial}{\partial t} y_{\alpha l'} \right|_{A = \alpha, L = l'} \quad (6.12) \end{aligned}$$

para el componente  $\alpha$  en la fase  $l$ . Donde se nota que si  $y_{\alpha l} = 0$  el proceso de disolución debe parar, por lo tanto, el componente  $\alpha$  no existe en la fase  $l$ . Teniendo en cuenta, las ecuaciones (6.1) a (6.2) y la ecuación (6.12) la tasa de flujo se puede escribir como

$$\begin{aligned} q_{\alpha l} = & \frac{x_\alpha M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{1\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{1\alpha rmax}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \\ & + \frac{x_\alpha M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra, \alpha l r} \left( 1 - \frac{\overline{x_{2\alpha r} | A = \alpha, L = r}}{x_{2\alpha rmax}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \\ & - \frac{x_\alpha (1-\phi)\rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd, \alpha l r} \overline{x_{2r} | A = \alpha, L = r} \\ & + \frac{1}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{all'} \left. \frac{\partial}{\partial t} y_{\alpha l'} \right|_{A = \alpha, L = l'} \quad (6.13) \end{aligned}$$

Ahora introduciendo las ecuaciones (3.30), (3.31), (3.32) y (3.33) en la ecuación (3.27) se tiene

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \left[ -\frac{y_{\alpha l} k_{rl} k}{b_l S_l \phi \mu_l} \left( \frac{\partial P_l}{\partial x_k} + \rho_l g e_k \right) + \frac{1}{\phi b_l S_l} \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi b_l S_l D_{\alpha l x_k}) \right] \mathcal{F} \right\} + \\
& \frac{\partial}{\partial y_{\alpha l}} \left\{ \left[ \sum_{l' \neq l} \frac{\varepsilon_{\alpha l l'}}{\rho_l} \frac{\partial y_{\alpha l'}}{\partial t} + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r} \frac{\phi S_l}{k_{irr} y_{\alpha r}} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r}}{x_{1\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} \right] \mathcal{F} \right. \\
& \left. + \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r} (1 - \phi) \rho_r} \frac{\phi S_l}{k_{ra, \alpha lr}} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r}}{x_{2\alpha r, max}} \right) y_{\alpha l} - \frac{y_{\alpha l}}{x_{\alpha r}} k_{rd, \alpha lr} x_{2\alpha r} \right] \mathcal{F} = \\
& \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{k'}} \left\{ \sqrt{2 \frac{D_{\alpha l x_k}}{\phi b_l S_l}} \mathcal{F} \right\} \\
& - \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{irr, \alpha lr} \left( 1 - \frac{x_{1\alpha r} |A = \alpha, L = r}{x_{1\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\
& - \left\{ \frac{x_{\alpha} M_r}{y_{\alpha l}} k_{ra, \alpha lr} \left( 1 - \frac{x_{2\alpha r} |A = \alpha, L = r}{x_{2\alpha r max}} \right) \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l} \right\} \mathcal{F} \\
& + \left\{ \frac{x_{\alpha} (1 - \phi) \rho_r}{y_{\alpha l} S_l \phi} M_r k_{rd, \alpha lr} x_{2r} \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = r} \right\} \mathcal{F} \\
& - \left\{ \frac{1}{y_{\alpha l} S_l} \sum_{l' \neq l} y_{\alpha l'} S_{l'} \frac{M_l}{\rho_l} \varepsilon_{\alpha l l'} \frac{\partial}{\partial t} y_{\alpha l'} \overline{y_{\alpha j} | A = \alpha, L = l'} \right\} \mathcal{F} \quad (6.14)
\end{aligned}$$

Una forma de entender el término asociado a la diferencia de promedios de Favre de la concentración del componente  $\alpha$  en las fases  $l$  y  $l'$ , es que dicha concentración tiende a un promedio en el REV.

## Bibliografía

- Abdelfatah, E., Pournik, M., Shiau, B. J. Ben, & Harwell, J. (2017). Mathematical modeling and simulation of nanoparticles transport in heterogeneous porous media. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 40, 1–16. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2017.01.028>
- Abou-Kassem, J.H., Farouq Ali, S.M. and Islam, M. R. (2006). *Petroleum Reservoir Simulations A basic Approach*. Gulf Publishing Company. Elsevier Inc.
- Akbari, H. (2014). Modified moving particle method for modeling wave interaction with multi layered porous structures. *Coastal Engineering*, 89, 1–19. <https://doi.org/10.1016/j.coastaleng.2014.03.004>
- Babakhani, P., Bridge, J., Doong, R., & Phenrat, T. (2017). Continuum-based models and concepts for the transport of nanoparticles in saturated porous media : A state-of-the-science review. *Advances in Colloid and Interface Science*, 246, 75–104.
- Bargiel, M., & Tory, E. (2015). Solution of Linear and Nonlinear Diffusion Problems Via Stochastic Differential Equations. *Computer Science*, 16(4), 415. <https://doi.org/10.7494/csci.2015.16.4.415>
- Bear, J. (2018). *Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media* (First edit). Haifa, Israel: Springer International Publishing.
- Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. *Advances in Water Resources*, 25(8–12), 861–884. [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(02\)00042-8](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(02)00042-8)
- Berkowitz, B., Cortis, A., Dentz, M., & Scher, H. (2006). Modeling Non-fickian transport in geological formations as a continuous time random walk. *Reviews of Geophysics*, 44(2), 1–49. <https://doi.org/10.1029/2005RG000178>.1.INTRODUCTION
- Berkowitz, B., & Scher, H. (1995). On Characterization of Anomalous Dispersion in Porous and Fractured Media. *Water Resources Research*, 31(6), 1461–1466. <https://doi.org/10.1029/95WR00483>
- Berkowitz, B., & Scher, H. (1998). Theory of anomalous chemical transport in random fracture networks. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and*

- Related Interdisciplinary Topics*, 57(5), 5858–5869.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.5858>
- Borja, R. I. (2013). *Plasticity Modeling & Computation* (First ed.). Stanford, California, USA: Springer Heidelberg New York Dordrecht London. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-38547-6>
- Bueno, N. (2019). *Desarrollo de un modelo de simulación térmica y composicional para estudiar el impacto en el recobro de crudo y cambios de composición durante la coinyección de vapor y gases no condensables en yacimientos de crudo pesado*. Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín. Retrieved from <http://bdigital.unal.edu.co/75033/1/1152696188.2019.pdf>
- Bundschuh, J., & Suarez, M. (2010). *Introduction to the Numerical Modeling of Groundwater and Geothermal systems* (First). Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis Group.
- Cardona Rojas, L. (2017). *Efecto de nanopartículas en procesos con inyección de vapor a diferentes calidades*. Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín. Retrieved from <http://bdigital.unal.edu.co/62562/1/1152199431.2018.pdf>
- Caroni, E., & Fiorotto, V. (2005). Analysis of Concentration as Sampled in Natural Aquifers. *Transport in Porous Media*, 19–45. <https://doi.org/10.1007/s11242-004-1119-x>
- Chen, Y., Zhou, C., & Jing, L. (2009). Modeling coupled THM processes of geological porous media with multiphase flow: Theory and validation against laboratory and field scale experiments. *Computers and Geotechnics*, 36(8), 1308–1329. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2009.06.001>
- Coutelieiris, F. ., & Delgado, J. M. P. Q. (2012). *Transport Process in Porous Media* (First). Berlin, Heidelberg: Springer - Verlag Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-27910-2>
- Curl, R. L. (1963). Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors. *AIChE Journal*, 9(2), 175–181. <https://doi.org/10.1002/aic.690090207>
- Delay, F., Ackerer, P., & Danquigny, C. (2005). Simulating Solute Transport in Porous or Fractured Formations Using Random Walk Particle Tracking. *Vadose Zone Journal*, 4(2), 360. <https://doi.org/10.2136/vzj2004.0125>
- Dentz, M., Cortis, A., Scher, H., & Berkowitz, B. (2004). Time behavior of solute transport in heterogeneous media: Transition from anomalous to normal transport. *Advances in*

- Water Resources*, 27(2), 155–173. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2003.11.002>
- Dopazo, C., & O'Brien, E. E. (1976). Statistical treatment of isothermal chemical reactions in turbulence. *Combustion Science Technologies*, 13, 123–156.
- El-Diasty, A. I., & Aly, A. M. (2015). Understanding the mechanism of nanoparticles applications in enhanced oil recovery. *Society of Petroleum Engineers - SPE North Africa Technical Conference and Exhibition 2015, NATC 2015*, 000, 944–962. <https://doi.org/10.2118/175806-ms>
- Elsayed, R. (2014). *A Comparative Study between nanoparticles Method and the Other Methods for Increasing Heavy Oil Recovery*. Suez University.
- Fa, K. S. (2014). Uncoupled continuous-time random walk model: Analytical and numerical solutions. *Physical Review E*, 89(5), 1–9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.89.052141>
- Ghoufi, A., Emile, J., & Malfreyt, P. (2013). Recent advances in Many Body Dissipative Particles Dynamics simulations of liquid-vapor interfaces. *The European Physical Journal. E, Soft Matter*, 36(1), 10. <https://doi.org/10.1140/epje/i2013-13010-7>
- Janicka, J., Kolbe, K., & Kollmann, W. (1977). Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 4, 47–66.
- Ju, B., & Fan, T. (2009). Experimental study and mathematical model of nanoparticle transport in porous media. *Powder Technology*, 192(2), 195–202. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2008.12.017>
- Kang, K., Abdelfatah, E., & Pournik, M. (2019). Nanoparticles transport in heterogeneous porous media using continuous time random walk approach. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 177, 544–557. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2019.02.075>
- Khalili, N., & Loret, B. (2001). An elasto-plastic model for non-isothermal analysis of flow and deformation in unsaturated porous media : formulation. *International Journal Solids and Structures*, 38, 8305–8330.
- Li, S., Genys, M., Wang, K., & Torsæter, O. (2015). Experimental study of wettability alteration during nanofluid enhanced oil recovery process and its effect on oil recovery. *Society of Petroleum Engineers - SPE Reservoir Characterisation and Simulation Conference and Exhibition, RCSC 2015*, 393–403. <https://doi.org/10.2118/175610-ms>
- Li, S., & Torsæter, O. (2015). Experimental Investigation of the influence of nanoparticles

- adsorption and transport on wettability alteration for oil wet Berea sandstone. *SPE Middle East Oil and Gas Show and Conference, MEOS, Proceedings*, 229–244.
- Liu, M. B., Liu, G. R., Zhou, L. W., & Chang, J. Z. (2014). Dissipative Particle Dynamics (DPD): An Overview and Recent Developments. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1–28. <https://doi.org/10.1007/s11831-014-9124-x>
- Liu, M., Meakin, P., & Huang, H. (2007). Dissipative particle dynamics simulation of pore-scale multiphase fluid flow. *Water Resources Research*, 43(August 2006), 1–14. <https://doi.org/10.1029/2006WR004856>
- Lundgren, T. S. (1969). Model equation for nonhomogeneous turbulence. *Physics Fluids*, 12, 485–497.
- Luo, L. S. (2000). Theory of the lattice Boltzmann method: Lattice Boltzmann models for nonideal gases. *Physical Review E*, 62(4), 4982–4996.
- Meyer, D. W., Jenny, P., & Tchelepi, H. a. (2010). A joint velocity-concentration PDF method for tracer flow in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 46(12), 1–17. <https://doi.org/10.1029/2010WR009450>
- Morales, O. A. (2019). *Simulación del mejoramiento in-situ en yacimientos de crudo pesado con el uso de nanocatalizadores en procesos de inyección de vapor*. Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín.
- Mostaghimi, P. (2012). Transport Phenomena Modelled on Pore-Space Images. Retrieved from [https://workspace.imperial.ac.uk/earthscienceandengineering/Public/external/Research/PERM/Peyman Mostaghimi PhD thesis.pdf](https://workspace.imperial.ac.uk/earthscienceandengineering/Public/external/Research/PERM/Peyman%20Mostaghimi%20PhD%20thesis.pdf)
- Moukalled, F., Mangani, L., & Darwish, M. (2016). *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics. An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab*. (First). Switzerland: Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-16874-6>
- Pahar, G., & Dhar, A. (2016). Engineering Analysis with Boundary Elements Modeling free-surface flow in porous media with modified incompressible SPH. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 68, 75–85.
- Paster, A., Bolster, D., & Benson, D. A. (2013). Particle tracking and the diffusion-reaction equation. *Water Resources Research*, 49(1), 1–6. <https://doi.org/10.1029/2012WR012444>

- Peng, C., Xu, G., Wu, W., Yu, H., & Wang, C. (2017). Computers and Geotechnics Multiphase SPH modeling of free surface flow in porous media with variable porosity. *Computers and Geotechnics*, *81*, 239–248.
- Sahimi, M. (2012). Dispersion in porous media, continuous-time random walks, and percolation. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, *85*(1). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.016316>
- Singh, H. (2014). *Scale-up of Reactive Processes in Heterogeneous Media*. The University of Texas at Austin.
- Solano, H. (2019). *Modelamiento de la generación, transporte y destrucción de espumas formadas por gasodispersiones en yacimientos naturalmente fracturados para aplicaciones de Recobro Mejorado*. Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín.
- Soulaine, C., Debenest, G., & Quintard, M. (2011). Upscaling multi-component two-phase flow in porous media with partitioning coefficient. *Chemical Engineering Science*, *66*(23), 6180–6192. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.08.053>
- Subramaniam, S. (2013). Lagrangian-Eulerian methods for multiphase flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, *39*, 215–245. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.10.003>
- Tartakovsky, A. M., Tartakovsky, D. M., & Meakin, P. (2008). Stochastic Langevin Model for Flow and Transport in Porous Media. *Physical Review Letters*, *101*(044502), 1–4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.044502>
- Tartakovsky, D. M., & Dentz, M. (2019). Diffusion in Porous Media: Phenomena and Mechanisms. *Transport in Porous Media*, *130*(1), 105–127. <https://doi.org/10.1007/s11242-019-01262-6>
- Tyagi, M. (2010). *Probability Density Function Approach for Modeling Multi-Phase Flow in Porous Media*.
- Tyagi, Manav, Jenny, P., Lunati, I., & Tchelepi, H. A. (2008). A Lagrangian, stochastic modeling framework for multi-phase flow in porous media. *Journal of Computational Physics*, *227*, 6696–6714. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.03.030>
- Vlahos, L., Isliker, H., Kominis, Y., & Hizanidis, K. (2008). Normal and Anomalous Diffusion: A Tutorial. Retrieved from <http://arxiv.org/abs/0805.0419>
- Wang, H., Ewing, R. E., Qin, G., Lyons, S. L., Al-Lawatia, M., & Man, S. (1999). A Family

- of Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Methods for Multi-dimensional Advection-Reaction Equations. *Journal of Computational Physics*, 152(1), 120–163. <https://doi.org/DOI: 10.1006/jcph.1999.6239>
- Warren, P. B. (2003). Vapor-liquid coexistence in many-body dissipative particle dynamics. *Physical Review. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 68, 1–8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.066702>
- Wei, Y., & Huaqing, X. (2011). A Review on Nanofluids: Preparation, Stability Mechanisms, and Applications. *Journal of Nanomaterials*, 1–17. <https://doi.org/0.1155/2012/435873>
- Welton, W. C., & Pope, S. B. (1997). PDF model calculations of compressible turbulent flows using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 134(1), 150–168. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1997.5680>
- Whitson, C. H., & Brulé, M. R. (2000). *Phase Behavior. Monograph 20, Society of Petroleum Engineers Inc.* (Vol. 20).
- Xia, Y., Blumers, A., Li, Z., Luo, L., Tang, Y., Kane, J., ... Andrew, M. (2020). A GPU-accelerated package for simulation of flow in nanoporous source rocks with many-body dissipative particle dynamics. *Computer Physics Communications*, 247, 1–14.
- Yang, L., & Yin, H. (2014). Parametric study of particle sedimentation by dissipative particle dynamics simulation. *Physical Review E*, 90(3), 033311. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.033311>
- Younes, a., Ackerer, P., & Lehmann, F. (2006). A new efficient Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solving the advection-dispersion equation on unstructured meshes. *Advances in Water Resources*, 29, 1056–1074. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.09.003>
- Zhang, K., Li, Y., Hong, A., Wu, K., Jing, G., Torsæter, O., ... Chen, Z. (2015). Nanofluid alternating gas for tight oil exploitation. *Society of Petroleum Engineers - SPE/IATMI Asia Pacific Oil and Gas Conference and Exhibition, APOGCE 2015*, 1–17. <https://doi.org/10.2118/176241-ms>
- Zhang, T. (2012). *Modeling of Nanoparticle Transport in Porous Media. Transport in Porous Media*. University of Austin Texas.
- Zoia, A., Néel, M.-C., & Cortis, A. (2010). Continuous-time random-walk model of transport in variably saturated heterogeneous porous media. *Physical Review E*, 81(3), 1–12. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.031104>