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

La investigación fue financiada por el CONACYT (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología).

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

CICESE © 2022, Todos los Derechos Reservados, CICESE

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



Maestría en Ciencias

en Ciencias de la Tierra con orientación en Geofísica Aplicada

# Modelado y acoplamiento de la conductividad eléctrica e hidráulica a partir de tomografía de rocas

Tesis

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

Presenta:

Miguel Ángel Martínez Rodríguez

Ensenada, Baja California, México 2022 Tesis defendida por

## Miguel Ángel Martínez Rodríguez

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Luis Alonso Gallardo Delgado Director de tesis

Dr. Silvio Guido Marinone Moschetto

Dr. José Enrique Íñiguez Pacheco

Dr. Diego Ruiz Aguilar



Javier Alejandro González Ortega Coordinador del Posgrado en Ciencias de la Tierra

> Dr. Pedro Negrete Regagnon Director de Estudios de Posgrado

Copyright © 2022, Todos los Derechos Reservados, CICESE Prohibida su reproducción parcial o total sin la autorización por escrito del CICESE Resumen de la tesis que presenta Miguel Ángel Martínez Rodríguez como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Ciencias de la Tierra con orientación en Geofísica Aplicada.

# Modelado y acoplamiento de la conductividad eléctrica e hidráulica a partir de tomografía de rocas

Resumen aprobado por:

Dr. Luis Alonso Gallardo Delgado Director de tesis

En este trabajo se emplearon técnicas de modelado numérico para simular el flujo de corriente eléctrica y de fluido a través de medios porosos con el fin de determinar el factor de resistividad y la permeabilidad, así como la distribución de los campos de densidad de corriente eléctrica y velocidad de flujo. Para el modelado de flujo eléctrico se desarrolló un algoritmo basado en diferencias finitas, mientras que para el modelado hidráulico se empleó una librería reportada en la literatura, basada en el método de redes de Boltzmann. En ambos esquemas de modelado se establecieron condiciones en la frontera poro-grano para modelar los procesos físicos exclusivamente en el espacio poroso. Los valores estimados de factor de resistividad y de permeabilidad, así como la porosidad, se emplearon para estudiar las correlaciones entre estas propiedades a través de relaciones petrofísicas. Para esto, se propuso una expresión que relaciona la permeabilidad y la porosidad y, empleando una relación existente entre el factor de resistividad y la porosidad, se propuso también una relación directa entre la permeabilidad y el factor de resistividad. Las relaciones propuestas fueron aplicadas a los valores numéricos obtenidos para paquetes de esferas generados numéricamente y se encontró que se ajustan mejor a los datos en comparación con las relaciones más comúnmente utilizadas, especialmente para porosidades altas. Se mostró también que estas relaciones petrofísicas toman la forma de las relaciones más comunes conocidas cuando se trata con porosidades bajas. Valores obtenidos de imágenes digitales de un paquete de esferas sintético y una muestra de dolomita mostraron que las expresiones para porosidades bajas son suficientes para ajustar datos de medios porosos con porosidades menores a un valor entre 0.3 y 0.4. Finalmente, se analizaron el factor de resistividad, la permeabilidad, las relaciones petrofísicas, y las distribuciones espaciales y estadísticas de los campos vectoriales de flujo se analizaron para comparar los fenómenos de transporte eléctrico e hidráulico, encontrando que algunos factores, como la porosidad efectiva, son importantes en ambos fenómenos de flujo; mientras que otros, como la adherencia del fluido a las paredes del poro, son particularmente relevantes para el flujo hidráulico.

Palabras clave: Física de rocas, modelado numérico, relaciones petrofísicas, fenómenos de transporte, factor de resistividad, permeabilidad, porosidad, tomografía de rocas, campos vectoriales, distribución estadística. Abstract of the thesis presented by Miguel Angel Martínez Rodríguez as a partial requirement to obtain the Master of Science degree in Earth Sciences with orientation in Applied Geophysics.

#### Modeling and coupling of electrical and hydraulic conductivity from rock tomography

Abstract approved by:

Dr. Luis Alonso Gallardo Delgado Thesis Director

In this work, numerical modeling techniques were used to simulate the flow of electric current and fluid through porous media in order to determine the resistivity factor and permeability, as well as the distribution of electric current density and flow velocity fields. For electric flow modeling, an algorithm based on finite differences was developed, while for hydraulic modeling, a library reported in the literature, based on lattice Boltzmann method, was used. In both modeling schemes, pore-grain boundary conditions were established to model the physical processes exclusively in the pore space. The estimated values of resistivity factor and permeability, as well as porosity, were used to study the correlations between these properties through petrophysical relationships. An expression relating permeability and porosity was proposed and, using an existing relationship between the resistivity factor and the porosity, a direct relation between permeability and resistivity factor was also proposed. The proposed relations were applied to data obtained for numerically generated sphere packs and were found to fit the data better than the most commonly used relationships, especially for high porosities. It was also shown that these petrophysical relationships take the form of the most common relationships known when dealing with low porosities. Modeling data on digital images of a synthetic sphere pack and a dolomite sample showed that the expressions for low porosities are sufficient to fit data from porous media with porosities lower than 0.3 to 0.4. Finally, resistivity factors, permeabilities, petrophysical relationships, and spatial and statistical distributions of flow vector fields were analyzed to compare electrical and hydraulic transport phenomena, finding that some factors, such as the effective porosity, are important in both flow phenomena; whereas some other, such as the pore-wall adherence, are particularly relevant to hidraulic flux.

Keywords: Rock physics, numerical modelling, petrophysical relations, transport phenomena, resistivity factor, permeability, porosity, rock tomography, vector fields, statistical distribution.

## Dedicatoria

A mi madre, Ofelia, y a mis hermanos, Imanol y Mario.

### Agradecimientos

Al Dr. Luis Alonso Gallardo Delgado, quien me recibió como uno de sus estudiantes y me guió a lo largo de este trabajo, por compartir conmigo su experiencia y conocimiento y a la vez impulsarme a desarrollar mis propias ideas y aprendizajes.

Al Dr. Guido Marinone, el Dr. Enrique Íñiguez y el Dr. Diego Ruiz, miembros de mi comité de tesis, por sus valiosas observaciones en las presentaciones de avances y en el trabajo escrito.

Al M.Sc. Juvenal León y al M.Sc. Rubén Rioyos, quienes, en conjunto con el Dr. Enrique Íñiguez, me proporcionaron datos de tomografía de medios porosos en el Sistema de Laboratorios Especializados (SLE) del CICESE, y compartieron conmigo un poco de sus conocimientos sobre análisis y tomografía de rocas.

A mis compañeros Alina Gallardo, Erik Gallardo, Jessica Salas, Favio Cruz y Alejandra Sánchez, por el conocimiento y las observaciones que compartieron conmigo en la serie de seminarios organizada por el Dr. Alonso Gallardo.

Al Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California (CICESE), por contribuir a mi desarrollo académico y profesional a lo largo de mis estudios de maestría.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por brindarme el apoyo económico para realizar mis estudios de maestría.

### Tabla de contenido

#### Página

Resumen en español	ii
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	iv
Agradecimientos	v
Lista de figuras	viii
Lista de tablas	х

### Capítulo 1. Introducción

1.1.	Hipóte	sis y objetivos
	1.1.1.	Hipótesis
	1.1.2.	Objetivo general
	1.1.3.	Objetivos específicos
	1.1.4.	Organización del trabajo

## Capítulo 2. Relaciones petrofísicas para el factor de resistividad y la permeabilidad

2.1.	Caso eléctrico: Relaciones factor de resistividad-porosidad	4
2.2.	Caso hidráulico: Relaciones permeabilidad-porosidad	8
2.3.	Relaciones permeabilidad-factor de resistividad	9
2.4.	Alcance de las relaciones petrofísicas existentes y potenciales puntos de estudio	10

### Capítulo 3. Modelado numérico de flujo en medios porosos

3.1.	Pasos previos al modelado	12
	3.1.1. Tomografía de núcleos de pozo	12
	3.1.2. Segmentación de la imagen	14
3.2.	Consideraciones generales para el modelado	15
	3.2.1. Sobre las propiedades macroscópicas de las rocas	15
	3.2.2. Consideraciones generales de los métodos numéricos empleados	17
3.3.	Modelado de flujo: caso eléctrico	18
	3.3.1. Las ecuaciones del potencial eléctrico	19
	3.3.2. El método de diferencias finitas para el modelado de flujo de corriente	20
3.4.	Modelado de flujo: caso hidráulico	22
	3.4.1. Las ecuaciones de movimiento de un fluido viscoso	23
	3.4.2. El método de redes de Boltzmann para el modelado de flujo de fluidos	24

# Capítulo 4. Modelado y acoplamiento del factor de resistividad y la permeabilidad en medios porosos

4.1.	Sobre la relación permeabilidad-porosidad y su acoplamiento con el factor de resis-	
	tividad	29
	4.1.1. Sobre la relación permeabilidad-porosidad: modelos simples y ge-neralización	29

	4.1.1.1	1. Una relación permeabilidad-porosidad para modelos de tubos rectos de	
		sección arbitraria	30
	4.1.1.2	2. Generalización de la relación permeabilidad-porosidad: límites de la per- meabilidad y porosidad efectiva	35
	4.1.2. F	Relación factor de resistividad-permeabilidad y su reducción para porosida-	
	c	les bajas	37
	4.1.3.	Sobre el significado de los parámetros $m$ , $m_h$ , $G$ y $G_h$ en las relaciones	
	P	petrofísicas	38
4.2.	Aplicació	ón de las relaciones petrofísicas a resultados del modelado en medios porosos	39
	4.2.1. N	Vledios porosos generados numéricamente: paquetes de esferas	39
	4.2.2. N	Vledio poroso sintético: paquete de esferas	42
	4.2.3. N	Vledio poroso natural: Dolomita de Cerro Prieto	44

# Capítulo 5. Análisis de los campos de flujo eléctrico e hidráulico en paquetes de esferas uniformes

Capítulo 6.	Discusión y conclusiones	
Literatura citad	a	56
Anexos		60

# Lista de figuras

-		
F	igur	а
	0	

## Página

1.	Material poroso ideal formado por $n$ tubos cilíndricos rectos	5
2.	Esquema que ilustra un tubo con tortuosidad	5
3.	Esquema que ilustra la porosidad efectiva y de estancamiento.	6
4.	(a) Incidencia de radiación sobre un objeto y (b) reconstrucción hacia atrás de un punto del objeto (tomadas de <i>SkyScan 2211 User Manual</i> ).	13
5.	Volúmenes obtenidos con CT de una muestra de (a) arenisca y (c) carbonato	15
6.	Subvolúmenes segmentados de una muestra de (a) arenisca y (c) carbonato	15
7.	Esquema general de un arreglo para el modelado de flujo	16
8.	Frontera poro-grano en un medio poroso.	18
9.	Malla de discretización 3D con elementos cúbicos rectangulares. La lineas punteadas muestran el volumen elemental $\Delta V_{i,j,k}$ representado por el nodo $(i, j, k)$	21
10.	Nodos cerca de la frontera en una malla rectangular.	22
11.	Esquema del conjunto D3Q19. Las flechas azules indican las velocidades (note que existe una velocidad nula, que permite representar a las partículas que tienen velocidad igual a cero después de cada colisión).	26
12.	Paso de colisión en el método de redes de Boltzmann	27
13.	Paso de flujo en el método de redes de Boltzmann	28
14.	Ciclo de rebote en el método de redes de Boltzmann	28
15.	(a) $1/F_R$ vs $\phi$ y (b) $K$ vs $\phi$ para los modelos de tubos de sección rectangular T1, T2 y T3, y gráficas comparativas de $K_t$ y $1/2S_V^2$ como funciones (c) de la forma $(b/h)$ y (d) del tamaño $(b = h)$ de la sección.	33
16.	Corte de los campos de (a) densidad de corriente y (b) velocidad de flujo a lo largo de un medio que consta de un tubo de sección circular	34
17.	Perfil de Poiseuille que ilustra la aparición de un rotacional como resultado de la adhe- rencia (tomado de https://es.wikipedia.org/wiki/Rotacional)	34
18.	Corte de un medio poroso formado por tubos de sección circular (a) no sobrepuestos y (b) sobrepuestos.	35
19.	Tubo con obstáculos.	36
20.	Modelo de paquete de esferas con 100 esferas (a) del mismo diámetro y (b) de diámetros con distribución normal logarítmica.	40
21.	(a) $F_R$ vs $\phi$ , (b) $K^{-1}$ vs $\phi$ y (c) $K^{-1}$ vs $F_R$ para los modelos E1 y E2	41
22.	Submuestra de un paquete de esferas real	42
23.	(a) $log(F_R)$ vs $log(\phi)$ , (b) $log(K^{-1})$ vs $log(\phi)$ y (c) $log(K^{-1})$ vs $log(F_R)$ para sub- muestras de un paquete de esferas real.	43

## Figura

24.	Submuestra de un núcleo de dolomita	44
25.	(a) $log(F_R)$ vs $log(\phi)$ , (b) $log(K^{-1})$ vs $log(\phi)$ y (c) $log(K^{-1})$ vs $log(F_R)$ para sub- muestras de un núcleo de dolomita.	45
26.	Densidad de probabilidad de la densidad de corriente eléctrica para muestras de diferentes porosidades del modelo E1: (a) magnitud, (b) componente $x$ (dirección del campo), (c) componente $y$ (transversal al flujo).	48
27.	Densidad de probabilidad de la velocidad de flujo para muestras de distintas porosidades del modelo E1: (a) magnitud, (b) componente $x$ (dirección del campo) y (c) componente $y$ (transversal al flujo).	49
28.	Variación de la desviación estándar respecto a la porosidad para (a) la densidad de corriente eléctrica y (b) la velocidad de flujo para muestras de diferentes porosidades del modelo E1	50
29.	Magnitudes y direcciones de los campos de (a,c) densidad de corriente eléctrica y (b,d) velocidad de flujo en el plano $z = 50$ para un paquete de esferas del modelo E1 con $\phi = (0.31, 0.70)$ .	51
30.	Magnitud del producto vectorial de los campos de densidad de corriente eléctrica y velocidad de flujo normalizados en el plano $z = 50$ para una muestra del modelo E1 con $\phi = 0.70.$	52
31.	Magnitud del rotacional de (a) la densidad de corriente eléctrica y (b) la velocidad de flujo en el plano $z = 50$ para una muestra del modelo E1 con $\phi = 0.70$ .	52
32.	Esfera conductora en un campo uniforme	61
33.	Plano $z = 0$ que muestra el potencial obtenido (a) analíticamente y (b) numéricamente para una esfera conductora inmersa en un campo electrostático uniforme	61
34.	Valores numéricos y teóricos de la conductividad promedio para el caso de (a) contrastes pequeños y (b) limite diluido	62
35.	Propiedades macroscópicas vs propiedades del fluido para una muestra del modelo de tubos rectos	64
36.	$K_t$ vs $\phi$ para tubos rectangulares de diferentes dimensiones. $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	65

## Lista de tablas

Tabla	Página
1.	Parámetros estructurales para modelos de paquetes de esferas
2.	Parámetros estructurales para un paquete de esferas real
3.	Parámetros estructurales para un núcleo de dolomita

Para lograr un aprovechamiento eficiente de reservorios de hidrocarburos y acuíferos es necesario conocer sus características cuantificadas en parámetros tales como el vo-lumen del reservorio, el contenido de fluido y su potencial para ser explotado. Muchos de estos parámetros pueden determinarse directa o indirectamente de las propiedades físicas que manifiesta el reservorio. Comúnmente, diferentes propiedades físicas evidencian características diferentes del reservorio. Igualmente, una misma característica del reservorio puede afectar simultáneamente diferentes propiedades físicas. Esto da lugar a relaciones entre dos propiedades físicas las cuales son directamente observadas en los reservorios y descritas, comúnmente, con relaciones empíricas.

Un caso particularmente importante de estas relaciones empíricas son las relaciones petrofísicas. Estas relaciones asocian las propiedades físicas de los reservorios (propiedades conductivas, elásticas, etc.) con su composición y estructura interna (porosidad, geometría de los poros, etc.). En consecuencia, las propiedades físicas de las rocas también se relacionan entre si a través de la estructura interna del reservorio. Para determinar estas relaciones, a lo largo de las últimas décadas, se han hecho desarrollos teóricos y empíricos con la premisa de que pueden derivarse algunas de sus propiedades físicas a partir de la estructura de una roca. Luego, estas propiedades pueden determinarse con observaciones geofísicas a escalas mayores. La relación entre las propiedades a pequeña escala de las rocas que forman un reservorio y las observaciones geofísicas a gran escala es un problema que sigue abierto (Andra et al., 2013a; Slater, 2007). En este trabajo se estudian el flujo de cargas y de fluido a escala de núcleo de pozo para determinar tanto el factor de resistividad como la permeabilidad, y con ellos entender su relación con la porosidad y otros factores relacionados con la distribución porosa de las rocas.

Para estudiar las relaciones entre la estructura y las propiedades eléctricas e hidráuli-cas de un medio, lo primero es conocerlas a ambas. La propiedad eléctrica asociada al flujo de cargas es la conductividad eléctrica, la cual se puede medir a través de estudios geofísicos en superficie, registros geofísicos de pozo o del análisis de núcleos de roca extraídos de los pozos. Esta conductividad eléctrica depende primeramente de la geometría de los reservorios, del contenido de fluidos y de las propiedades de los fluidos. Por otro lado, la propiedad hidráulica más importante es la conductividad hidráulica, la cual está relacionada directamente con el potencial que tiene un reservorio para ser explotado y puede estimarse, por ejemplo, a partir de las mediciones de los niveles en los pozos y a partir del análisis de núcleos de flujo eléctrico e hidráulico a través de rocas (en lo que se conoce como *Digital Rock Physics* o DRP).

Dado que la relación entre el flujo eléctrico e hidráulico ha sido de interés desde hace años, han surgido relaciones teóricas y empíricas que muestran que ambos fenómenos pueden ser comparables. Sin embargo, a pesar de los conocimientos existentes, no hay un método estándar ni para determinar la relación entre la conductividad eléctrica y la conductividad hidráulica de una roca, ni para unificar la relación entre estas y la estructura interna de la roca.

#### 1.1. Hipótesis y objetivos

#### 1.1.1. Hipótesis

El factor de resistividad y la permeabilidad de las rocas están ambos determinados por el volumen y la geometría del espacio poroso del medio, por lo que conservan una relación entre ellas. Existe una porosidad efectiva tanto en el caso de flujo de corriente como de fluido, y es la que permite el flujo en ambos casos. Los parámetros que describen las características geométricas del espacio poroso y que aparecen en las relaciones entre el factor de resistividad, la permeabilidad y la porosidad, están relacionados entre si.

#### 1.1.2. Objetivo general

Comprender la interacción entre el factor de resistividad, la permeabilidad y la porosidad de las rocas y establecer correlaciones entre estas propiedades.

#### 1.1.3. Objetivos específicos

- Obtener valores confiables para el factor de resistividad y la permeabilidad de muestras de roca mediante DRP.
- Comprender las relaciones entre el factor de resistividad, la permeabilidad y la porosidad.
- Comprender el significado de los parámetros relacionados con la geometría del espacio poroso, como la porosidad efectiva.

#### 1.1.4. Organización del trabajo

Primeramente, se hace un repaso sobre las relaciones analíticas y empíricas entre la conductividad eléctrica, la conductividad hidráulica y la porosidad de las rocas (capitulo 2). Posteriormente se discuten

los fundamentos físicos y numéricos de las técnicas de modelado empleadas (capítulo 3). Luego se propone una relación permeabilidad-porosidad y una relación factor de resistividad-permeabilidad y se aplican a datos obtenidos mediante modelado numérico en medios porosos (capítulo 4). En el capítulo 5 se analiza la distribución espacial y estadística de los campos de densidad de corriente eléctrica y velocidad de flujo obtenidos mediante el modelado eléctrico e hidráulico, respectivamente, en modelos de paquetes de esferas monodispersas (del mismo diámetro) generados numéricamente. Finalmente, en el capítulo 6, se presentan la discusión y las conclusiones del trabajo.

# Capítulo 2. Relaciones petrofísicas para el factor de resistividad y la permeabilidad

Para estudiar las propiedades conductivas de las rocas, estas son consideradas como medios porosos. Existen relaciones teóricas y empíricas que buscan establecer correlaciones entre parámetros estructurales como la porosidad y propiedades relacionadas con la conductividad eléctrica e hidráulica, como el factor de resistividad y la permeabilidad, respectivamente. De igual forma, a partir de estas relaciones se ha buscado ligar directamente el factor de resistividad y la permeabilidad.

#### 2.1. Caso eléctrico: Relaciones factor de resistividad-porosidad

En un medio poroso pueden distinguirse dos fases: la fase de poro y la fase de grano. La porosidad  $\phi$  es la razón entre el volumen de la fase de poro,  $V_P$ , y el volumen total,  $V_T$ , de un medio poroso:

$$\phi = \frac{V_P}{V_T}.\tag{1}$$

Cuando la fase de grano de una roca es no metálica, la conducción eléctrica se lleva a cabo en la fase de poro y es de naturaleza iónica. Esta ocurre a través del fluido que ocupa los poros y en la interfase entre el grano y el fluido. Entonces, la conductividad de la roca ( $\sigma$ ) es la suma de la conductividad electrolítica ( $\sigma_{el}$ ) y la conductividad de interfase ( $\sigma_{int}$ ) (Waxman y Smits, 1968):

$$\sigma = \sigma_{el} + \sigma_{int}.\tag{2}$$

En el caso de rocas saturadas con un fluido de alta conductividad y que tienen una superficie de contacto poro-grano relativamente baja (gravas, arenas y limos gruesos), la conducción electrolítica predomina (Slater, 2007):

$$\sigma \approx \sigma_{el}.$$
 (3)

Esta suposición no es aplicable en rocas contaminadas con arcillas (Worthington, 1993; Vinegar y Waxman, 1984) o compuestas por limos finos, donde la conducción en la interfase puede ser considerable. Considerando que la conductividad electrolítica es predominante podemos definir el factor de resistividad  $F_R$ . El factor de resistividad es una medida de la resistencia que un medio poroso ofrece al flujo de corriente eléctrica y está dado por:

$$F_R = \frac{\rho_0}{\rho_W},\tag{4}$$

Uno de los pocos modelos de medio poroso de los que se conoce una relación exacta entre el factor de resistividad y la porosidad es el de un arreglo de tubos rectos huecos con sección arbitraria, cuya área transversal es mucho menor que su longitud (a lo que se le suele llamar tubos capilares). En la figura 1 se muestra el caso de tubos de sección circular a modo de ejemplo. Para este modelo, la relación  $F_R - \phi$  está dada por (Donaldson y Tiab, 2004):

$$F_R = \phi^{-1}.\tag{5}$$

Esto es, el factor de resistividad es inversamente proporcional a la porosidad en este modelo simple.

En el caso más general donde los tubos no son rectos puede definirse la tortuosidad au como:

$$\tau = \left(\frac{L_a}{L}\right)^2,\tag{6}$$

donde  $L_a$  es la longitud del tubo y L es la longitud del dominio (fig. 2). Para este sistema, la relación  $F_R - \phi$  puede determinarse analíticamente y está dada por (Donaldson y Tiab, 2004):

$$F_R = \tau \phi^{-1}.\tag{7}$$



Figura 1. Material poroso ideal formado por n tubos cilíndricos rectos (Donaldson y Tiab, 2004).



Figura 2. Esquema que ilustra un tubo con tortuosidad (Donaldson y Tiab, 2004).

Por otro lado, para un sistema dispersivo de esferas, donde las esferas constituyen la fase de grano y están lo suficientemente separadas para que la interferencia eléctrica entre ellas sea despreciable, Maxwell (1873) determinó analíticamente que el factor de resistividad está dado por:

$$F_R = \frac{3-\phi}{2\phi},\tag{8}$$

mientras que para esferoides se tiene (Fricke, 1924):

$$F_R = \frac{(x+1) - \phi}{x\phi},\tag{9}$$

donde x es una función de la razón entre los ejes del esferoide.

Una generalización que abarca los casos anteriores es la forma semi-empírica pro-puesta por Rosales (Perez-Rosales, 1976):

$$F_R = G\phi^{-1} + (1 - G), \tag{10}$$

donde G es un parámetro geométrico que toma los valores de 1, 1.5 y (1 + x)/x para recuperar las ecuaciones 5, 8 y 9, respectivamente.

Los modelos empleados en las derivaciones anteriores tienen en común que el flujo es prácticamente ininterrumpido en la fase porosa, es decir, se ve poco o nada obstaculizado. Sin embargo, para aplicar esta relación en casos más generales debe consi-derarse que en una roca los poros son altamente irregulares y se producen regiones de estancamiento (fig. 3). Entonces, la porosidad  $\phi$  puede separarse en una porosidad efectiva  $\phi_e$  que permite el flujo y una porosidad de estancamiento  $\phi_s$  (Perez-Rosales, 1982):

$$\phi = \phi_e + \phi_s. \tag{11}$$

Por sentido físico, la porosidad efectiva  $\phi_e$  debe satisfacer las siguientes condiciones:



Figura 3. Esquema que ilustra la porosidad efectiva y de estancamiento (Perez-Rosales, 1982).

$$\begin{cases} \phi_e \leq \phi \\ \phi_e = 1 \quad cuando \quad \phi = 1 \\ \phi_e = 0 \quad cuando \quad \phi = 0 \end{cases}$$
(12)

La relación más simple que satisface estas condiciones es

$$\phi_e = \phi^m,\tag{13}$$

donde  $m \ge 1$  se conoce como exponente de cementación o de entrampamiento.

Entonces, si se supone que un medio poroso obedece una ley similar a la ecuación 10, es razonable considerar solo la porosidad efectiva para obtener:

$$F_R = G\phi_e^{-1} + (1 - G). \tag{14}$$

Sustituyendo (13) en (10) se obtiene la fórmula de Rosales (Perez-Rosales, 1982):

$$F_R = G\phi^{-m} + (1 - G).$$
(15)

La relación 15 satisface las condiciones:

$$\begin{cases} F_R = 1 \quad cuando \quad \phi = 1 \\ F_R \to \infty \quad cuando \quad \phi \to 0 \end{cases}$$
(16)

También se reduce a algunas relaciones empíricas importantes. Cuando G toma valores cercanos a 1,  $G\phi^{-m} \gg (1-G)$  y la fórmula de Rosales se reduce a la forma

$$F_R = G\phi^{-m},\tag{17}$$

relación empírica empleada para rocas sedimentarías como areniscas y carbonatos (Hill y Milburn, 1956; Carothers, 1968; Rivero, 1977, entre otros). Por último, si se toma G = 1 se obtiene la ley de Archie (Archie, 1942):

$$F_R = \phi^{-m},\tag{18}$$

relación empírica obtenida a partir de mediciones de laboratorio.

Determinar G y m es una tarea para la que aun no existe un procedimiento estándar, siendo valores

experimentales y empíricos los más recurridos. El exponente m para rocas con porosidad uniforme puede obtenerse a partir de análisis de núcleos de pozo, los cuales suelen ser representativos en estos casos. Para rocas menos homogéneas existen diversas relaciones empíricas para casos particulares (Hill y Milburn, 1956; Carothers, 1968; Rivero, 1977, entre otros). Con los valores estimados o supuestos para m se obtiene un valor de G para cada par de valores  $(F_R, \phi)$  medidos en el laboratorio y/o en el campo. El estándar de calidad con el que se cuenta es el hecho de que, para la mayoría de las rocas,  $G \rightarrow 1$ , por lo que al sustituir el valor propuesto de m en la ley de Archie debería obtenerse un valor  $F_R$  calculado cercano al valor medido.

#### 2.2. Caso hidráulico: Relaciones permeabilidad-porosidad

La permeabilidad K es una medida de la facilidad con la que un fluido pasa a través de un medio poroso, considerando que el flujo ocurre únicamente a través de la fase porosa.

Para un modelo de tubos rectos de sección circular, la relación permeabilidad-porosidad está dada por la fórmula analítica de Kozeny-Carman (Kozeny, 1927; Carman, 1997):

$$K = \frac{1}{2S_V^2}\phi,\tag{19}$$

donde  $S_V$  es el área expuesta dentro del espacio poroso por unidad de volumen de poro. En el caso de tubos con tortuosidad puede determinarse analíticamente que la relación  $K-\phi$  está dada por (Donaldson y Tiab, 2004):

$$K = \frac{1}{2S_V^2 \tau} \phi. \tag{20}$$

Para generalizar esta relación el factor 2 suele ser reemplazado por un parámetro empírico más general, el llamado factor de forma de poro, *c*. De este modo se obtiene una de las formas más empleadas de la relación de Kozeny-Carman (Donaldson y Tiab, 2004):

$$K = \frac{1}{cS_V^2 \tau} \phi.$$
<sup>(21)</sup>

Algunas relaciones empíricas o semi-empíricas proponen que la permeabilidad es proporcional a una potencia de la porosidad (Hommel et al., 2018; Xu y Yu, 2008):

$$K \propto \phi^{\eta},$$
 (22)

donde  $\eta$  es un parámetro relacionado con la geometría del espacio poroso y puede ser calibrado a partir de datos experimentales u obtenido de la literatura para casos específicos. El exponente  $\eta$  ofrece la ventaja de dar mayor adaptabilidad a la relación  $K - \phi$  al añadir un grado de libertad adicional. Aun está abierta la discusión sobre el significado físico de  $\eta$ .

Las relaciones petrofísicas que asocian la permeabilidad con una potencia de la porosidad tienen el inconveniente de que no se cumple que  $K \to \infty$  cuando  $\phi \to 1$  (Schulz et al., 2019), por lo que no son completamente aceptadas. Para satisfacer esta condición en el límite normalmente se proponen relaciones  $K - \phi$  que tienen la forma (Hommel et al., 2018; Xu y Yu, 2008; Schulz et al., 2019):

$$K \propto \frac{\phi^{\eta}}{(1-\phi)^{\nu}},\tag{23}$$

donde los valores de  $\eta$  y  $\nu$  son parámetros empíricos o semi-empíricos y son diferentes para cada caso específico reportado en la literatura. Comprender el significado físico de ambos parámetros es un problema que sigue abierto.

Aunque una relación como la de la ecuación 23 satisface las condiciones apropiadas en los límites, resulta problemático añadir parámetros como  $\eta$  y  $\nu$ , cuyos significados no se comprenden del todo. Así mismo, basarse en un modelo tan simple como el de tubos cilíndricos para hacer la mayoría de las derivaciones supone una deficiencia importante de conocimiento, que tiene su raíz en la complejidad de la dinámica de los fluidos.

#### 2.3. Relaciones permeabilidad-factor de resistividad

Basándose en algunas relaciones entre el factor de resistividad y la porosidad y entre la permeabilidad y la porosidad se han propuesto también algunas relaciones entre la permeabilidad y el factor de resistividad. Partiendo de la relación  $F_R - \phi$  de la ecuación 7 para el caso eléctrico y de la relación  $K - \phi$  de la ecuación 21 para el caso hidráulico puede obtenerse una relación  $K - F_R$  que se ha aplicado con éxito en muestras de areniscas (Niwas y de Lima, 2003; Slater, 2007):

$$K = \frac{1}{cS_V^2} F_R^{-1}.$$
 (24)

De forma algo más general, Purvance y Andricevic (2000) partieron de la ley de Archie y de una relación  $K - \phi$  como la de la ecuación 22 para obtener una relación  $K - \phi$  que considera las potencias de la

porosidad tanto en el caso eléctrico (m) como en el hidráulico  $(\eta)$ :

$$K \propto \frac{1}{S_V^2} F_R^{-\frac{\eta}{m}},\tag{25}$$

que, expresado en forma logarítmica equivale a una relación lineal:

$$log(K) = alog(F_R) + b,$$
(26)

donde  $a = -\eta/m$ ,  $b = \beta + log(1/S_V^2)$  y  $\beta$  es un término que representa las constantes de proporcionalidad de las relaciones  $F_R - \phi$  y  $K - \phi$ .

Si bien las relaciones  $K - F_R$  anteriores son atractivas por su simplicidad, debe considerarse que parten de relaciones petrofísicas para el factor de resistividad y la permeabilidad que no satisfacen las condiciones correctas en el límite cuando la porosidad tiende a uno, esto es, que  $F_R \rightarrow 1$  y  $K \rightarrow \infty$ . Entonces, debe prestarse atención a las limitaciones de estas aproximaciones.

#### 2.4. Alcance de las relaciones petrofísicas existentes y potenciales puntos de estudio

Las relaciones petrofísicas tratan de conectar las propiedades conductivas de las rocas con su estructura interna. En particular, en el caso eléctrico se trata de conectar el factor de resistividad con la porosidad, mientras que en el caso hidráulico se asocia a la permeabilidad con la porosidad.

Para casos simples se conocen relaciones exactas y estas son complementadas con conocimientos empíricos para construir relaciones para casos más generales. De esta forma diferentes autores han encontrado relaciones petrofísicas para diferentes tipos de rocas. En el caso eléctrico, Perez-Rosales (1976) ha identificado una relación que abarca varios casos particulares, mientras que en el caso hidráulico no existe ninguna relación que abarque una variedad amplia de casos y que se use ampliamente como fórmula general. A partir de las relaciones petrofísicas conocidas se han propuesto también algunas relaciones entre el factor de resistividad y la permeabilidad. Entonces, ¿existe una relación entre la permeabilidad y la porosidad que sea aplicable a una variedad amplia de casos?, y si existe, ¿esta permitiría relacionar a la permeabilidad con el factor de resistividad?

En el caso hidráulico la única relación permeabilidad-porosidad exacta que se conoce es la fórmula de Kozeny-Carman para el caso de tubos cilíndricos. Entonces, muchas generalizaciones parten con este modelo tan simple como única base. El modelado de flujo permite conocer en detalle la interacción del fluido con las paredes de los poros en su transito a través de un medio poroso complejo. Entonces,

¿conocer esto en detalle podría darnos información suficiente para suplir la falta de soluciones analíticas?, ¿ayudaría a proveer un sentido físico a relaciones petrofísicas existentes o a derivar relaciones petrofísicas más adecuadas?

### Capítulo 3. Modelado numérico de flujo en medios porosos

En primera instancia, las propiedades conductivas de las rocas pueden determinarse experimentalmente mediante pruebas de flujo llevadas a cabo en núcleos de pozo en el laboratorio. Como alternativa, las técnicas de modelado numérico de flujo han cobrado gran importancia en las décadas recientes por su potencial para determinar estas propiedades y, adicionalmente, comprender los procesos que gobiernan el flujo a escala de poro (Andra et al., 2013a).

El proceso de DRP a grandes rasgos consta de tres pasos (Dvorkin et al., 2011): (a) adquisición de la imagen digital de muestras de roca (por ejemplo, mediante tomografía computarizada); (b) procesado de la imagen para separar la fase granular de la fase porosa de la roca (lo que se conoce como segmentación); (c) simulación de procesos físicos en la imagen resultante para determinar propiedades macroscópicas.

Estudios han demostrado que existen al menos tres factores que afectan a las predicciones numéricas (Andra et al., 2013b): (a) el algoritmo de segmentación, (b) el algoritmo para la simulación y las condiciones de frontera, y (c) el tamaño de submuestra (dado que no se modela el núcleo de pozo completo) en relación a la heterogeneidad inherente a la roca. Los últimos esfuerzos en DRP se han orientado a considerar estos factores para obtener valores confiables de las propiedades de las rocas. Gracias a los esfuerzos y avances en esta rama, los resultados que se han obtenido mediante DRP presentan tendencias similares a los resultados de laboratorio.

Los procesos de adquisición de imágenes digitales de muestras de roca mediante tomografía computarizada y procesado de la imagen (segmentación) se explican brevemente en la sección 3.1. Dado que este trabajo se centra en la simulación de procesos físicos en tomografía de rocas, esto se aborda con mayor detalle en las secciones posteriores.

#### 3.1. Pasos previos al modelado

Antes de llevar a cabo la simulación de un proceso físico, es necesario preparar el medio donde este proceso ocurrirá. En DRP se trata de un medio poroso que se obtiene a partir de la tomografía de un núcleo de pozo y la segmentación de la imagen digital.

#### 3.1.1. Tomografía de núcleos de pozo

Los núcleos de pozo son muestras de roca extraídas de un pozo con la finalidad de analizarlas en el laboratorio y obtener información tanto cualitativa (como la composición, estructura y edad geológi-

ca), como cuantitativa. Esta información incluye porosidad, permeabilidad, conductividad eléctrica e hidráulica, propiedades elásticas y contenido de fluido, entre otras propiedades (Duliu, 1999). Se trata de porciones cilíndricas de roca que pueden tener una longitud de varios metros y un diámetro de varios centímetros.

En el laboratorio los núcleos de pozo pueden ser sometidos a pruebas de tensión, medición directa de la conductividad eléctrica, determinación de la conductividad hi-dráulica mediante pruebas de Darcy y tomografía computarizada, entre otros procedimientos. La tomografía computarizada es particularmente ventajosa para determinar la distribución porosa de las rocas (Donaldson y Tiab, 2004).

La tomografía computarizada (CT, por sus siglas en inglés) es uno de los métodos más empleados para el análisis de la estructura interna de una gran variedad de objetos, entre los que se incluyen los núcleos de pozo. Se trata de una técnica basada en la atenuación de rayos X o rayos gamma. El objeto en análisis es rotado sobre su eje y la radiación incide sobre este a cada paso de rotación, de modo que una "sombra" es proyectada (fig. 4(a)). Luego de cierta cantidad de observaciones a diferentes ángulos, pueden localizarse los puntos de absorción en el espacio (fig. 4(b)). Esto permite hacer una reconstrucción del volumen en tres dimensiones. CT puede suministrar información acerca de la densidad o composición química del objeto.

En geociencias, CT se emplea para la investigación de la porosidad, humedad, distribución de fracturas y distribución de fluidos residuales, además de que puede complementarse con otras técnicas de laboratorio para determinar propiedades mecánicas y conductividad hidráulica, entre otras propiedades (Duliu, 1999).

En este trabajo es de interés emplear CT como una herramienta para determinar la distribución porosa de las muestras de roca. Para este propósito, la resolución de las imágenes es crucial para obtener una reconstrucción estructural del medio poroso y medir su porosidad. Las muestras de roca natural pueden contener una cantidad significativa de porosidad formada por poros de escalas menores a las de las



**Figura 4.** (a) Incidencia de radiación sobre un objeto y (b) reconstrucción hacia atrás de un punto del objeto (tomadas de *SkyScan 2211 User Manual*).

resoluciones típicas de las imágenes obtenidas mediante tomografía, lo que puede afectar los valores de porosidad predichos por las imágenes digitales (Andra et al., 2013a). La resolución de imagen necesaria para hacer estudios de porosidad es típicamente del orden de micrómetros (Andra et al., 2013a; Duliu, 1999).

De las muestras digitalizadas se toman submuestras de geometría rectangular para tratar el problema en coordenadas rectangulares. Como se mencionó antes, el tamaño de la submuestra afecta a las predicciones numéricas. Esto se debe a la diferencia entre las dimensiones de las submuestras y las dimensiones de la muestra completa (es decir, del núcleo de pozo) (Dvorkin et al., 2011). Al menos a escala de núcleo, la distribución porosa de las rocas es significativamente heterogénea, incluso para rocas que podrían parecer altamente homogéneas a primera vista. Como resultado, las submuestras no son estrictamente representativas del núcleo. Para aplicaciones en DRP, las submuestras deben ser de dimensiones lo suficientemente grandes para que sus distribuciones porosas sean similares entre sí. Considerando lo anterior, las variaciones de porosidad entre distintas submuestras pueden aprovecharse para obtener la distribución de alguna propiedad física como función de la porosidad, como se hace, por ejemplo en Andra et al. (2013b). Para núcleos con dimensiones del orden de centímetros suelen tomarse submuestras del orden de milímetros, como puede notarse, por ejemplo, en los trabajos de Andra et al. (2013a) y Dvorkin et al. (2011).

Para este trabajo se utilizaron imágenes digitales de núcleos de pozo proporcionadas por personal del Sistema de Laboratorios Especializados (SLE) del Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada, Baja California (CICESE). Estas imágenes fueron obtenidas con el nanotomógrafo computarizado de rayos X SkyScan 2211 de la marca Bruker que está disponible en el SLE. Este tomógrafo ofrece un detalle de hasta 100 nm y permite escanear volúmenes de hasta 204 mm de radio, 200 mm de largo y 25 kg de peso, para obtener imágenes reconstruidas mediante el software InstaRecon de hasta 4K píxeles en un lapso de 11 minutos.

#### 3.1.2. Segmentación de la imagen

Un volumen obtenido mediante CT presenta una distribución de densidades que puede encontrarse en una escala de hasta 256 valores distintos (fig. 5). La segmentación de la submuestra se refiere a la identificación y separación del material en solo dos fases: la fase de poro y la fase de grano (fig. 6). Debido al tamaño de los volúmenes de datos, este proceso no puede ser llevado a cabo manualmente y se emplean algoritmos de procesado de imágenes. Algunas herramientas comúnmente empleadas para este procesado son el filtrado espacial, eliminación de ruido, umbralización, operaciones morfológicas y

análisis de conglomerados (Sezgin y Sankur, 2004; lassonov et al., 2009).



Figura 5. Volúmenes obtenidos con CT de una muestra de (a) arenisca y (c) carbonato (Andra et al., 2013a).



Figura 6. Subvolúmenes segmentados de una muestra de (a) arenisca y (c) carbonato (Andra et al., 2013a).

#### 3.2. Consideraciones generales para el modelado

La parte de modelado consiste en simular procesos físicos en el medio poroso y con ellos determinar algunas de sus propiedades: flujo de corriente eléctrica para determinar la conductividad eléctrica promedio (o el factor de resistividad), flujo de fluido para determinar la conductividad hidráulica (o la permeabilidad), entre otros (fig. 7). Para hacer el modelado es importante definir las leyes físicas que rigen el sistema y los métodos numéricos que aproximan las ecuaciones de estas leyes.

#### 3.2.1. Sobre las propiedades macroscópicas de las rocas

Las rocas son materiales altamente heterogéneos, con composiciones variadas y características que cambian en función de muchos factores. Pese a que es posible clasificar las rocas por su origen, composición mineral o por algunos aspectos de su estructura, describir físicamente un material tan complejo es un problema sobre el que se trabaja ampliamente en la actualidad. A nivel local, es decir, cuando se está lo suficientemente cerca para distinguir las partes que componen la roca, estas componentes manifiestan propiedades físicas propias. La interacción de todas estas partes da lugar a propiedades macroscópicas



Figura 7. Esquema general de un arreglo para el modelado de flujo.

que pueden describir la forma en que la roca reacciona a un estímulo físico. También pueden surgir propiedades macroscópicas que a nivel local no tienen sentido, como lo es la permeabilidad.

En el caso eléctrico, la capacidad de una roca de permitir el flujo de cargas depende de su estructura interna. Cada punto de la roca a nivel microscópico tiene su propia conductividad y aporta al flujo de corriente. A nivel macroscópico, donde no es posible distinguir las partes que componen la roca, lo que se observa es la capacidad promedio de la roca para transportar corriente, esto es, la conductividad promedio. Si se considera la conductividad promedio como aquella que tendría un material homogéneo para permitir el flujo en la misma medida que lo hace la roca, entonces puede determinarse mediante la ley de Ohm:

$$I = \frac{A}{L}\sigma_0 V, \tag{27}$$

donde I,  $\sigma_0$  y V son la corriente, la conductividad promedio y el potencial eléctrico, respectivamente.

En el caso hidráulico, cuando un fluido fluye a través de una roca, este tiene que hacerse camino a través de la compleja estructura del medio, lo que afecta a la velocidad con la que se transportan las partículas. La medida en que la velocidad de las partículas es afectada por la estructura interna de la roca es lo que define la permeabilidad de la roca, y es una propiedad que solo cobra sentido a nivel macroscópico. Una roca con baja permeabilidad obstaculiza más el flujo. Desde luego, la viscosidad del fluido también afecta el flujo. Un fluido menos viscoso fluirá con mayor velocidad. Todo esto está resumido en la ley de Darcy (Sánchez, 2022):

$$Q = \frac{A}{L} \frac{K}{\mu} \Delta P, \tag{28}$$

donde Q, K,  $\mu$  y P son el caudal (el volumen de fluido desalojado por unidad de tiempo), la permeabilidad, la viscosidad dinámica y la presión, respectivamente, y A y L son el área de la sección y la longitud del medio. La ley de Darcy establece una relación lineal entre el caudal y la presión, lo cual solo es válido en el régimen laminar, es decir, cuando el flujo es ordenado y paralelo a las paredes del espacio donde fluye el fluido. En el régimen turbulento, donde el flujo es desordenado y oscilante, la relación deja de ser lineal. En el caso de flujo subterráneo las velocidades son muy bajas, y para velocidades muy bajas el flujo suele ser laminar, de modo que podemos considerar que la ley de Darcy es válida, salvo en casos excepcionales (Sánchez, 2022).

Uno de los enfoques más empleados en la física de rocas es el de considerar a la roca como un medio poroso compuesto solo por dos fases: una fase sólida y una porosa. Entonces, el flujo hidráulico ocurre a través de los poros y la permeabilidad, que está relacionada con la estructura interna de la roca, pasa a ser una función de la geometría interna del medio poroso. En el caso de flujo eléctrico, resulta útil determinar la conductividad promedio cuando el medio poroso está completamente saturado con un fluido de referencia, que suele ser agua de formación. Se supone que la conductividad de la fase sólida del medio es despreciable en comparación con la del fluido, de modo que el flujo ocurre, al igual que en el caso hidráulico, solamente en la fase porosa. Entonces la conductividad promedio es una función de la geometría interna del aconductividad del fluido de referencia. Considerar a la roca como un medio poroso con las características anteriores requiere que la conducción de corriente ocurra casi en su totalidad a través del fluido de referencia, lo que no se cumple si el agua de formación es agua dulce de baja conductividad, si la roca es rica en metales o si la porosidad es muy pequeña, por mencionar algunos casos. Las propiedades macroscópicas de una roca como medio poroso pueden determinarse al resolver los problemas de flujo a través del medio.

#### 3.2.2. Consideraciones generales de los métodos numéricos empleados

Los métodos numéricos descritos en está sección, además de muchos otros, permiten obtener soluciones aproximadas de problemas físicos que se definen en dominios arbitrariamente complejos. Uno de estos problemas es el flujo a través de medios porosos (como las rocas). Para aplicar estos métodos a un medio poroso deben considerarse algunas condiciones importantes.

Para los métodos numéricos empleados en este trabajo al modelar procesos físicos en tomografías de rocas lo más simple es discretizar el espacio en celdas cuadradas, pues estas corresponden directamente con la discretización producto de la resolución de la imagen de la roca (Andra et al., 2013b).

Las condiciones en la frontera que encierra el dominio, esto es, en las caras del volumen cúbico en el que se lleva a cabo el modelado, son de dos tipos: condiciones tipo Dirichlet en dos caras opuestas

(estableciendo una diferencia de potencial eléctrico o de presión) y condiciones periódicas en las caras restantes. El par de caras con condiciones tipo Dirichlet puede alternarse en las diferentes direcciones para estudiar la anisotropía del sistema.

Como se mencionó antes, el caso más simple es suponer que la fase de grano tiene una conductividad eléctrica despreciable. También se supone que no hay flujo de fluido a través de la fase de grano. Por lo tanto, para abordar el problema, ambos modelados se resuelven solo en la fase de poro y se establecen condiciones en la frontera poro-grano (fig. 8).

Ambos algoritmos están escritos en c++. Para detalles sobre la precisión y estabilidad de los algoritmos, ver el anexo A. El modelado se ejecutó en el cluster LAMB del CICESE, que cuenta con 24 nodos de cómputo Intel, cada uno con 2 procesadores E52670 v2 de 10 núcleos a 2.5 GHz y 128 GB de RAM DDR3 a 1600 MHz.

#### 3.3. Modelado de flujo: caso eléctrico

El principio de las técnicas de modelado es simular un proceso físico mediante técnicas de cómputo. Para ello se deben definir las leyes físicas que rigen el proceso que se va a simular. En el caso de flujo de corriente son de interés las leyes físicas que gobiernan el potencial eléctrico y la corriente eléctrica.

Existe una gran variedad de métodos para la simulación de procesos físicos. Para la simulación de flujo de corriente eléctrica, dos métodos muy utilizados son los de diferencias finitas y los de elemento finito (Garboczi, 1998; Arns et al., 2002; Zhan et al., 2010, entre otros). Para el modelado del flujo de corriente eléctrica se empleó el método de diferencias finitas dada su simplicidad y su correspondencia con la discretización que surge directamente de la resolución de las imágenes. El algoritmo de diferencias finitas se escribió con base en el propuesto por Garboczi (1998).



Figura 8. Frontera poro-grano en un medio poroso.

#### 3.3.1. Las ecuaciones del potencial eléctrico

El campo electromagnético está completamente definido, de acuerdo con el teorema de Helmholtz, cuando se conocen el rotacional y la divergencia de los campos eléctrico y magnético. Estos son descritos por las ecuaciones de Maxwell. Dos de ellas son la ley de Ampere:

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t},\tag{29}$$

y la ley de Gauss:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho, \tag{30}$$

donde  $\vec{J}$  es la densidad de flujo de corriente y  $\rho$  es la densidad de carga. En un medio lineal, homogéneo e isótropo,  $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$  es el vector desplazamiento eléctrico y  $\vec{H} = \vec{B}/\mu$  es el campo magnético. Aquí  $\vec{E}$  es el campo eléctrico,  $\epsilon$  es la función dieléctrica del medio,  $\vec{B}$  es la inducción magnética y  $\mu$  es la permeabilidad magnética del medio. Sustituyendo la ecuación 30 en la divergencia de la ecuación 29 se obtiene la ecuación de continuidad para la conservación de la carga:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0. \tag{31}$$

Una relación constitutiva entre el campo eléctrico y la densidad de corriente es establecida para medios lineales mediante la ley de Ohm:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E},\tag{32}$$

donde  $\sigma$  es la conductividad eléctrica del medio. El campo eléctrico queda totalmente definido por la ley de Faraday:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t},\tag{33}$$

de donde, si la inducción magnética es constante en el tiempo, el campo eléctrico se dice conservativo y puede escribirse como el gradiente de un potencial eléctrico V:

$$\vec{E} = -\nabla V. \tag{34}$$

Sustituyendo la ecuación 34 en la ecuación 32 y esta a su vez en la ecuación 31 y reacomodando términos se obtiene la ecuación para el potencial eléctrico:

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$
(35)

Para el caso estacionario la densidad de carga es invariable en el tiempo. Por lo tanto,

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = 0 \tag{36}$$

describe el potencial eléctrico estacionario en un medio lineal isótropo con una distribución arbitraria de conductividad. Si el medio es además homogéneo, la conductividad es uniforme y la ecuación 36 se reduce a la forma

$$\nabla^2 V = 0. \tag{37}$$

#### 3.3.2. El método de diferencias finitas para el modelado de flujo de corriente

El método de diferencias finitas es un método numérico que aproxima derivadas de una función como diferencias de valores discretos de la misma:

$$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \longrightarrow \frac{\delta \phi}{\delta x},\tag{38}$$

lo que le permite transformar ecuaciones diferenciales en sistemas de ecuaciones lineales que pueden resolverse mediante métodos de álgebra lineal. De forma más general, si una función f(x) es bien portada, esto es, al menos n veces diferenciable y si x se divide en intervalos de tamaño característico h, la derivada n-ésima de f(x) en  $x = x_0$  puede ser aproximada con un error a lo más de orden O(h)por la combinación lineal de los valores de f(x) en al menos n + 1 puntos situados alrededor de  $x_0$ . Por ejemplo:

$$f^{(2)}(x_0) \approx af(x_0) + bf(x_0 - h) + cf(x_0 - 2h).$$
(39)

Los coeficientes que minimizan el error de la aproximación pueden ser determinados desarrollando en series de Taylor los valores de f en cada uno de los puntos.

Este método puede ser generalizado fácilmente para resolver ecuaciones diferenciales que representan sistemas físicos en más de una dimensión en coordenadas rectangulares considerando una malla rectangular (fig. 9). En particular, la ecuación 37 puede ser escrita en diferencias finitas si se tiene una aproximación del laplaciano. Si el espacio se discretiza en celdas rectangulares equiespaciadas con separación  $\Delta x$ , el Laplaciano en  $(x_i, y_j, z_k)$ , usando un esquema de siete puntos y un operador centrado para la derivada, es

$$\nabla^2 \Theta(x, y, z) \approx \frac{1}{\Delta r^2} (\Theta_{i+1, j, k} + \Theta_{i-1, j, k} + \Theta_{i, j+1, k} + \Theta_{i, j-1, k} + \Theta_{i, j, k+1} + \Theta_{i, j, k-1} - 6\Theta_{i, j}), \quad (40)$$



**Figura 9.** Malla de discretización 3D con elementos cúbicos rectangulares. La lineas punteadas muestran el volumen elemental  $\Delta V_{i,j,k}$  representado por el nodo (i, j, k) (Dey y Morrison, 1979).

Empleando la aproximación de la expresión 40 en 37 se obtiene la expresión lineal:

$$\frac{1}{\Delta r^2}(V_{i+1,j,k} + V_{i-1,j,k} + V_{i,j+1,k} + V_{i,j-1,k} + V_{i,j,k+1} + V_{i,j,k-1} - 6V_{i,j}) = 0, \quad (41)$$

que es una aproximación de la ecuación diferencial original. Agregando las condiciones de frontera particulares del problema, la ecuación diferencial original puede aproximarse mediante un sistema de ecuaciones lineales:

$$\nabla^2 V = 0 \longrightarrow A\vec{u} = 0, \tag{42}$$

donde  $\vec{u}$  es el vector que contiene el potencial en cada punto de la malla. Para resolver el sistema lineal se empleó el método de gradientes conjugados (Nocedal y Wright, 2006; Press et al., 2007).

Para el caso eléctrico, la condición en la frontera es que la componente normal de la densidad de corriente sea continua (fig. 10):

$$\sigma_A E_{An} = \sigma_B E_{Bn}.\tag{43}$$

Si el medio A es la zona de poro saturada con agua y  $\sigma_B$  es la conductividad de la roca, entonces

$$E_{An} = -\frac{\partial V}{\partial x}\Big|_{x=x_P} = 0.$$
(44)

Entonces, en el espacio discreto, considerando una diferencia centrada en el punto P:

$$V_{j+1} = V_j. \tag{45}$$



Figura 10. Nodos cerca de la frontera en una malla rectangular (Garboczi, 1998)

La conductividad promedio se obtiene de la forma macroscópica de la ley de Ohm:

$$\sigma_0 = \frac{L}{A} \frac{I}{V},\tag{46}$$

donde la diferencia de potencial V se establece en las condiciones de frontera y la corriente I está dada por

$$I = \sum_{i} j_i, \tag{47}$$

donde  $j_i$  es la componente normal a la superficie de salida de la densidad de corriente en la i-ésima celda unitaria. Los valores de *i* corren sobre toda la frontera de salida y los valores de  $j_i$  se determinan a partir de la forma fundamental de la ley de Ohm:

$$\vec{j} = -\sigma \nabla V,\tag{48}$$

para lo que se hace un promedio de la densidad de corriente que entra y la que sale de la celda:

$$j_i = -\frac{1}{2}(\sigma_{i,in}\nabla V_{i,in} + \sigma_{i,out}\nabla V_{i,out}).$$
(49)

#### 3.4. Modelado de flujo: caso hidráulico

En el caso de flujo de un fluido, son de interés las leyes que gobiernan la densidad y la velocidad de flujo.

Para el modelado del flujo de fluido se empleó el método de redes de Boltzmann debido a que, además de ser ampliamente utilizado, existen librerías ya programadas en diferentes lenguajes(Keehm, 2003; Fredrich et al., 2006, entre otros). Para el algoritmo de redes de Boltzmann se empleó la librería Palabos (Latt et al., 2021).

#### 3.4.1. Las ecuaciones de movimiento de un fluido viscoso

El estado de un fluido en movimiento está completamente determinado por su velocidad  $\vec{v}$ , su densidad  $\rho$  y su presión P. Esto es descrito por las ecuaciones de conservación de la masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0, \tag{50}$$

y del momento lineal:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = 0, \tag{51}$$

donde  $\Pi_{ik}$  es el tensor de densidad de flujo de momento.

La transferencia de momento para cualquier fluido tiene una componente sin disipación de energía debida simplemente al transporte de partículas y a las fuerzas de presión. Para el caso de fluidos viscosos, una transferencia de momento con disipación de energía surge debido a la fricción interna. Entonces, el tensor  $\Pi_{ik}$  puede separarse en estas partes:

$$\Pi_{ik} = P\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma_{ik},\tag{52}$$

donde  $\sigma_{ik}$  es el tensor de estrés viscoso. Puede demostrarse que la forma más general del tensor  $\sigma$  es:

$$\sigma_{ik} = \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \xi \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l}, \tag{53}$$

donde  $\mu$  y  $\xi$  son los coeficientes de viscosidad y son independientes de la velocidad. Sustituyendo 53 en 52 y esta a su vez en 51 y reacomodando términos, se obtiene:

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + v_i \frac{\partial v_k}{\partial x_k}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\xi \frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right). \quad (54)$$

Se sabe que los coeficientes de viscosidad son funciones de la temperatura y la presión, que en general no son homogéneos. Sin embargo, en la mayoría de los casos pueden considerarse constantes, de modo que, en forma vectorial:

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\vec{v} + \vec{v}(\nabla\cdot\vec{v})\right) = -\nabla P + \mu\nabla^2\vec{v} + \left(\xi - \frac{1}{3}\mu\right)\nabla(\nabla\cdot\vec{v}).$$
(55)

Esta es la ecuación de Navier-Stokes, que puede simplificarse para el caso de fluidos incompresibles, donde  $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ :

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2 \vec{v},\tag{56}$$

de modo que la viscosidad de un fluido incompresible es determinada solo por la viscosidad dinámica  $\mu$ . Entonces, las ecuaciones 50 y 56 describen la dinámica de un fluido incompresible de viscosidad constante.

Las ecuaciones de movimiento del fluido, así como la ecuación para el potencial eléctrico, requieren de condiciones de frontera que deben satisfacerse en las superficies que encierran el dominio sobre el que se resuelve el problema. En general, si una función es solución de las ecuaciones diferenciales que describen el problema y satisface las condiciones de frontera, entonces puede garantizarse su unicidad. La solución a un problema de flujo, o en general, de una ecuación de diferencial, puede estar fuera del alcance de los métodos analíticos exactos. En algunos casos pueden encontrase soluciones analíticas aproximadas. En otros casos aún más complejos, se emplean métodos numéricos para aproximar la solución.

#### 3.4.2. El método de redes de Boltzmann para el modelado de flujo de fluidos

El método de redes de Boltzmann (LB) es un método utilizado principalmente para la simulación computacional del flujo de fluidos (He et al., 2019). El principio de este método es discretizar el espacio de solución en una malla rectangular y suponer que partículas entran y salen de cada celda. El estado del sistema en un momento dado está descrito por una función que indica el estado de las partículas en cada celda. Dentro de las celdas ocurren colisiones que provocan la evolución del sistema. Se trata de un método que surgió como una extensión del método de autómatas celulares, aunque puede ser visto también como una aproximación de la ecuación de Boltzmann. La ecuación de Boltzmann puede describir estadísticamente el comportamiento de un fluido que se encuentra inicialmente en un estado de desequilibrio. En esta ecuación se considera una función de distribución que nos dice la probabilidad de que la posición y velocidad de una partícula se encuentren en un rango determinado en un instante de tiempo dado. Esta ecuación puede utilizarse para determinar cómo cambian cantidades físicas como el momento cuando el fluido está en movimiento. La ecuación de Boltzmann para la función de distribución  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  de una partícula puede ser escrita como (Parker, 1983) (anexo B):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{a} \cdot \nabla_v f = \Omega(f), \tag{57}$$
donde los términos de la izquierda describen la razón de cambio de la función de distribución en el tiempo, el efecto de difusión y el efecto de fuerzas externas, respectivamente y  $\Omega(f)$  es un termino que representa el efecto de las colisiones entre las partículas. La ecuación de Boltzmann reproduce las ecuaciones 50 y 51 que describen las leyes de la hidrodinámica (De Groot y Mazur, 2013) (anexo B).

Cuando el sistema está fuera del equilibrio, los diferentes factores que intervienen en la dinámica de las partículas propician que este vaya hacía el estado de equilibrio. Entonces se dice que ocurre una relajación del sistema y esta se caracteriza por un tiempo de relajación. Uno de los modelos más simples es considerar que únicamente un proceso de relajación tiene lugar. Con esta aproximación se obtiene el llamado operador de colisión BGK (por Bhatnagar-Gross-Krook) (Bhatnagar et al., 1954):

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \tag{58}$$

donde  $\tau$  es el tiempo de relajación y  $f^{eq}(\vec{x}, \vec{v}, t)$  es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann, que describe un sistema en equilibrio:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} exp\left[-\frac{(\vec{v} - \vec{u})^2}{2RT}\right],$$
(59)

donde R, D, T,  $\rho$  y  $\vec{u}$  son la constante de los gases, la dimensión espacial, temperatura, densidad y velocidad promedio. Entonces, al sustituir la ecuación 58 en la ecuación 57, sin considerar fuerzas externas:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}), \tag{60}$$

que es la ecuación de la que surge la llamada ecuación BGK-LB.

Para resolver numéricamente la ecuación de Boltzmann debe considerarse un conjunto de velocidades discretas y constantes  $\{\vec{e_i}\}$ , que suele etiquetarse como DnQb (*n* dimensiones y *b* velocidades) (fig. 11), de modo que, para velocidades discretas:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{e_i} \cdot \nabla_r f_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}), \tag{61}$$

donde el subíndice indica una ecuación (y por ende una función de distribución) para cada velocidad discreta. En la librería Palabos se emplea un modelo D3Q19. Naturalmente, también es necesario discretizar la ecuación en tiempo y espacio. En la versión clásica del método de redes de Boltzmann (que es la empleada por la librería Palabos), la discretización se hace con una diferencia hacia en frente en el tiempo y hacía atrás en el espacio, así como un término de colisión atrasado en el espacio (Chen y



Figura 11. Esquema del conjunto D3Q19. Las flechas azules indican las velocidades (note que existe una velocidad nula, que permite representar a las partículas que tienen velocidad igual a cero después de cada colisión) (Zhang, 2011).

Doolen, 1998):

$$f_{i}(\vec{r}, t + \Delta t) - f_{i}(\vec{r}, t) + \alpha [f_{i}(\vec{r}, t) - f_{i}(\vec{r} - \Delta \vec{r}, t)] = -\frac{1}{\tau_{v}} [f_{i}(\vec{r} - \Delta \vec{r}, t) - f_{i}^{eq}(\vec{r} - \Delta \vec{r}, t)], \quad (62)$$

donde  $\Delta t$  es el paso de tiempo,  $\Delta r$  el paso en el espacio y  $\alpha = \Delta t |\vec{e_i}| / \Delta r$ . Si escogemos  $\Delta r = |\vec{e_i}| \Delta t$ , entonces  $\alpha = 1$ . Escogiendo  $\Delta t = 1$  se obtiene la ecuación BGK-LB clásica:

$$f_i(\vec{r} + \vec{e}_i, t+1) = f_i(\vec{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\vec{r}, t) - f_i^{eq}(\vec{r}, t)].$$
(63)

Como  $\Delta r = |\vec{e_i}|$ , es claro que las velocidades discretas deben apuntar hacia los vecinos de la celda y que sus magnitudes deben ser iguales a la distancia entre el centro de la celda central y el centro de la celda a la que apuntan. Por otro lado, asumiendo que la velocidad del fluido en la ecuación 59 es un parámetro pequeño comparado con la velocidad del sonido, la función de distribución de Maxwell-Boltzmann puede ser desarrollada en una serie de Taylor. Entonces, la función de distribución discreta en el equilibrio,  $f_i^{eq}(\vec{x},t)$ , puede escribirse, sin pérdida de información sobre la dinámica del sistema, como una expansión en series a segundo orden de la distribución de Maxwell-Boltzmann (Chen y Doolen, 1998; Chapman y Cowling, 1990):

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c_s^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{u^2}{c_s^2} \right],$$
(64)

donde  $c_s$  es la velocidad del sonido discreta que suele tomarse como  $c_s = 1/\sqrt{3}$ . Los factores de peso  $\omega_i$ 

son propios de la estructura. Para un modelo D3Q19 como la de la figura 11,  $\omega_0 = 1/3$ ,  $\omega_{1-6} = 1/18$ y  $\omega_{7-18} = 1/36$  (He et al., 2019).

La dinámica se lleva a cabo en dos partes. El primer paso es la colisión. Antes de la colisión las partículas se encuentran en el estado  $f_i^{in}$ . En la colisión pasan al estado  $f_i^{out}$  (fig. 12):

$$f_i^{out} = f_i^{in} - \frac{1}{\tau_v} (f_i^{in} - f_i^{eq}).$$
(65)

El segundo paso es el flujo. En el paso de flujo, el sistema avanza un paso en el tiempo (fig. 13). El proceso se repite hasta que el sistema alcanza el equilibrio.

Para el caso de fluidos, para la mayoría de superficies y fluidos puede considerarse que hay una adherencia cuando entran en contacto. Esto implica que la velocidad a lo largo de la superficie de contacto es cero. Numéricamente esto se consigue con una condición de rebote (o bounce-back) que sustituye al paso de colisión de la ecuación 65:

$$f_i^{in}(r,t+1) = f_j^{out}(r,t),$$
(66)

donde la dirección i es opuesta a la dirección j. El operador de colisión es aplicado en las celdas de la fase de grano que se encuentran en contacto con la fase de poro (fig. 14). En el resto de las celdas de la fase de grano no se lleva a cabo dinámica alguna.

La permeabilidad se determina mediante la ley de Darcy:

$$K = \mu \frac{L}{A} \frac{Q}{\Delta P},\tag{67}$$

donde la diferencia de presión  $\Delta P$  se establece en las condiciones de frontera y el caudal Q está dado por:

$$Q = \sum_{j} u_j, \tag{68}$$



Figura 12. Paso de colisión en el método de redes de Boltzmann.



Figura 13. Paso de flujo en el método de redes de Boltzmann.



Figura 14. Ciclo de rebote en el método de redes de Boltzmann.

donde  $u_j$  es componente normal a la superficie de salida de la velocidad promedio en la j-ésima celda unitaria. Los valores de j corren sobre toda la frontera de salida y los valores de  $u_j$  están dados por:

$$\vec{u}_j = \rho_j^{-1} m \sum_i \vec{e}_i f_{i,j},\tag{69}$$

donde m es la masa de las partículas y suele considerarse m = 1.

## Capítulo 4. Modelado y acoplamiento del factor de resistividad y la permeabilidad en medios porosos

Para estudiar las propiedades de flujo y las características de los medios porosos y comprender sus correlaciones, este trabajo se separa en dos partes: (i) establecer las relaciones petrofísicas entre el factor de resistividad, la permeabilidad y la porosidad, y (ii) modelar el flujo a través del medio poroso para obtener valores numéricos de estas propiedades y comparar los resultados con las relaciones petrofísicas existentes y propuestas.

Algunas de las relaciones petrofísicas existentes y sus limitaciones fueron discutidas en el capítulo 2. En la primera sección de este capítulo se propone una relación entre la permeabilidad y la porosidad para el caso de flujo hidráulico y una relación entre el factor de resistividad y la permeabilidad.

Para el modelado de flujo en los medios porosos se emplearon los métodos numéricos que se discuten a detalle en el capítulo 3. El fluido tiene conductividad  $\sigma_W = 5$ , densidad  $\rho_m = 1$  y viscosidad  $\mu = 0.1$  ( $\tau = 0.8$ ), en unidades de celda. En la segunda sección de este capítulo se muestran los resultados numéricos y su comparación con las relaciones petrofísicas.

#### 4.1. Sobre la relación permeabilidad-porosidad y su acoplamiento con el factor de resistividad

En esta sección se plantean las relaciones petrofísicas que se usarán para analizar los resultados numéricos. Se propone una relación permeabilidad-porosidad para el caso hidráulico y, con su equivalente ya conocida para el caso eléctrico, se emplea para establecer una relación entre el factor de resistividad y la porosidad. Finalmente se discute cómo esta última se reduce a algunas relaciones conocidas, especialmente cuando se trata con porosidades bajas.

#### 4.1.1. Sobre la relación permeabilidad-porosidad: modelos simples y ge-neralización

Con el objetivo de establecer una relación rigurosa entre la permeabilidad y la porosidad, se busca que esta parta de consideraciones sólidas. Para esta deducción se hacen tres consideraciones: (i) la relación general parte de una solución analítica propuesta para modelos de tubos capilares de sección arbitraria, (ii) la permeabilidad debe tener los límites correctos cuando la porosidad toma valores extremos, y (iii) el flujo se lleva a cabo predominantemente en un espacio poroso efectivo no necesariamente igual al del caso eléctrico.

### 4.1.1.1. Una relación permeabilidad-porosidad para modelos de tubos rectos de sección arbitraria

Es posible llegar a una relación entre la permeabilidad y la porosidad para un medio que está formado por tubos rectos de sección arbitraria si se conoce el caudal para uno de los tubos. Considere un medio formado por n tubos rectos de sección arbitraria, donde el caudal para una diferencia de presión  $\Delta P$  es Q. El medio tiene una longitud L y un área transversal A. La permeabilidad K está dada por la ley de Darcy:

$$K = \frac{\mu L}{\Delta P A} Q. \tag{70}$$

Por otro lado, si se pone la misma diferencia de presión a los extremos de un tubo de la misma longitud, pero de área transversal  $A_t$ , este tendrá un caudal asociado  $Q_t$ . Entonces, el caudal y la diferencia de presión pueden relacionarse a partir de una permeabilidad  $K_t$  asociada al tubo siguiendo la ley de Darcy:

$$Q_t = \frac{\Delta P A_t}{\mu L} K_t. \tag{71}$$

Para n tubos como el descrito anteriormente, el caudal total  $Q_T$  será simplemente n veces el caudal de un solo tubo:

$$Q_T = nQ_t = \frac{\Delta P nA_t}{\mu L} K_t. \tag{72}$$

Ahora suponga que esos n tubos están dentro de una matriz sólida como la de la figura 1, que tiene longitud L y una área transversal total A. Ese es justo el medio descrito al principio y cuya permeabilidad está dada por la ecuación 70. Entonces

$$Q = Q_T = \frac{\Delta P n A_t}{\mu L} K_t.$$
(73)

Sustituyendo 73 en 70:

$$K = K_t \frac{nA_t}{A}.$$
(74)

Como son tubos rectos,

$$\phi = \frac{nA_t}{A},\tag{75}$$

de modo que

$$K = K_t \phi. \tag{76}$$

La ecuación 76 es la forma general de la permeabilidad para un sistema de tubos rectos de cualquier sección. Los valores de  $K_t$  pueden encontrarse al escribir el caudal de un tubo de determinada sección

en la forma de la ecuación 71.

Si se considera que los tubos tienen una tortuosidad  $\tau$ , entonces el caudal asociado a un tubo de longitud  $L_a$  es:

$$Q_t = \frac{\Delta P A_t}{\mu L_a} K_t,\tag{77}$$

de modo que

$$K = K_t \frac{L}{L_a} \frac{nA_t}{A}.$$
(78)

En este caso la porosidad está dada por:

$$\phi = \frac{nA_t}{A} \frac{L_a}{L},\tag{79}$$

de modo que la permeabilidad de un medio formado por tubos de sección arbitraria con tortuosidad es:

$$K = \frac{K_t}{\tau}\phi.$$
 (80)

Para el caso de flujo de fluidos incompresibles en el régimen laminar, existen expresiones analíticas para el caudal asociado a tubos con secciones de geometrías simples. La más conocida es la fórmula de Poiseuille para un tubo de sección circular (Stokes, 2007):

$$Q_t = \frac{\Delta P A_t}{\mu L} \frac{r^2}{8},\tag{81}$$

donde r es el radio del círculo. Comparando con la ecuación 71, tenemos que

$$K_t = \frac{r^2}{8},\tag{82}$$

lo que nos lleva a la fórmula de Kozeny.

Para un canal de sección rectangular con dimensiones  $h \neq b$  (Boussinesq, 1868):

$$Q_t = \frac{\Delta P A_t}{\mu L} \left[ \frac{h^2}{12} - \frac{16h^3}{\pi^5 b} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^5} \frac{\cosh(\beta_n) - 1}{\sinh(\beta_n)} \right],$$
(83)

donde

$$\beta_n = \frac{(2n-1)\pi b}{h}.\tag{84}$$

Entonces,

$$K_t = \frac{h^2}{12} - \frac{16h^3}{\pi^5 b} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^5} \frac{\cosh(\beta_n) - 1}{\sinh(\beta_n)}.$$
(85)

Dada la naturaleza rectangular de la malla de discretización utilizada en el algoritmo de modelado, los tubos de sección rectangular pueden ser modelados sin pérdida de precisión en cuanto a geometría. Por lo tanto, resulta conveniente emplear este tipo de tubos para comprobar los resultados que provee el algoritmo. Se construyeron medios cúbicos de 100 celdas por lado, tamaño de muestra que se consideró suficiente al menos para modelos tan simples como los de tubos capilares, y que resultó accesible en cuanto a tiempo de cómputo para realizar algunas decenas de experimentos numéricos. Cada muestra contiene n tubos con secciones de distintas dimensiones: los modelos T1 (8 × 8), T2 (6 × 12) y T3 (5 × 20). Estas dimensiones fueron escogidas de modo que cambie la forma y el tamaño de la sección de los tubos, pero se conserve el coeficiente  $1/2S_V^2$  de la relación de Kozeny-Carman (ecuación 19), lo que permite observar la influencia de la geometría de los poros en la calidad de esta aproximación. En las gráficas 15(a) y 15(b) se muestran los resultados numéricos y los valores teóricos de  $F_R$  y K como funciones de  $\phi$  para estos modelos. Para los valores teóricos se emplearon la ecuación 5 ( $F_R = \phi^{-1}$ ) y la ecuación 76 para las relaciones  $F_R - \phi$  y  $K - \phi$ , respectivamente. Puede observarse que los valores numéricos concuerdan con los teóricos.

También es posible comparar el coeficiente  $K_t$  para secciones rectangulares de la ecuación 85, el cual es exacto, con el coeficiente  $1/2S_V^2$  de la relación de Kozeny-Carman (ecuación 19), el cual es una aproximación. Esto puede darnos información sobre la naturaleza del factor de forma de poro que se añade como factor de corrección en la ecuación 21. En la figura 15(c) se muestra la comparación cuando cambia la proporción b/h de los lados de la sección y en la figura 15(d) cuando la sección es cuadrada y cambia su tamaño (b = h). De estas gráficas comparativas puede observarse que la aproximación  $1/2S_V^2$  tiene un comportamiento similar a  $K_t$ , donde la diferencia depende tanto de la forma como del tamaño de la sección del tubo. Entonces, podemos decir que el factor de forma de poro que se emplea para mejorar las aproximaciones de la fórmula de Kozeny-Carman es función, al menos, de la forma y el tamaño de los poros.

Experimentando con estos modelos de tubos rectos de sección rectangular se encontraron también algunos detalles a tener en cuenta sobre el desempeño de la librería empleada para el modelado hidráulico (anexo A).

También existen expresiones para el caudal para secciones triangulares (Boussinesq, 1868; Proudman, 1914) y elípticas (Boussinesq, 1868). También existen soluciones para casos más específicos, como



**Figura 15.** (a)  $1/F_R$  vs  $\phi$  y (b) K vs  $\phi$  para los modelos de tubos de sección rectangular T1, T2 y T3, y gráficas comparativas de  $K_t$  y  $1/2S_V^2$  como funciones (c) de la forma (b/h) y (d) del tamaño (b = h) de la sección.

secciones en forma de caracol, secciones anulares entre elipses homofocales y secciones anulares entre círculos no concéntricos, entre otros (Drazin y Riley, 2006). Todas ellas pueden escribirse en la forma de la ecuación 71 y tienen en común que sus permeabilidades son funciones del tamaño y la forma de la sección.

De las expresiones del factor de resistividad y la permeabilidad para el caso de tubos capilares puede distinguirse que las relaciones factor de resistividad-porosidad y permeabilidad-porosidad son distintas, en este caso por la presencia del factor de  $K_t$ . ¿A qué podemos atribuir esta diferencia? Mediante el modelado se obtienen los campos de velocidad de flujo para el caso hidráulico y densidad de corriente para el caso eléctrico. Como el modelado de flujo de fluido se hace en el régimen casi incompresible, la velocidad se puede considerar proporcional a la densidad de flujo de fluido. Entonces podemos comparar la velocidad y la densidad de corriente, al menos cualitativamente. En la figura 16 se muestra un corte de dichos campos para un medio que consta únicamente de un tubo de sección circular. Puede observarse que la densidad de corriente es uniforme a lo largo y ancho de todo el tubo, mientras que la velocidad de flujo decrece conforme nos acercamos a las paredes del tubo. Esto es debido a que las partículas del fluido se adhieren a las paredes y la fricción entre ellas hace que las partículas adheridas frenen a sus vecinas, provocando este efecto de ralentización, que disminuye conforme nos alejamos de la pared. Esta es una diferencia importante entre los fenómenos de transporte eléctrico e hidráulico. Dado que este fenómeno está relacionado con el contacto del fluido con la superficie del poro, esto haría que la permeabilidad no solo dependa del volumen de los tubos, sino también de la forma y tamaño de sus paredes. De ahí la aparición del factor  $K_t$ .

Dada la importancia del efecto de la adherencia del fluido a las paredes de los poros, ¿de qué forma podría separarse este efecto que distingue el flujo eléctrico e hidráulico? Una forma de describir los campos vectoriales es a partir de su rotacional y su divergencia. En la formulación de este trabajo, la divergencia de los campos de densidad de corriente eléctrica y de velocidad de flujo se asumen nulos (ver capítulo 3). Por otro lado, el rotacional de los campos en el ejemplo simple de la figura 16 resulta diferente en cada caso. En el caso de flujo eléctrico, el rotacional es nulo debido a que el campo es



Figura 16. Corte de los campos de (a) densidad de corriente y (b) velocidad de flujo a lo largo de un medio que consta de un tubo de sección circular.



Figura 17. Perfil de Poiseuille que ilustra la aparición de un rotacional como resultado de la adherencia (tomado de https://es.wikipedia.org/wiki/Rotacional).

uniforme; mientras que en el caso hidráulico existe un rotacional no nulo que se debe al cambio radial de la magnitud de la velocidad, como se muestra en la figura 17. Al rotacional del campo de velocidades se le conoce como vorticidad. Como puede observarse en el llamado perfil de Poiseuille, una vorticidad aparece como resultado de la adherencia, lo que se ilustra con ruedas de paletas infinitamente pequeñas, que tenderían a girar en todas partes a excepción del eje central del tubo. Entonces, el rotacional podría ayudar a distinguir el efecto de la adherencia en el caso del flujo hidráulico. Más adelante se muestra el rotacional de los campos de flujo para un medio poroso más complejo (capítulo 5).

# 4.1.1.2. Generalización de la relación permeabilidad-porosidad: límites de la permeabilidad y porosidad efectiva

Como se ha discutido, en el caso hidráulico la adherencia del fluido a las paredes afecta la velocidad de flujo. Pero, ¿qué ocurre cuando la superficie de contacto disminuye? En la figura 18(a) se muestra una sección de un medio formado por tubos se sección circular. En este medio cada tubo mantiene su superficie de contacto y, por lo tanto, su permeabilidad obedece la ecuación 76. En la figura 18(b) los que originalmente eran tubos de sección circular se sobrepusieron y su superficie de contacto se ve reducida. Este ya no es un sistema de tubos y ya no obedece la misma ecuación. Aunque no se tiene la solución exacta para este caso, si sabemos que en el límite cuando la porosidad tiende a uno (cuando la superficie de contacto se reduce) la permeabilidad tiende a infinito. Este valor extremo para la permeabilidad es uno de los criterios que se consideran al momento de proponer una relación permeabilidad-porosidad. Por similitud con el caso hidráulico podría ser conveniente escribir la relación entre la permeabilidad son ambos medidas de la "resistencia" que el medio pone al flujo y ambos dependen de una potencia negativa de la porosidad. Entonces,

$$K^{-1} = G_h \phi^{-1}, \tag{86}$$



Figura 18. Corte de un medio poroso formado por tubos de sección circular (a) no sobrepuestos y (b) sobrepuestos.

donde  $G_h$  es una función de la estructura interna del medio poroso. Para el caso de tubos rectos,  $G_h = K_t^{-1}$ . Entonces tenemos que  $K^{-1} \rightarrow 0$  cuando  $\phi \rightarrow 1$ . La forma más simple de satisfacer este límite es agregando una constante conveniente a la ecuación:

$$K^{-1} = G_h \phi^{-1} - G_h. \tag{87}$$

En los modelos de tubos rectos el flujo no enfrenta obstáculos en la fase porosa. ¿Cómo afectaría al flujo de fluido la presencia de obstáculos? Observe, por ejemplo, la figura 19. Para establecer una relación permeabilidad-porosidad en casos más generales debe considerarse este factor. En el caso de flujo de corriente eléctrica, la presencia de obstáculos produce regiones de estancamiento, como sugirió Rosales en sus estudios de la relación factor de resistividad-porosidad (Perez-Rosales, 1982). Es razonable considerar que este efecto de estancamiento también tiene lugar en el flujo de fluidos. Entonces, una relación permeabilidad-porosidad debería estar en términos de una porosidad efectiva  $\phi_h$ , no necesariamente igual a la porosidad efectiva del caso eléctrico. Entonces,

$$K^{-1} = G_h \phi_h^{-1} - G_h. \tag{88}$$

La porosidad efectiva  $\phi_h$  para el caso hidráulico también debe satisfacer las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned}
\phi_h &\leq \phi \\
\phi_h &= 1 \quad cuando \quad \phi = 1 \quad \cdot \\
\phi_h &= 0 \quad cuando \quad \phi = 0
\end{aligned}$$
(89)

Entonces,

$$\phi_h = \phi^{m_h},\tag{90}$$



Figura 19. Tubo con obstáculos.

donde  $m_h \ge 1$  sería el exponente de entrampamiento para el caso hidráulico. Sustituyendo 90 en 88 se obtiene una relación permeabilidad-porosidad:

$$K^{-1} = G_h \phi^{-m_h} - G_h.$$
(91)

La relación 91 satisface las condiciones:

$$\begin{cases} K^{-1} \to 0 \quad cuando \quad \phi \to 1 \\ K^{-1} \to \infty \quad cuando \quad \phi \to 0 \end{cases}$$
(92)

#### 4.1.2. Relación factor de resistividad-permeabilidad y su reducción para porosidades bajas

Retomando la formula de Rosales que relaciona el factor de resistividad con la porosidad:

$$F_R = G\phi^{-m} + (1 - G), \qquad (15 \text{ revisitada})$$

y considerando la ecuación 91 que relaciona la permeabilidad y la porosidad, puede obtenerse una relación entre la permeabilidad y la porosidad:

$$K^{-1} = b[F_R - (1 - G)]^a - G_h,$$
(93)

donde  $a = m_h/m$  y  $b = G_h/G^{m_h/m}$ .

Como se mencionó en el capítulo 2, cuando G toma valores cercanos a uno,  $G\phi^{-m} \gg (1 - G)$  y la fórmula de Rosales se reduce a la forma:

$$F_R = G\phi^{-m}$$
. (17 revisitada)

Se ha encontrado también que, usualmente, cuando el valor de G disminuye, el valor de m aumenta (Perez-Rosales, 1982), de modo que para porosidades lo suficientemente pequeñas aun se cumpliría que  $G\phi^{-m} \gg (1-G)$ , incluso si G no es cercano a uno. En el caso hidráulico, para porosidades bajas se tiene que  $G_h\phi^{-m_h} \gg G_h$ . Entonces:

$$K^{-1} = G_h \phi^{-m_h}, (94)$$

es decir, la relación  $K - \phi$  propuesta toma una forma como la de la ecuación 22 cuando se trata con porosidades bajas. Esta a su vez se reduce a la relación de Kozeny-Carman (ecuación 21) si se considera

 $m_h = 1$  y  $G_h = cS_v^2\tau$ . En ambos casos podría decirse que la forma de las relaciones petrofísicas para porosidades bajas consiste en despreciar el término independiente de  $\phi$  que hace que las relaciones tomen los valores correctos cuando las porosidades son altas y su valor se acerca a uno. De las ecuaciones 17 y 94 se obtiene una relación  $F_R - K$  para bajas porosidades:

$$K^{-1} = bF_R^a. (95)$$

Escribiendo las relaciones anteriores en forma logarítmica pueden obtenerse relaciones lineales entre los logaritmos de las propiedades de las rocas. Para el caso eléctrico:

$$log(F_R) = -mlog(\phi) + b_e,$$
(96)

donde  $b_e = log(G)$ , y para el caso hidráulico:

$$log(K^{-1}) = -m_h log(\phi) + b_h \tag{97}$$

donde  $b_h = log(G_h)$ . Para el acoplamiento eléctrico-hidráulico:

$$log(K^{-1}) = alog(F_R) + b_l,$$
(98)

donde  $b_l = log(G_h/G^{m_h/m})$ . Estas relaciones para porosidades bajas pueden ser suficientes para muchos casos, ya que la mayoría de las rocas suelen tener porosidades entre 0.1 y 0.3.

La relación de la ecuación 93 se reduce a otras relaciones conocidas entre la permeabilidad y la porosidad. Para porosidades bajas toma la forma de la ecuación 95 que tiene la forma de la ecuación 25 con  $b \propto 1/S_V^2$ . En el caso donde a = 1, es decir  $m_h = m$ , se recupera la ecuación 24.

#### 4.1.3. Sobre el significado de los parámetros m, $m_h$ , G y $G_h$ en las relaciones petrofísicas

Como se expuso en el capítulo 2, existen muchas relaciones petrofísicas en la literatura y la mayoría de ellas involucran parámetros relacionados con la distribución porosa de las rocas. En el caso de la ecuación 91 propuesta para la relación  $K - \phi$  y la ecuación de Rosales (ecuación 15) empleada para la relación  $F_R - \phi$ , aparecen los pares de parámetros ( $G_h, m_h$ ) y (G, m), respectivamente. ¿Qué significado tienen estos parámetros?

De la definición de porosidad efectiva para el caso eléctrico (ecuación 13) puede deducirse que m es

un parámetro relacionado con la porción de volumen de poro que permite el flujo de corriente eléctrica (Perez-Rosales, 1982). De la misma definición de porosidad efectiva podemos decir que el valor de m cambia la "rapidez" con la que la porosidad efectiva aumenta, es decir, m nos dice qué tan rápido desaparecen los obstáculos cuando la porosidad aumenta. El valor mínimo de m es 1 y este ocurre cuando no hay zonas de estancamiento, es decir, cuando el medio es muy simple. Es de esperarse que el valor de m sea mayor cuanto mayor sea la complejidad del espacio poroso. El parámetro  $m_h$  tiene un significado similar, pero ahora considerando flujo de fluido.

El parámetro G está relacionado con la geometría del espacio poroso (Perez-Rosales, 1982). En la relación  $F_R - \phi$  para el modelo simple de tubos con tortuosidad (ecuación 7 aparece la tortuosidad  $\tau$ , definida como se muestra en la ecuación 6. Suponiendo que la tortuosidad aparece también (con una definición más general) en el caso de medios más complejos, entonces podemos decir que G está relacionado al menos con la tortuosidad. El parámetro G toma valores diferentes para modelos simples donde m = 1 (por ejemplo, 1 para modelos de tubos rectos y 1.5 para sistemas de esferas dispersas). Para medios más complejos donde m > 1, se ha observado que el valor de G disminuye cuando el valor de m aumenta, es decir, el valor de G es menor cuanto mayor es la complejidad del espacio poroso (Perez-Rosales, 1982).

El parámetro  $G_h$  también está relacionado con la geometría interna del medio poroso. La tortuosidad aparece también en el caso de flujo hidráulico, por lo que  $G_h$ , al igual que G, estaría relacionado con este parámetro. Para modelos de tubos rectos donde  $m_h = 1$  se ha demostrado que los valores de  $G_h$ dependen de la forma y el tamaño de la sección de los tubos. En general podemos esperar que  $G_h$ dependa al menos de la tortuosidad y de la forma y el tamaño de los poros. Algunas veces el tamaño y la forma de poro se absorben en parámetros menos abstractos como diámetro equivalente y esfericidad, respectivamente.

#### 4.2. Aplicación de las relaciones petrofísicas a resultados del modelado en medios porosos

En esta sección se muestran resultados numéricos de las propiedades de algunas muestras de medios porosos y se aplican las relaciones petrofísicas discutidas en la sección anterior, haciendo ajustes numéricos para obtener los valores de los parámetros que se encuentran en estas relaciones.

#### 4.2.1. Medios porosos generados numéricamente: paquetes de esferas

Modelos simples como los de paquetes de esferas pueden generarse mediante un algoritmo y permiten tener el control sobre el tamaño y la cantidad de esferas a generar. Esto permite crear una buena cantidad

de muestras de diferente porosidad, pero cuyos poros tengan geometrías similares. En estos modelos las esferas pueden tener diámetros iguales o que siguen alguna distribución y pueden o no estar superpuestas (Martys et al., 1994).

Para este trabajo se emplearon dos conjuntos de paquetes de esferas que pueden estar superpuestas (lo que permite alcanzar valores más bajos de porosidad): el modelo E1 de paquetes de n esferas del mismo diámetro y el modelo E2 de paquetes de n esferas cuyos diámetros siguen una distribución normal logarítmica (logarítmica para evitar diámetros negativos). En ambos casos la porosidad se varía cambiando el valor de n. Para el modelo E1 se construyeron paquetes cúbicos de 100 unidades de celda por lado con esferas de 20 celdas de diámetro. Para el modelo E2 se construyeron paquetes cúbicos de 120 celdas por lado, con esferas de diámetros cuya distribución tiene una media de 1 y desviación estándar de 0.3 (los diámetros son normalizados para que el diámetro promedio sea de 20 unidades de celda). En ambos casos, el número de esferas n va de 100 a 180 en pasos de 10. Los paquetes con n = 100 para ambos modelos se muestran en la figura 20 con fines ilustrativos.

Los paquetes de esferas fueron construidos con el algoritmo de Baranau y Tallarek (2014). Como sugiere Baranau, los paquetes se generan en tres pasos: (i) se crea una distribución de Poisson como configuración inicial, (ii) se aplica un algoritmo de sesgo forzado (Mościński et al., 1989; Bezrukov et al., 2002) para incrementar la densidad y (iii) se aplica el algoritmo de Lubachevsky–Stillinger, que funciona para densidades altas Lubachevsky (1991). Este último simula las colisiones elásticas de esferas sólidas dentro de una caja al vacío y en ausencia de fuerzas externas. Inicialmente se da a las esferas los diámetros mínimos para que no se superpongan, manteniendo las proporciones dadas por el usuario (si las esferas no son del mismo tamaño) (Baranau et al., 2016). A cada paso de tiempo las esferas crecen, lo que



Figura 20. Modelo de paquete de esferas con 100 esferas (a) del mismo diámetro y (b) de diámetros con distribución normal logarítmica.



Figura 21. (a)  $F_R$  vs  $\phi$ , (b)  $K^{-1}$  vs  $\phi$  y (c)  $K^{-1}$  vs  $F_R$  para los modelos E1 y E2.

 Tabla 1. Parámetros estructurales para modelos de paquetes de esferas.

Modelo	G	m	$G_h$	$m_h$
E1	0.3790	2.3241	0.1525	2.9398
E2	0.3534	2.3735	0.1777	2.7762

es equivalente a que la caja se contraiga, incrementando la presión en las paredes. Cuando la presión, o más específicamente el factor de compresibilidad (Skoge et al., 2006), alcanza cierto límite, el algoritmo termina. Si bien, este algoritmo está diseñado para esferas que no se superponen, puede llevarse al caso de esferas superpuestas al redimensionar las esferas.

Las gráficas de las relaciones  $F_R - \phi$ ,  $K - \phi$  y  $K - F_R$  para los modelos E1 y E2 se muestran en la figura 21. Se hizo un ajuste de los datos siguiendo las ecuaciones 15, 91 y 93, respectivamente. También se muestran las curvas correspondientes a las ecuaciones 96, 97 y 98, respectivamente, que representan las aproximaciones para bajas porosidades. Los valores obtenidos para los parámetros de los modelos se

muestran en la tabla 1. Como puede observarse en las figuras 21(a) y 21(b), la fórmula de Rosales para el caso eléctrico (ecuación 15) y la fórmula de la ecuación 91 se ajustan, con cierto margen de error, a los valores numéricos obtenidos en todo el dominio de porosidad, mientras que las correspondientes aproximaciones para bajas porosidades logran ajustarse a los datos cuando la porosidad es menor a aproximadamente 0.3 para el caso eléctrico y 0.4 para el caso hidráulico.

Entonces, para el caso de paquetes de esferas, cuando las porosidades son altas las relaciones generales se ajustan mejor a los datos, mientras que las relaciones para porosidades bajas logran ajustarse a los datos numéricos cuando la porosidad es menor a un valor entre 0.3 y 0.4. Si consideramos este como un límite razonable para otros medios porosos, se esperaría que estas últimas sean válidas para rocas con porosidades bajas.

#### 4.2.2. Medio poroso sintético: paquete de esferas

El primer medio a estudiar del cuál se obtuvo una imagen digital mediante tomografía es un medio sintético que consiste en un paquete de esferas. La tomografía de una muestra puede dividirse en partes más pequeñas o submuestras para hacer el modelado, comúnmente para que estas sean más tratables computacionalmente (Andra et al., 2013b). Estas submuestras suelen tener diferencias en cuanto a porosidad y pueden darnos una distribución lo suficientemente amplia para hacer un ajuste. Esto es útil ya que el estudio de medios reales está sujeto a la disponibilidad de muestras. Como se mencionó antes, las imágenes digitales de las muestras fueron proporcionadas por personal del Sistema de Laboratorios Especializados (SLE) del Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada (CICESE). Esta muestra consta de esferas de  $700\mu m$  de diámetro. La tomografía tiene una resolución de  $16\mu m$  y dimensiones (en píxeles) de  $1570 \times 1570 \times 500$ . De esta se tomaron submuestras cúbicas de 250 píxeles.



Figura 22. Submuestra de un paquete de esferas real.



**Figura 23.** (a)  $log(F_R)$  vs  $log(\phi)$ , (b)  $log(K^{-1})$  vs  $log(\phi)$  y (c)  $log(K^{-1})$  vs  $log(F_R)$  para submuestras de un paquete de esferas real.

Dirección	G	m	$G_h$	$m_h$
x	1.3316	1.2484	0.0459	2.5929
У	1.0761	1.4869	0.0159	3.7448
Z	1.2176	1.3496	0.0115	4.0704

Tabla 2. Parámetros estructurales para un paquete de esferas real.

Una de estas submuestras se presenta en la figura 22.

Los resultados se muestran en las gráficas de la figura 23. El modelado se realizó dirigiendo el flujo en las tres direcciones x, y y z para observar la anisotropía, y para cada dirección se obtuvieron conjuntos diferentes de valores para las parámetros estructurales. Dado el rango de porosidades obtenido, se hizo un ajuste de los datos siguiendo las aproximaciones para bajas porosidades. Los valores obtenidos para los parámetros estructurales del medio se muestran en la tabla 2. Con la submuestras consideradas se obtuvo

apenas un rango estrecho de porosidades, entre 0.38 y 0.40. Aun en este pequeño rango de porosidades, los valores del factor de resistividad (figura 23(a)) y la permeabilidad (figura 23(b)) mostraron una variación sistemática para los distintos valores de porosidad. Puede observarse en las gráficas que las relaciones lineales (lineas continuas en las gráficas) logran describir el comportamiento general de las propiedades del medio poroso: tanto  $K^{-1}$  como  $F_R$  disminuyen con la porosidad. De acuerdo a las rectas obtenidas mediante el ajuste se observa una anisotropía en el medio:  $F_R$  es menor en la dirección x, luego en la dirección z y es mayor en la dirección y; casi la misma tendencia se sigue en el caso de  $K^{-1}$ , pero las diferencias entre las rectas son más notorias, sobre todo la que corresponde a la dirección x. En la figura 23(c) se observa que  $log(F_R)$  y  $log(K^{-1})$  aumentan de manera proporcional, y de la ecuación 98 y los valores de la tabla 2 podemos ver que  $log(K^{-1})$  crece más rápido que  $log(F_R)$ .

#### 4.2.3. Medio poroso natural: Dolomita de Cerro Prieto

El siguiente caso de estudio es un núcleo de dolomita proveniente del campo geotérmico de Cerro Prieto, en México. La imagen tiene dimensiones de  $1204 \times 1204 \times 1101$ . De esta se tomaron submuestras cúbicas de 400 píxeles. Una de estas submuestras se presenta en la figura 24.

Los resultados se muestran en las gráficas de la figura 25. Los valores obtenidos para los parámetros estructurales del medio se muestran en la tabla 3. Con la submuestras consideradas se obtuvo un rango de porosidades entre 0.12 y 0.19, considerablemente más amplio que el caso del paquete de esferas. En las figuras 25(a) y 25(b) los valores del factor de resistividad y la permeabilidad, respectivamente, disminuyen con la porosidad. Respecto a la anisotropía, en ambas propiedades las rectas de las direcciones x y y del flujo son similares, mientras que en la dirección z es notablemente distinta; esta diferencia es más notoria en el caso de hidráulico. En la figura 25(c) se observa que  $log(F_R)$  y  $log(K^{-1})$  aumentan



Figura 24. Submuestra de un núcleo de dolomita.



Figura 25. (a)  $log(F_R)$  vs  $log(\phi)$ , (b)  $log(K^{-1})$  vs  $log(\phi)$  y (c)  $log(K^{-1})$  vs  $log(F_R)$  para submuestras de un núcleo de dolomita.

Dirección	G	m	$G_h$	$m_h$
×	0.0375	3.8257	0.0010	5.1064
У	0.0359	3.8543	0.0007	5.3049
z	0.0775	3.4635	0.0116	3.8608

Tabla 3. Parámetros estructurales para un núcleo de dolomita.

de manera proporcional, y  $log(K^{-1})$  crece más rápido que  $log(F_R)$ , lo que se refleja en también en los valores de la tabla 3, donde los valores de  $m_h$  son mayores que los valores de m.

Algunas tendencias pueden observarse en los parámetros estructurales de las muestras (tablas 2 y 3). Como se mencionó en los dos casos anteriores, la anisotropía parece ser más notoria en el caso hidráulico: los valores de  $m_h$  y  $G_h$  varían más en las diferentes direcciones de flujo en comparación con los valores de m y G. Esto nos lleva a la hipótesis de que el flujo de fluido es más sensible a la anisotropía que el flujo de corriente. Otra característica observada en los casos de estudio es que  $log(K^{-1})$  crece más rápido que  $log(F_R)$ , es decir, que  $m_h > m$  en todos los casos. Esto también se observa en los valores de la tabla 1 para el caso de paquetes numéricos de esferas. Esto significa que la porosidad efectiva para el caso hidráulico (ecuación 90) es menor que la porosidad efectiva para el caso eléctrico (ecuación 13), es decir, ocurre un mayor estancamiento en el caso hidráulico. Esto podría estar relacionado con la viscosidad del fluido, que provocaría que la velocidad del fluido en regiones de flujo se vea afectada por las bajas velocidades en las regiones de estancamiento. Por último, como se mencionó antes, para algunos pares de valores (G, m) se ha notado que valores mayores de m implican valores menores de G(Perez-Rosales, 1982). Es los casos estudiados esta relación se ha mantenido y también se ha observado la misma tendencia para los pares ( $G_h, m_h$ ). Esto nos lleva a considerar que estos pares de parámetros conservan alguna relación entre si.

## Capítulo 5. Análisis de los campos de flujo eléctrico e hidráulico en paquetes de esferas uniformes

Al hacer simulación de flujo en medios porosos pueden determinarse no solo las propieda-des equivalentes de los materiales, sino también la distribución espacial de los campos que describen el flujo. En años recientes ha habido esfuerzos por aprovechar esta información adicional que provee el modelado para comprender la relación entre la distribución espacial y estadística de los campos y la geometría del espacio poroso (Rong et al., 2013; Dong et al., 2016; Aramideh et al., 2018). En esta sección se analiza la distribución espacial y estadística de los campos de densidad de corriente eléctrica y velocidad de flujo para los casos de flujo eléctrico e hidráulico, respectivamente, en medios porosos formados por esferas monodispersas (del mismo diámetro). Para ello se emplearon los paquetes de esferas del modelo E1, empleado y descrito en el capítulo 4.

Para el caso eléctrico, en la figura 26 se muestra la densidad de probabilidad de la densidad de corriente para muestras de diferentes porosidades del modelo E1. De la figura 26(b) se pueden notar algunas características en la distribución de la componente x de la densidad de corriente, esto es, la densidad de corriente en la dirección del campo: (i) hay un pico que, para porosidades bajas, comienza cerca de  $J_x/J_{avg} = 0$  y parece desplazarse hacia  $J_x/J_{avg} = 1$  conforme la porosidad aumenta; (ii) para porosidades muy altas o muy bajas la distribución es más estrecha, mientras que para porosidades medias la distribución más ancha; (iii) cuando el pico está cerca de  $J_x/J_{avg} = 0$ , hay un decaimiento rápido a la izquierda y un decaimiento gradual a la derecha, mientras que cuando el pico está cerca de  $J_x/J_{avg} = 1$  el comportamiento es opuesto.

De la figura 26(c) que corresponde a la densidad de corriente en la dirección y, que es una componente transversal al campo, puede observarse que la distribución: (i) es simétrica respecto al cero y decae rápidamente, y (ii) es más ancha para porosidades bajas. Los dos puntos anteriores implican, respectivamente, que: (i) dado que en la mayor parte del espacio las componentes transversales del flujo son cercanas a cero, podemos considerarlas despreciables respecto a la componente en la dirección del flujo; (ii) las componentes transversales de la densidad de corriente cobran mayor importancia cuando la porosidad es baja. Dado que la componente dominante del flujo es la que está en la dirección del campo, la distribución de la magnitud de la densidad de corriente es muy similar a la distribución de la componente x, como se observa en la figura 26(a).

Para el caso hidráulico, en la figura 27 se muestra la densidad de probabilidad de la velocidad para



**Figura 26.** Densidad de probabilidad de la densidad de corriente eléctrica para muestras de diferentes porosidades del modelo E1: (a) magnitud, (b) componente x (dirección del campo), (c) componente y (transversal al flujo).

muestras de diferentes porosidades del modelo E1. Las distribuciones de las velocidades en el caso eléctrico muestran características similares a las del caso eléctrico.

Tomando como referencia las gráficas de las figuras 26(a) y 27(a), donde se muestra la distribución estadística de la magnitud de la densidad de corriente eléctrica y de la velocidad de flujo, respectivamente, puede notarse que en ambos casos hay un pico que comienza cerca del cero y se desplaza hacia el uno conforme la porosidad aumenta. Esta transición parece ser más "lenta" en el caso hidráulico que en el caso eléctrico. En este último, el punto más alto de la curva se aleja del cero notoriamente desde la curva para  $\phi = 0.31$ , mientras que en el caso hidráulico es hasta  $\phi = 0.70$  que esto ocurre, valor para el cual la distribución de corriente eléctrica ya se encuentra centrada en uno.

El hecho de que la transición hacia un flujo uniforme sea más lenta en el caso hidráulico que en el caso



**Figura 27.** Densidad de probabilidad de la velocidad de flujo para muestras de distintas porosidades del modelo E1: (a) magnitud, (b) componente x (dirección del campo) y (c) componente y (transversal al flujo).

eléctrico puede estar relacionado con la tendencia de la porosidad efectiva de crecer más lento en el caso hidráulico que en el caso eléctrico. Una forma más cuantitativa de medir esta transición puede ser, por ejemplo, midiendo la desviación estándar, que cabria esperar que sea menor cuanto más se acerque el pico a la unidad y cuanto más pronunciado sea. Esta tendencia se muestra en las gráficas de la figura 28, donde se observa que el decaimiento es más lento en el caso hidráulico.

Los fenómenos de flujo eléctrico e hidráulico también pueden compararse a partir de la distribución espacial de las magnitudes de los campos vectoriales que los describen. En la figura 29 se muestran cortes de las magnitudes y direcciones de los campos de densidad de corriente y velocidad para dos paquetes de esferas del modelo E1 con porosidades  $\phi = 0.31$  y  $\phi = 0.70$ . En el caso de flujo de fluido (fig. 29(b) y 29(d)), tres zonas típicas pueden identificarse (Rong et al., 2013): (i) una zona de baja



Figura 28. Variación de la desviación estándar respecto a la porosidad para (a) la densidad de corriente eléctrica y (b) la velocidad de flujo para muestras de diferentes porosidades del modelo E1.

velocidad alrededor de las partículas de la fase sólida, (ii) una zona de alta velocidad cerca del centro de las zonas estrechas de poro, y (iii) una zona de recirculación con velocidades negativas que forman una "estela" detrás de las partículas sólidas. En el flujo eléctrico (fig. 29(a) y 29(c)) pueden identificarse: (i) una zona de baja densidad de corriente que se acentúa formando estelas al frente y detrás de las esferas sólidas y (ii) una zona de alta densidad de corriente hacia el centro de los poros.

Algunas características de la distribución de los campos de flujo en el espacio poroso muestran cualitativamente la transición de ambos procesos hacia un flujo uniforme conforme la porosidad aumenta. Tomando como ejemplo los campos de las figuras 29, puede notarse que para un medio con porosidad  $\phi = 0.31$  la magnitud de densidad de corriente eléctrica (fig. 29(a)) presenta valores relativamente altos (que aparecen en color verde) en una porción considerable del espacio poroso, mientras que en el caso hidráulico (fig. 29(b)) el campo presenta velocidades cercanas a cero en la mayor parte del espacio. Por otro lado, para un medio con porosidad  $\phi = 0.70$  el campo de densidad de corriente (fig. 29(c)) parece más uniforme y con magnitudes relativamente altas, mientras que en el campo de velocidad de flujo (fig. 29(d)) hay un rango más amplio de velocidades en todo el espacio poroso.

Además de la distribución estadística y espacial de las magnitudes de la densidad de corriente eléctrica y de la velocidad de flujo, es posible también comparar sus direcciones. Para ello puede determinarse el ángulo  $\theta$  entre los vectores de estos campos. En la figura 30 se muestra un corte de la magnitud del producto vectorial de los campos normalizados,  $\hat{J} \times \hat{v} = sin\theta$ , para un paquete de esferas del modelo E1 con  $\phi = 0.70$ . La magnitud del producto vectorial va desde 0 hasta aproximadamente 0.3 en la mayor parte del espacio, lo que corresponde a ángulos desde 0 hasta 17 grados. Valores más altos



**Figura 29.** Magnitudes y direcciones de los campos de (a,c) densidad de corriente eléctrica y (b,d) velocidad de flujo en el plano z = 50 para un paquete de esferas del modelo E1 con  $\phi = (0.31, 0.70)$ .

pueden encontrarse en algunas regiones del espacio que coinciden aproximadamente con zonas donde la magnitud de los campos es relativamente baja. Esto sugiere que en las zonas donde el flujo tanto eléctrico como hidráulico se ve obstruido, los campos tienden a tomar direcciones distintas.

La distribución espacial de los campos de densidad de corriente eléctrica y velocidad de flujo es compleja incluso en un modelo ideal de esferas. Existen zonas de baja velocidad que pueden atribuirse, como se ha discutido a lo largo de este trabajo, a la existencia de zonas de estancamiento tanto en el caso eléctrico como en el caso hidráulico, y a la adherencia del fluido a las paredes de los poros en el caso hidráulico. Este último efecto cobra importancia desde los casos más simples, como los de arreglos de tubos rectos. Antes se mencionó la posibilidad de que el rotacional de los campos de flujo pudiera manifestar diferencias entre el flujo eléctrico e hidráulico debido a la adherencia (capítulo 4). En la figura 31 se muestra la magnitud del rotacional de los campos de flujo para un paquete de esferas. Los campos presentan similitudes, como la presencia de zonas con magnitud alta en algunos puntos detrás y al frente



**Figura 30.** Magnitud del producto vectorial de los campos de densidad de corriente eléctrica y velocidad de flujo normalizados en el plano z = 50 para una muestra del modelo E1 con  $\phi = 0.70$ .



**Figura 31.** Magnitud del rotacional de (a) la densidad de corriente eléctrica y (b) la velocidad de flujo en el plano z = 50 para una muestra del modelo E1 con  $\phi = 0.70$ .

de los obstáculos (respecto a la dirección principal de flujo, la dirección x), así como la manifestación de valores no nulos en torno a los obstáculos. Sin embargo, el rotacional del campo de velocidades (fig. 31(b)) parece mostrar valores no nulos en una mayor parte del espacio poroso. Esta diferencia podría ser un efecto de la adherencia que ocurre en el caso hidráulico. De poder separar los efecto de estancamiento y adherencia en el caso hidráulico, el campo de velocidades tal vez podría descomponerse en un campo análogo al de densidad de corriente eléctrica y un campo que absorba el efecto de adherencia. En este trabajo no se profundizará más en el tema, pero se deja abierto a discusión. Se hizo modelado de flujo eléctrico e hidráulico a través de medios porosos para determinar el factor de resistividad y la permeabilidad, respectivamente, y se propusieron y desarrollaron relaciones petrofísicas para asociar estas propiedades con la porosidad. También se analizaron los campos vectoriales que describen el flujo a través de paquetes de esferas para comprender la relación entre la distribución espacial y estadística de los campos y la geometría del espacio poroso.

El modelado numérico de flujo resultó ser una herramienta útil para: (i) determinar las propiedades equivalentes de flujo en medios porosos a escala de núcleo de pozo, (ii) estudiar el comportamiento de los campos vectoriales de ambos fenómenos y (iii) comparar el comportamiento de ambos tipos de flujo. Como pasos previos al modelado, las técnicas de tomografía computarizada y segmentación constituyen una estrategia útil para obtener una representación digital de los medios porosos.

Para el modelado numérico es importante la asimilación de la superficie de los poros a través de la inclusión de condiciones de frontera poro-grano tanto en el modelado con redes de Boltzmann para el caso hidráulico, como en el modelado con diferencias finitas para el caso eléctrico; ya que la asimilación de condiciones de frontera poro-grano permitió alcanzar la exactitud requerida según las predicciones analíticas en medios porosos conocidos, como los sistemas dispersivos de esferas o los modelos de tubos capilares.

El conocimiento de las relaciones petrofísicas establecidas resultó indispensable no solo para emplearlas directamente para comparar los datos, sino también como base para proponer nuevas relaciones petrofísicas que se beneficien directamente del conocimiento previo de la estructura del espacio poroso. Esto permitió acoplar la permeabilidad y la porosidad a partir de un modelo simple de tubos capilares de sección arbitraria, para el cual se obtuvo una expresión analítica en la que la permeabilidad y la porosidad están relacionadas por un coeficiente  $G_h$  que tiene que ver con el tamaño y la forma de los poros, así como con la tortuosidad. Se mostró que esta relación se reduce a la fórmula conocida para tubos de sección circular. Esta expresión analítica se generalizó para medios más complejos y se obtuvo una relación directa entre la permeabilidad y el factor de resistividad, la cual se reduce a algunas relaciones conocidas, particularmente cuando se trata con porosidades bajas.

De los datos de modelado obtenidos para paquetes de esferas construidos numérica-mente se obtuvo que las relaciones  $K - \phi$  y  $K - F_R$  propuestas se ajustan mejor a los resultados, especialmente cuando las porosidades son altas. Se obtuvo que una simplificación de las relaciones propuestas, aplicable para

porosidades bajas, es suficiente para estudiar datos de medios porosos sintéticos y rocas reales que satisfacen este criterio. Así mismo, al modelar el flujo en las tres direcciones para el caso de un paquete sintético de esferas y una muestra de dolomita, se encontró que la diferencia entre las propiedades de flujo en cada dirección da lugar a valores distintos para los parámetros geométricos que relacionan el factor de resistividad, la permeabilidad y la porosidad.

Al analizar de manera acoplada la permeabilidad K y el factor de resistividad  $F_R$  se caracterizaron algunas diferencias: (i) en los casos estudiados,  $log(K^{-1})$  crece más rápido que  $log(F_R)$  conforme la porosidad  $\phi$  decrece, lo que indica que la porosidad efectiva en estos casos es menor para el flujo hidráulico que para el flujo eléctrico; (ii) en comparación con los valores del  $F_R$ , los valores de K parecen cambiar más en función de la dirección en la que ocurre el flujo, lo que sugiere que el flujo de fluido es más sensible a la anisotropía que el flujo de corriente; (iii) del par de parámetros  $(G_h, m_h)$  que relacionan a K y  $\phi$ , el parámetro  $G_h$  mostró la tendencia de ser menor cuanto mayor es el valor de  $m_h$ , mientras que, dada su definición en términos de la porosidad efectiva, cabe suponer que el parámetro  $m_h$  es mayor cuanto mayor es la complejidad del medio poroso.

De todos los experimentos comparativos se observa que las condiciones que controlan la interacción del fluido en la frontera poro-grano son las responsables de la diferencia entre el comportamiento del flujo eléctrico e hidráulico. Estas condiciones reflejan un fenómeno de adherencia del fluido a las paredes de los poros. Este fenómeno se manifiesta tanto en la distribución espacial como en la distribución estadística de los campos de velocidad de flujo del fluido. Por ejemplo, en la distribución estadística de ambos campos (normalizados por el promedio), hay un pico que comienza alrededor del cero y se desplaza hacia el uno conforme aumenta la porosidad. Este desplazamiento ocurre con mayor "rapidez" en el caso eléctrico que en el caso hidráulico. Se propuso que esto podría cuantificarse, por ejemplo, mediante la desviación estándar. De parte del análisis de la distribución espacial de los campos se observó cómo la adherencia del fluido a las paredes del poro produce zonas de baja velocidad alrededor de los obstáculos en el caso eléctrico, lo que podría explicar la lenta transición del flujo hidráulico hacia un flujo uniforme en el espacio. Este fenómeno se refleja no solo en una diferencia en la intensidad del flujo sino también en la dirección y el rotacional de los campos.

Los valores de las propiedades equivalentes como el factor de resistividad y la permeabilidad dependen en gran medida de la forma en que son determinadas y de las consideraciones que se hacen al medirlas. Existen varios factores que afectan las predicciones obtenidas mediante modelado para estas propiedades, como la resolución de las tomografías, el método de segmentación, la estrategia de muestreo y el algoritmo de modelado empleado. La forma en que estas predicciones pueden ser relacionadas con valores obtenidos en pruebas de laboratorio a escala de núcleos de pozo o en estudios geofísicos de campo a escala de reservorio, sigue siendo un tema bajo estudio. Cabe mencionar que procesos mas complejos como flujo multifásico, intercambio de calor y generación de turbulencia en el caso de flujo hidráulico, o como procesos electromagnéticos transitorios en el caso de flujo eléctrico, no se contemplan en la formulación expuesta.

Las relaciones petrofísicas obtenidas para asociar la permeabilidad, la porosidad y el factor de resistividad, así como la interpretación realizada de los parámetros geométricos que se encuentran en estas relaciones y el estudio de los campos de flujo tienen el potencial de ayudar a alcanzar una mejor comprensión de los procesos de transporte en el interior de las rocas, así como a determinar, por ejemplo, la permeabilidad de una roca a partir del conocimiento de su factor de resistividad y su geometría interna.

#### Literatura citada

- Andra, H., Combaret, N., Dvorkin, J., Glatt, E., Han, J., Kabel, M., Keehm, Y., Krzikalla, F., Lee, M., Madonna, C., Marsh, M., Mukerji, T., Saenger, E., Sain, R., Saxena, N., Ricker, S., Wiegmann, A., y Zhan, X.. 2013a. Digital rock physics benchmarks-Part I: Imaging and segmentation. Computers & Geosciences, 50, pp. 25–32. doi: 10.1016/j.cageo.2012.09.005.
- Andra, H., Combaret, N., Dvorkin, J., Glatt, E., Han, J., Kabel, M., Keehm, Y., Krzikalla, F., Lee, M., Madonna, C., Marsh, M., Mukerji, T., Saenger, E., Sain, R., Saxena, N., Ricker, S., Wiegmann, A., y Zhan, X.. 2013b. Digital rock physics benchmarks-part II: Computing effective properties. Computers & Geosciences, 50, pp. 33–43. doi: 10.1016/j.cageo.2012.09.008.
- Aramideh, S., Vlachos, P. P., y Ardekani, A. M. 2018. Pore-scale statistics of flow and transport through porous media. Physical Review E, 98(1), pp. 013104.
- Archie, G. E. 1942. The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. Transactions of the AIME, 146(1), pp. 54–62.
- Arns, C. H., Knackstedt, M. A., Pinczewski, W. V., y Garboczi, E. J. 2002. Computation of linear elastic properties from microtomographic images: Methodology and agreement between theory and experiment. Geophysics, 67(5), pp. 1396–1405.
- Baranau, V. y Tallarek, U. 2014. Random-close packing limits for monodisperse and polydisperse hard spheres. Soft Matter, 10(21), pp. 3826–3841. Publisher: The Royal Society of Chemistry. doi: 10.1039/C3SM52959B.
- Baranau, V., Zhao, S.-C., Scheel, M., Tallarek, U., y Schröter, M. 2016. Upper bound on the Edwards entropy in frictional monodisperse hard-sphere packings. Soft Matter, 12(17), pp. 3991–4006. Publisher: The Royal Society of Chemistry. doi: 10.1039/C6SM00567E.
- Bezrukov, A., Bargieł, M., y Stoyan, D.. 2002. Statistical Analysis of Simulated Random Packings of Spheres. Particle & Particle Systems Characterization, 19(2), pp. 111–118. doi: 10.1002/1521-4117(200205)19:2j111::AID-PPSC111¿3.0.CO;2-M.
- Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., y Krook, M. 1954. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. Physical review, 94(3), pp. 511. Publisher: APS.
- Boussinesq, J.. 1868. Mémoire sur l'influence des frottements dans les mouvements réguliers des fluids. Journal de mathématiques pures et appliquées, 13(2), pp. 377-424.
- Carman, P. C. 1997. Fluid flow through granular beds. Chemical Engineering Research and Design, 75, pp. S32–S48. ISBN: 0263-8762 Publisher: Elsevier.
- Carothers, J. E. 1968. A statistical study of the formation factor relation to porosity: The Log Analyst, 9.
- Chapman, S. y Cowling, T. G. 1990. The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambridge university press.
- Chen, S. y Doolen, G. D.. 1998. Lattice Boltzmann method for fluid flows. Annual review of fluid mechanics, 30(1), pp. 329–364.
- De Groot, S. R. y Mazur, P. 2013. Non-equilibrium thermodynamics. Courier Corporation.
- Dey, A. y Morrison, H. F. 1979. Resistivity modeling for arbitrarily shaped three-dimensional structures. Geophysics, 44(4), pp. 753–780.

- Donaldson, E. C. y Tiab, D.. 2004. Petrophysics: theory and practice of measuring reservoir rock and fluid transport properties. Elsevier.
- Dong, K., Wang, C., y Yu, A. 2016. Voronoi analysis of the packings of non-spherical particles. Chemical Engineering Science, 153, pp. 330–343.
- Drazin, P. G. y Riley, N.. 2006. The Navier-Stokes equations: a classification of flows and exact solutions, Vol. 334. Cambridge University Press.
- Duliu, O. 1999. Computer axial tomography in geosciences: an overview. Earth-Science Review, 48(4), pp. 265–281. doi: 10.1016/S0012-8252(99)00056-2.
- Dvorkin, J., Derzhi, N., Diaz, E., y Fang, Q. 2011. Relevance of computational rock physics. Geophysics, 76(5), pp. E141–E153.
- Fredrich, J. T., DiGiovanni, A. A., y Noble, D. R.. 2006. Predicting macroscopic transport properties using microscopic image data. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 111(B3).
- Fricke, H.. 1924. A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systemsI. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids. Physical Review, 24(5), pp. 575. Publisher: APS.
- Garboczi, E. J.. 1998. Finite element and finite difference programs for computing the linear electric and elastic properties of digital images of random materials.
- He, Y.-L., Liu, Q., Li, Q., y Tao, W.-Q.. 2019. Lattice Boltzmann methods for single-phase and solidliquid phase-change heat transfer in porous media: A review. International Journal of Heat and Mass Transfer, 129, pp. 160–197. WOS:000453113500016. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.135.
- Hill, H. J. y Milburn, J. D. 1956. Effect of clay and water salinity on electrochemical behavior of reservoir rocks. Transactions of the AIME, 207(1), pp. 65–72.
- Hommel, J., Coltman, E., y Class, H.. 2018. Porosity-permeability relations for evolving pore space: a review with a focus on (bio-) geochemically altered porous media. Transport in Porous Media, 124(2), pp. 589–629. ISBN: 1573-1634 Publisher: Springer.
- Iassonov, P., Gebrenegus, T., y Tuller, M.. 2009. Segmentation of X-ray computed tomography images of porous materials: A crucial step for characterization and quantitative analysis of pore structures. Water resources research, 45(9).
- Keehm, Y.. 2003. Computational rock physics: Transport properties in porous media and applications. Tesis de doctorado, Stanford University.
- Kozeny, J.: 1927. Uber kapillare leitung der wasser in boden. Royal Academy of Science, Vienna, Proc. Class I, 136, pp. 271–306.
- Latt, J., Malaspinas, O., Kontaxakis, D., Parmigiani, A., Lagrava, D., Brogi, F., Belgacem, M. B., Thorimbert, Y., Leclaire, S., Li, S., Marson, F., Lemus, J., Kotsalos, C., Conradin, R., Coreixas, C., Petkantchin, R., Raynaud, F., Beny, J., y Chopard, B.. 2021. Palabos: Parallel Lattice Boltzmann Solver. Computers & Mathematics with Applications, 81, pp. 334–350. doi: 10.1016/j.camwa.2020.03.022.
- Lubachevsky, B. D.. 1991. How to simulate billiards and similar systems. Journal of Computational Physics, 94(2), pp. 255–283. doi: 10.1016/0021-9991(91)90222-7.
- Martys, N. S., Torquato, S., y Bentz, D. P.. 1994. Universal scaling of fluid permeability for sphere packings. Physical review E, 50(1), pp. 403. Publisher: APS.

Maxwell, J. C.. 1873. A treatise on electricity and magnetism, Vol. 1. Clarendon press.

- Mościński, J., Bargieł, M., Rycerz, Z. A., y Jacobs, P. W. M.. 1989. The Force-Biased Algorithm for the Irregular Close Packing of Equal Hard Spheres. Molecular Simulation, 3(4), pp. 201–212. Publisher: Taylor & Francis \_eprint: https://doi.org/10.1080/08927028908031373. doi: 10.1080/08927028908031373.
- Nabighian, M. N. 1988. Electromagnetic Methods in Applied Geophysics: Voume 1, Theory. Society of Exploration Geophysicists.
- Niwas, S. y de Lima, O. A.. 2003. Aquifer parameter estimation from surface resistivity data. Groundwater, 41(1), pp. 94–99. ISBN: 0017-467X Publisher: Wiley Online Library.
- Nocedal, J. y Wright, S. 2006. Numerical optimization. Springer Science & Business Media.
- Parker, S. P. 1983. McGraw-Hill encyclopedia of physics. Publisher: McGraw-Hill Book Company, New York, NY.
- Perez-Rosales, C.. 1976. Generalization of the Maxwell Equation for Formation Resistivity Factors. Journal of Petroleum Technology, 28(7), pp. 819–824. doi: 10.2118/5502-PA.
- Perez-Rosales, C. 1982. On the relationship between formation resistivity factor and porosity. Society of Petroleum Engineers Journal, 22(4), pp. 531–536. doi: 10.2118/10546-PA.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., y Flannery, B. P. 2007. Numerical Recipes with Source Code CD-ROM 3rd Edition: The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press.
- Proudman, J. 1914. IV. Notes on the motion of viscous liquids in channels. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 28(163), pp. 30–36. ISBN: 1941-5982 Publisher: Taylor & Francis.
- Purvance, D. T. y Andricevic, R. 2000. On the electrical-hydraulic conductivity correlation in aquifers. Water Resources Research, 36(10), pp. 2905–2913. ISBN: 0043-1397 Publisher: Wiley Online Library.
- Rivero, O. G. 1977. Some considerations about the possible use of the parameters a and m as a formation evaluation tool through well logs. En: SPWLA 18th annual logging symposium..OnePetro.
- Rong, L. W., Dong, K. J., y Yu, A.. 2013. Lattice-boltzmann simulation of fluid flow through packed beds of uniform spheres: Effect of porosity. Chemical Engineering Science, 99, pp. 44–58.
- Schulz, R., Ray, N., Zech, S., Rupp, A., y Knabner, P. 2019. Beyond Kozeny–Carman: predicting the permeability in porous media. Transport in Porous Media, 130(2), pp. 487–512. ISBN: 1573-1634 Publisher: Springer.
- Sezgin, M. y Sankur, B. 2004. Survey over image thresholding techniques and quantitative performance evaluation. Journal of Electronic imaging, 13(1), pp. 146–165.
- Skoge, M., Donev, A., Stillinger, F. H., y Torquato, S. 2006. Packing hyperspheres in high-dimensional Euclidean spaces. Physical Review E, 74(4), pp. 041127. Publisher: APS.
- Slater, L. 2007. Near surface electrical characterization of hydraulic conductivity: From petrophysical properties to aquifer geometries—A review. Surveys in Geophysics, 28(2), pp. 169–197. ISBN: 1573-0956 Publisher: Springer.
- Stokes, G. G. 2007. On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of elastic solids.

Sánchez, F. J.. 2022. Hidrología Superficial y Subterránea. Kindle Direct Publishing.

- Vinegar, H. y Waxman, M. 1984. Induced polarization of shaly sands. Geophysics, 49(8), pp. 1267–1287. doi: 10.1190/1.1441755.
- Waxman, M. H. y Smits, L. J. M. 1968. Electrical conductivities in oil-bearing shaly sands. Society of Petroleum Engineers Journal, 8(02), pp. 107–122. ISBN: 0197-7520 Publisher: OnePetro.
- Worthington, P. 1993. The uses and abuses of the archie equations. 1. the formation factor porosity relationship. Journal of Applied Geophysics, 30(3), pp. 215–228. doi: 10.1016/0926-9851(93)90028-W.
- Xu, P. y Yu, B. 2008. Developing a new form of permeability and Kozeny–Carman constant for homogeneous porous media by means of fractal geometry. Advances in water resources, 31(1), pp. 74–81. ISBN: 0309-1708 Publisher: Elsevier.
- Zhan, X., Schwartz, L. M., Toksöz, M. N., Smith, W. C., y Morgan, F. D., 2010. Pore-scale modeling of electrical and fluid transport in Berea sandstone. Geophysics, 75(5), pp. F135–F142.
- Zhang, J.: 2011. Lattice Boltzmann method for microfluidics: models and applications. Microfluidics and Nanofluidics, 10(1), pp. 1–28. WOS:000286199700001. doi: 10.1007/s10404-010-0624-1.

#### Anexos

#### Anexo A. Sobre la precisión y estabilidad de las aproximaciones

En este apéndice se hace un breve repaso sobre la precisión que alcanzan los algoritmos de modelado empleados y sobre las condiciones de estabilidad a las que se encuentran sujetos. Para el caso del modelado de flujo eléctrico se escribió un programa como parte de este trabajo, por lo que se muestran los resultados obtenidos para algunos casos de referencia con el fin de verificar que el programa genera resultados confiables. Por último, se presenta una breve discusión sobre cómo el valor de un parámetro conocido como tiempo de relajación, que está relacionado con la viscosidad de fluido, afecta a los resultados obtenidos en el modelado hidráulico, esto con el fin de tener este factor en consideración a lo largo del trabajo.

#### A.1. El método de diferencias finitas para el flujo de corriente

Para la aproximación en diferencias finitas de la ecuación de Laplace para el potencial eléctrico se empleó el bien conocido esquema de siete puntos que es estable y tiene un error de truncamiento del orden  $O(\Delta r^2)$ .

Dada la forma en la que se determina la conductividad promedio (capítulo 3), puede notarse que esta mantiene una relación lineal con los valores numéricos del potencial, por lo que podemos decir que los valores de la conductividad tienen un error del orden  $O(\Delta r^2)$ .

Así mismo, se realizaron algunos ejercicios de prueba para verificar el correcto funcionamiento del programa. Un caso que cuenta con una solución analítica para el potencial es el de una esfera conductora inmersa en un campo electrostático uniforme como se muestra en la figura 32. El potencial para cada punto en el espacio está dado por (Nabighian, 1988):

$$V = \begin{cases} -\frac{3\sigma_1}{\sigma_2 + 2\sigma_1} E_0 r cos\theta & r <= R\\ \left( -r + R^3 \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{\sigma_2 + 2\sigma_1} r^{-2} \right) E_0 cos\theta & r > R \end{cases}.$$
(99)

Considere una esfera con R=50 píxeles centrada en un dominio cúbico de 150 píxeles. Tomamos  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 10$  y  $E_0 = 1$ , en unidades de celda. Un corte del potencial se muestra en la figura 33, tanto para valores analíticos como numéricos. Para la simulación se mantuvieron las condiciones de frontera que se emplearían para el modelado a lo largo de este trabajo. De ahí las diferencias entre los valores analíticos y numéricos cerca de las fronteras.


Figura 32. Esfera conductora en un campo uniforme.



Figura 33. Plano z = 0 que muestra el potencial obtenido (a) analíticamente y (b) numéricamente para una esfera conductora inmersa en un campo electrostático uniforme.

También es de interés verificar que se están obteniendo resultados razonables para la conductividad promedio de un medio heterogéneo. Para ello existen casos simples en los que se cuenta con soluciones analíticas o aproximadas, como los que sugiere Garboczi (1998). Uno de ellos es el caso de contrastes pequeños. Cuando la diferencia entre las propiedades de un material de dos fases es pequeña, una expansión en series de potencias puede hacerse para las propiedades macroscópicas en términos de esta diferencia. La conductividad promedio,  $\sigma_o$ , a segundo orden en ( $\sigma_2 - \sigma_1$ ), donde  $\sigma_1$  ( $\sigma_2$ ) y  $c_1$  ( $c_2$ ) son la conductividad y la fracción de volumen de la fase 1 (fase 2), está dada por:

$$\sigma_0 = \sigma_1 + c_2(\sigma_2 - \sigma_1) - \frac{1}{d}c_1c_2\frac{(\sigma_2 - \sigma_1)^2}{\sigma_1} + O((\sigma_2 - \sigma_1)^2).$$
(100)

Considere un cubo de 22 píxeles (fase 2) centrado en un dominio de 30 píxeles. Para este caso,  $c_2 = 0.39437$  y  $c_1 = 0.60563$ . Tomamos  $\sigma_1 = 1$  siempre y variamos  $\sigma_2$  entre 1 y 1.3. Los resultados se muestran en la figura 34(a).



Figura 34. Valores numéricos y teóricos de la conductividad promedio para el caso de (a) contrastes pequeños y (b) limite diluido.

Otro caso sugerido por Garboczi (1998) es el del límite diluido. Para estar en el límite diluido, la fracción de volumen de la fase de inclusión debe ser posiblemente menor o igual al 5 %, aunque esto puede cambiar dependiendo de la forma de la inclusión y el contraste de sus propiedades respecto a la matriz. Sea la fase de inclusión la fase 2. En general, para alguna propiedad f, la propiedad en el límite diluido tiene la forma:

$$f = f_1(1 + \hat{f}c_2), \tag{101}$$

donde  $\hat{f}$  es llamada la propiedad intrínseca y es una función de la forma de la partícula y el contraste entre sus propiedades  $(f_2)$  y las de la matriz  $(f_1)$ . Sea  $f = \sigma_0$ . Para una inclusión cúbica con conductividad  $\sigma_2$  en una matriz con conductividad  $\sigma_1$ , considerando  $x = \sigma_2/\sigma_1$ :

$$\hat{\sigma_0} = \frac{0.486(x-1)^2 + (x-1)}{1 + 0.82(x-1) + 0.143(x-1)^2}.$$
(102)

Considere un cubo de 10 píxeles centrado en un dominio de 40 píxeles. Para este caso,  $c_2 = 0.0156$ . Tomamos  $\sigma_1 = 1$  siempre y variamos  $\sigma_2$  entre 0.1 y 10. Los resultados se muestran en la figura 34(b).

Como muestran los experimentos de prueba, se obtienen resultados razonables para la distribución del potencial y para la conductividad promedio.

## A.2. El método de redes de Boltzmann para el flujo de fluidos

Para el modelado hidráulico se empleo la librería Palabos (Latt et al., 2021), la cual emplea el método de redes de Boltzmann, un método que aproxima la solución de la ecuación de Boltzmann. Como se

mencionó en el capítulo 3, la ecuación de Boltzmann reproduce las ecuaciones de la hidrodinámica. En particular, la ecuación BGK-LB (ecuación 63) resulta en una aproximación de la ecuación 56 que establece la conservación del momento de un fluido incompresible ( $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ ). Esta aproximación es válida cuando la presión está determinada por la densidad (Chen y Doolen, 1998):

$$P = \frac{\rho}{3} \tag{103}$$

y la viscosidad dinámica está dada por:

$$\mu = \frac{\rho}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right). \tag{104}$$

En la práctica, un gradiente de densidad es establecido en el modelo para simular una diferencia de presión, de modo que se está considerando que el fluido es ligeramente compresible. Entonces se dice que la ecuación BGK-LB aproxima la ecuación de Navier-Stokes en el límite casi incompresible. Como también se mencionó en el capítulo 3, la función de distribución de equilibrio discreta se aproxima como una expansión en series de potencias de la velocidad promedio del fluido, u, por lo que expansión es válida solo para velocidades pequeñas. Una buena referencia para esto es la velocidad del sonido  $c_s$  en el fluido, de modo que decimos que la aproximación es válida solo para valores pequeños del número de Mach,  $M = u/c_s$ . La velocidad del sonido en cualquier medio está dada por:

$$c_s = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}}.$$
(105)

Considerando la condición de la ecuación 103, se tiene que  $c_s=1/\sqrt{3}$ .

La ecuación BGK-LB es una discretización en diferencias finitas de la ecuación de Boltzmann y tiene un error de truncamiento  $O(\Delta r^2 + \Delta t^2)$  (Chen y Doolen, 1998). Como se mencionó en la deducción de la ecuación BGK-LB, se escoge que  $\alpha = \Delta t ||\vec{e_i}|| / \Delta r = 1$ , de modo que se satisface la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). De un análisis de estabilidad lineal de von Neumann se sabe que la condición de estabilidad lineal es  $\tau \ge 1/2$  (Chen y Doolen, 1998). Considerando la relación de la ecuación 104 podemos notar que la condición de estabilidad equivale a que la viscosidad sea positiva.

Dada la forma en la que se determina la permeabilidad (capítulo 3), puede notarse que esta mantiene una relación lineal con los valores numéricos de la función de distribución, por lo que podemos decir que los valores de la permeabilidad tienen un error del orden  $O(\Delta r^2 + \Delta t^2)$ .

# A.3. Sobre el efecto del tiempo de relajación en la precisión del algoritmo para el modelado de flujo de fluidos

En física de rocas se supone que la permeabilidad K y el factor de resistividad  $F_R$  son funciones solamente de la estructura interna de la roca y no dependen de las propiedades del fluido. ¿Esto se cumple en los algoritmos de modelado empleados? Para investigar esto considere, por simplicidad, el modelo de tubos capilares de sección rectangular discutido en la sección de resultados. Considere un medio cúbico de 100 celdas por lado y n tubos con secciones de dimensiones acordes a los mismos tres casos vistos en el capítulo 4: modelos T1 (8 × 8), T2 (6 × 12) y T3 (5 × 20).

Como un primer acercamiento, se toma una muestra del modelo T2 donde n = 25. En la figura 35 se muestran los valores obtenidos para K y  $F_R$  cuando se cambian los valores del tiempo de relajación  $\tau$ y la conductividad del fluido  $\sigma_W$ , respectivamente. Note que, de la ecuación 104, cambiar el valor de  $\tau$ equivale a cambiar el valor de la viscosidad  $\mu$ . Puede observarse que en el caso hidráulico la permeabilidad no es independiente de la propiedad del fluido. La dependencia observada se debe al funcionamiento del algoritmo de modelado y podría tener comportamientos distintos para distintos medios porosos. Dado que se trata de una librería externa, estudiar este fenómeno numérico a fondo va más allá del alcance de este estudio. Nos limitamos a asignar un valor conveniente a  $\tau$ .

El valor de  $\tau$  puede calibrarse considerando la solución analítica para los tubos capilares. Para  $\tau = 0.8$  se obtuvieron los resultados de la figura 36 para  $K \cdot F_R = K_t$  vs  $\phi$  para los modelos T1, T2 y T3. Para la solución analítica de  $K_t$  se usó una aproximación hasta n = 5 de la ecuación 85. Puede observarse que la precisión de los valores de K no solo cambia con el valor de  $\tau$ , como se concluyó de las gráficas anteriores,



Figura 35. (a)  $F_R$  vs  $\sigma_W$  y (b) K vs  $\tau$  para una muestra del modelo T2 con  $\phi = 0.18$ .



**Figura 36.**  $K_t$  vs  $\phi$  para tubos rectangulares de diferentes dimensiones.

sino que para un mismo valor del tiempo de relajación, la precisión de los valores de permeabilidad se ve afectada por las dimensiones de los tubos. Con el valor de  $\tau = 0.8$  se obtienen buenas aproximaciones para K para el modelo T2 cuya sección tiene una redondez media y los resultados pierden precisión para los modelos T1 y T3, que tienen mayor o menor redondez. Al menos en estos casos estudiados, este valor de  $\tau$  aporta aproximaciones aceptables para todos los modelos. En el caso más general la precisión de los valores de K obtenidos con esta librería podría depender también de otras características geométricas del medio, sin embargo, como se mencionó antes, los detalles van más allá del alcance de este trabajo. A lo largo de este trabajo, el valor de  $\tau = 0.8$  es empleado en todas las simulaciones.

### Anexo B. La ecuación de Boltzmann y las ecuaciones de la hidrodinámica

Como se discute en el capitulo 3, los principios físicos que gobiernan la dinámica de los fluidos a nivel macroscópico son las leyes de conservación de la masa y el momento. Por otro lado, el método de redes de Boltzmann para el modelado de flujo se basa en la ecuación de Boltzmann, la ley física que gobierna el movimiento de las partículas clásicas a nivel microscópico. En este apéndice se demuestra brevemente que la ecuación de Boltzmann reproduce las leyes de conservación, explicando antes algunos conceptos de mecánica estadística y haciendo una deducción de la ecuación de Boltzmann, por considerar que son temas poco frecuentados en el área de geociencias.

#### B.1. Conceptos de mecánica estadística

Cuando un sistema está formado por un gran número de partículas, resulta poco práctico, por no decir imposible, estudiar la dinámica de cada una de las partículas. Para estudiar estos sistemas, por lo tanto, existen otros medios. El primero y más antiguo de ellos es estudiar el sistema como un "todo", no

considerando que está formado por partículas. Desde esta perspectiva se definen cantidades "observables" como la densidad o la temperatura y sus variaciones se rigen, por ejemplo, por leyes de conservación. El segundo método para estudiar sistemas de muchas partículas es la mecánica estadística, que considera que el sistema está formado por partículas, pero en lugar de estudiar a cada una de ellas, se limita a estudiar su comportamiento estadístico. Por ejemplo, en lugar de mantener un registro de la velocidad de cada partícula, se limita a mantener un registro de cuántas partículas se esperaría que se encuentran en un rango de velocidades dado, o dicho de otra forma, cuál es la probabilidad de que la velocidad de una partícula cualquiera del sistema se encuentre en ese rango. En general, el estado de una partícula está definido por su posición y su velocidad, que además pueden variar de un momento a otro. Entonces, el parámetro que importa desde la perspectiva de la mecánica estadística es la llamada función de distribución, que nos dice la probabilidad de que la posición y la velocidad de una partícula se encuentren en un rango determinado en un momento dado. Al conocer esta función se conoce el estado del sistema.

Cuando las leyes mecánicas que rigen a las partículas de un sistema son las clásicas y el sistema está lo suficientemente diluido (el volumen donde se encuentran las partículas es mucho mayor que el volumen de las partículas mismas), entonces nos referimos a la estadística clásica o estadística de Boltzmann (Parker, 1983).

## B.2. La ecuación de Boltzmann

### Texto modificado de Parker (1983).

La ecuación de Boltzmann describe el comportamiento de un sistema de partículas que se encuentra fuera del equilibrio. Cuando un sistema se encuentra en equilibrio, la densidad, la presión y la velocidad permanecen constantes. Sin embargo, cuando el sistema es perturbado por un agente externo, este deja de estar en equilibrio, por lo que entra en movimiento y la densidad, la presión y la velocidad pueden convertirse en funciones del tiempo.

De manera general, el estado de las partículas puede variar en el tiempo debido a tres factores: la fuerzas externas provocan que las velocidades de las partículas cambien con el tiempo, el efecto de difusión provoca que las posiciones de las partículas cambien con el tiempo, y las colisiones entre partículas provocan cambios abruptos de velocidad. Esto puede escribirse como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{fuerza} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{dif} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col},\tag{106}$$

donde f es la función de distribución y  $(\partial f/\partial t)_{fuerza}$ ,  $(\partial f/\partial t)_{dif}$  y  $(\partial f/\partial t)_{col}$ , son los efectos de las

fuerzas externas, la difusión y las colisiones, respectivamente.

Lo siguiente es determinar una expresión especifica para cada uno de los términos de la derecha de la igualdad de la ecuación 106. Suponga que una fuerza externa  $F_x$  actúa en la dirección x sobre cada partícula, produciendo una aceleración  $a_x = F_x/m$ . Entonces, en un tiempo  $\Delta t$  ocurre un cambio de velocidad  $\Delta v_x = a_x \Delta t$ . Si no hay colisiones, todas las partículas con velocidad  $v_x$  en un tiempo t tendrán una velocidad  $v_x + \Delta v_x$  en el tiempo  $t + \Delta t$ , es decir,

$$f(v_x, t) = f(v_x + \Delta v_x, t + \Delta t).$$
(107)

Multiplicando por -1, sumando  $f(v_x, t + \Delta t)$  a ambos lados de la igualdad y multiplicando por  $1/\Delta t$ el lado izquierdo y su equivalente  $a_x/\Delta v_x$  el lado derecho:

$$\frac{f(v_x, t+\Delta t) - f(v_x, t)}{\Delta t} = -a_x \frac{f(v_x + \Delta v_x, t+\Delta t) - f(v_x, t+\Delta t)}{\Delta v_x}.$$
(108)

En el límite cuando  $\Delta t \rightarrow 0$ ,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{fuerza} = -a_x \frac{\partial f}{\partial v_x}.$$
(109)

Para una fuerza con dirección arbitraria:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{fuerza} = -\vec{a} \cdot \nabla_v f. \tag{110}$$

De forma análoga puede demostrarse que

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{dif} = -\vec{v} \cdot \nabla_r f. \tag{111}$$

Sustituyendo las expresiones 110 y 111 en 106:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{a} \cdot \nabla_v f = \Omega(f), \tag{112}$$

donde  $\Omega(f) = (\partial f/\partial t)_{col}$  es el término relacionado con las colisiones. Para resolver para f, una expresión para  $\Omega(f)$  debe ser determinada. La forma de  $\Omega(f)$  depende de las fuerzas que actúan entre las partículas y puede llegar a ser muy compleja. Una simplificación muy aceptada del término de colisión es el llamado modelo BGK, como se vio en el capítulo 3.

## B.3. Las ecuaciones de la hidrodinámica a partir de la ecuación de Boltzmann

Texto modificado de Parker (1983).

Para un sistema de partículas de una sola especie, la densidad de masa en una posición y momento dados es el número esperado de partículas por la masa de cada partícula:

$$\rho = m \int f d\vec{v}.$$
(113)

derivando parcialmente respecto al tiempo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = m \int \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{v}.$$
(114)

Despejando  $\partial f / \partial t$  de la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = m \int \left[ \Omega(f) - \vec{v} \cdot \nabla_r f - \vec{a} \cdot \nabla_v f \right] d\vec{v}.$$
(115)

El último término dentro de la integral se vuelve cero al integrarlo y evaluarlo en los extremos ya que se asume que  $f \to 0$  rápidamente para valores grandes de velocidad ( $\nabla_v f = 0$  en los extremos). Sin entrar en detalles sobre la forma general del término de colisión  $\Omega(f)$ , se cumple que

$$\int \psi \Omega(f) d\vec{v} = 0, \tag{116}$$

donde  $\psi$  puede ser la masa m, el momento  $m\vec{v}$  o la energía cinética  $mv^2/2$ . Por lo tanto:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -m \int \vec{v} \cdot \nabla_r f d\vec{v}.$$
(117)

Como la posición y la velocidad de las partículas son independientes, entonces  $\vec{v} \cdot \nabla_r f = \nabla_r \cdot \vec{v} f$ , de modo que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla_r \rho \vec{u},\tag{118}$$

donde

$$\vec{u} = \rho^{-1}m \int \vec{v} f d\vec{v} \tag{119}$$

es la velocidad promedio de las partículas. La ecuación 118 es la ecuación de conservación de la masa, la primera ecuación de la hidrodinámica. De manera similar, multiplicando la ecuación 119 por  $\rho$  para obtener la definición de momento y derivando respecto al tiempo se obtiene que, en ausencia de fuerzas externas:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} = -\nabla_r \mathbf{\Pi},\tag{120}$$

donde  $\pmb{\Pi} = \pmb{P} + \rho \vec{v} \vec{v}$  y

$$\boldsymbol{P} = m \int (\vec{v} - \vec{u})(\vec{v} - \vec{u}) f d\vec{v}$$
(121)

es el tensor de presión (el tensor de estrés viscoso más la presión hidrostática). La ecuación 120 es la ecuación de conservación del momento, la segunda ecuación de la hidrodinámica. Escribiendo la forma macroscópica del tensor de presión se obtiene la ecuación de Navier-Stokes empleada en este trabajo.