

Simulación estocástica del transporte de trazadores a través de medios porosos en condiciones bifásicas

Yasmin Meleán^{1} y Vladimir Alvarado²*

¹IVIC., Apartado 21827, Caracas 1020A, Venezuela. ²PDVSA Intevep., Apartado 76343, Caracas 1070A, Venezuela.

Recibido: 21-11-02 . Aceptado: 26-09-03

Resumen

El modelo de simulación se basa en la analogía entre la ecuación de transporte y la ecuación de Fokker-Planck. Para ello se utiliza el procedimiento de seguimiento de partículas ya que, a diferencia del método de diferencias o elementos finitos, no introduce dispersión numérica. En este trabajo se presentan los resultados de simulación del transporte de solutos a través de un medio poroso en condiciones de ocupación bifásica con una de las fases en saturación residual. Se determinó que la prolongación de las colas en las curvas de irrupción depende del coeficiente de partición de los trazadores, de las difusividades moleculares y de las proporciones de las fases presentes en el medio. Así, el uso de trazadores con diferentes coeficientes de partición permiten determinar la presencia de un fluido inmóvil, así como también la proporción relativa de las fases presentes, siendo de gran importancia para el desarrollo de métodos económicos en la caracterización de reservorios y preservación del medio ambiente de la contaminación.

Palabras clave: Absorción; medios porosos; dispersión.

Stochastic simulation of tracers transport through porous media under two phase flow conditions

Abstract

The simulation model is based on the analogy between the transport equation and the Fokker-Planck equation. To accomplish this, a particle-tracking procedure is used because, as opposed to a finite-difference or a finite-element formulation, it does not introduce numerical dispersion. In this work, simulation results of solute transport through porous media are presented, for the case of double occupancy of the medium, with one of the phases at residual saturation. It was determined that the tailing of the breakthrough curve depends on the partition coefficient of the tracers, molecular diffusivities and the fraction of the phases in the medium. Hence the use of tracers with different partition coefficients allows one to determine the presence of an immobile fluid, as well as the relative fraction of the phases. The latter is important for the development of inexpensive methods for the characterization of reservoirs and preservation of the environment from pollution.

Key words: Absorption; dispersion; porous media.

* Autor para la correspondencia. E-mail: meleany@manare.ivic.ve

1. Introducción

El interés en el fenómeno de dispersión, en el área de flujo bifásico, reside en el hecho de que sustancias químicas con solubilidad parcial entre dos fases inmiscibles pueden ser utilizadas para caracterizar medios porosos. Esta habilidad de ciertos solutos se utiliza como trazador (marcador) de las regiones de interés, de manera que la respuesta del trazador como función del tiempo o espacio contiene información de la distribución de transporte de fases inmiscibles en la matriz porosa (1).

La aproximación estocástica busca esencialmente soluciones de la ecuación diferencial de transporte de fluidos en medios porosos heterogéneos, suponiendo que los parámetros hidrogeológicos (porosidad, conductividad hidráulica, etc.) son funciones aleatorias del espacio. El modelo desarrollado consiste en representar el soluto por un número grande de partículas que se mueven en el fluido de acuerdo a los valores locales de velocidad y efectos aleatorios de la dispersión.

El principal atractivo del método de seguimiento de partículas (particle tracking) es que funciona (a diferencia de la mayoría de los métodos clásicos) para valores grandes del número de Péclet (1, 2). La independencia del método respecto al tamaño de las celdas y del sistema, la garantía en la conservación de la masa y la ausencia de dispersión numérica, son motivos para que se elija a menudo en la simulación del transporte de solutos en sistemas heterogéneos grandes (3, 4).

2. Analogía entre la ecuación de transporte y la ecuación de Fokker-Planck (EFP)

La técnica de seguimiento de partículas tiene su fundamento matemático en la similitud existente entre la ecuación de transporte, convección-dispersión y la ecuación de Fokker-Planck (EFP). El proble-

ma general de transporte para especies disueltas involucra la solución de la ecuación de balance de masa (4, 5)

$$\frac{c}{t} - cV - D \nabla^2 c - \nabla \cdot (\mathbf{v}c) + \sum_{j=1}^N R_j = 0 \quad [1]$$

donde c es la concentración de la especie disuelta o soluto en el medio, \mathbf{D} y \mathbf{v} representan el tensor de dispersión hidrodinámica y la velocidad local respectivamente, y $\sum_{j=1}^N R_j$ es la tasa de producción de especies debido a reacciones, que pueden ser homogéneas o heterogéneas.

El tensor de dispersión hidrodinámica se puede escribir como: (4, 5)

$$\mathbf{D} = \alpha_L V \mathbf{I} + \alpha_T \mathbf{v} \mathbf{v}^T \quad [2]$$

siendo α_L y α_T las dispersividades longitudinal y transversal, D_m la difusión molecular, $\mathbf{v} \mathbf{v}^T$ la díada del vector velocidad y $V = |\mathbf{v}|$.

Si la masa total de soluto es transportada por partículas, la concentración en un volumen control se puede relacionar con el número de estas y por ende con la masa en dicho volumen. Si un grupo numeroso de partículas se mueve simultáneamente, entonces la densidad $f(\mathbf{r}, t)$ de las mismas obedece la aproximación de la ecuación de Itô Fokker-Planck: (4, 6)

$$\frac{f}{t} = \mathbf{A} \cdot \nabla f + \frac{1}{2} \mathbf{B} : \nabla^2 f = 0 \quad [3]$$

donde \mathbf{A} y \mathbf{B} son campos auxiliares. Para que la analogía entre la ecuación de transporte y la EFP sea válida, se debe cumplir:

$$\mathbf{A} = \mathbf{v} - D \nabla^2 \mathbf{D} \quad [4]$$

$$D = \frac{1}{2} \mathbf{B} : \mathbf{B}^T \quad [5]$$

siendo la densidad, $f(\mathbf{r}, t)$, proporcional a c .

Debido a la consideración de variaciones suaves, la formulación utilizada según las partículas se estén moviendo en la fase mojanante ($i=fase_1$) o no mojanante ($i=fase_2$) es:

$$dX_t = v D_i \frac{1}{D_i} dt + B(X, t_i, Z) \sqrt{dt} \quad [6]$$

donde Z es un vector aleatorio.

La ecuación anterior debe ser modificada previamente para poder utilizarla a nivel computacional. Esta modificación consiste en discretizar espacio y tiempo, para obtener:

$$X_n = X_{n-1} + A(X_{n-1}, t) \Delta t + B(X_{n-1}, t) Z_n \sqrt{\Delta t} \quad [7]$$

Las ecuaciones anteriores no son suficientes para determinar el movimiento de las partículas en las fronteras entre fases. Cuando los trazadores entran en contacto con el contorno que las delimita, el coeficiente de partición (κ) define la probabilidad de que la interfaz sea permeable o no.

3. Discusión y Resultados

Para asignar saturación a la celdas de simulación, se ha usado una distribución percolativa, $f(t, p) = f_1 + (1-p)f_2$ con lo cual cada celda puede tener 100% de una u otra fase. El subíndice indica ocupación por la fase 1 o la 2, respectivamente. El coeficiente de partición se utiliza para definir la probabilidad de accesibilidad en la frontera entre fases. En este caso, p se define como $p = \frac{1}{1+\kappa}$ si $\kappa > 1$ y $p = \frac{1}{1-\kappa}$ si $\kappa < 1$, en función del coeficiente de partición. Se verificó que esta condición conduce a una distribución de partículas en volúmenes inmóviles de ambas fases que satisfacen la condición de equilibrio.

Con esto se busca simular un proceso de inyección de agua (fase mojanante) en su etapa final que deja dos tipos de crudo inmóvil (fase no mojanante). Uno localizado, en forma de depósitos no barridos por efectos de la heterogeneidad y el otro a escala de poros, el

cual no se simula directamente, excepto por la asignación de una porosidad efectiva, $S_o = S_w$ donde S_o y S_w se refieren a las saturaciones de crudo y agua en el medio, respectivamente.

Si el coeficiente de partición (κ) es nulo, el uso de trazadores neutros permite determinar la distribución de tiempos de salida de las partículas, lo cual caracteriza las trayectorias del fluido móvil en el medio. La Figura 1 muestra casos con $\kappa = 0$, para 3 fracciones de la fase no mojanante. La presencia de una fase inmóvil altera el campo de velocidades del fluido móvil (fase mojanante en este caso), con un consecuente ensanchamiento de la curva de irrupción.

En estas circunstancias, existe una mayor fracción de zonas de baja velocidad del fluido a medida que la fracción de ocupación aumenta, lo cual explica el ensanchamiento de la curva de irrupción.

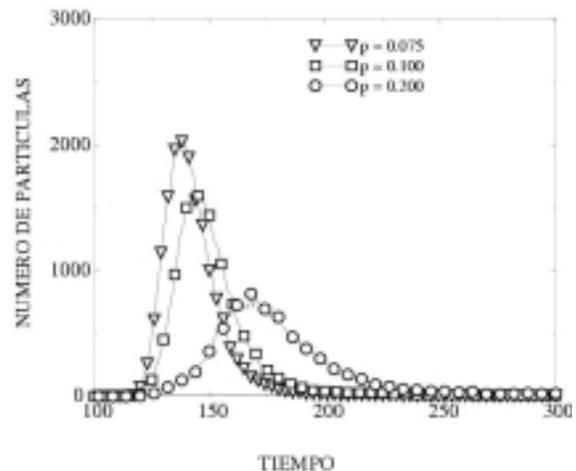


Figura 1. Curvas de irrupción ($\kappa = 0$), para diferentes fracciones de fase no mojanante presente en la matriz porosa. La muestra corresponde a un sistema bidimensional de 100×50 celdas. Se tomó $D_m = 0.01$ en ambas fases, siendo $\Delta x = 0.5$ y $\Delta t = 0.1$

Por otro lado, cuando $\kappa = 0$ el intercambio de trazadores causa el desdoblamiento de la curva en picos (Figura 2). Un primer grupo de trazadores corresponde a aquellos cuya interacción es casi nula con la fase no mojanete, mientras que un segundo grupo corresponde a la fracción de partículas que se intercambia con la fase residual. Es esta la información que puede utilizarse para analizar la fracción de la fase residual, cuando la curva de irrupción correspondiente se compara con el caso sin intercambio. A partir de $\kappa = 2,0$, se empieza a producir el desdoblamiento en picos como se puede observar en la Figura 2. Esto indica que el uso de trazadores con coeficientes de partición considerablemente mayores a la unidad se hace necesario para este propósito. Por último, la Figura 3 muestra el efecto de variar únicamente el coeficiente de difusión molecular. Ya que las partículas en la fase no mojanete solamente se desplazan debido a la difusión molecular, mientras este coeficiente sea menor, la distancia que recorren los trazadores son más cortas y por ende, permanecen más tiempo en dicha fase Figura 3.

4. Conclusiones

- Para trazadores de partición, la cola de irrupción sufre una prolongación que depende de varios factores cuando las partículas se particionan con la fase inmóvil:
- Si se varía únicamente el coeficiente de partición, a medida que este aumenta, la curva de irrupción se prolonga más, resultado de que el número de partículas que se particionan es cada vez mayor, incrementándose así el tiempo de residencia.
- Si se modifica solamente la fracción de ocupación del medio por la fase inmóvil, se empiezan a observar dos picos importantes en la curva de irrupción, consecuencia de la presencia cada vez mayores de fracciones de fase inmóvil con la que interactúan los trazadores y en el cual el desplazamiento por uni-

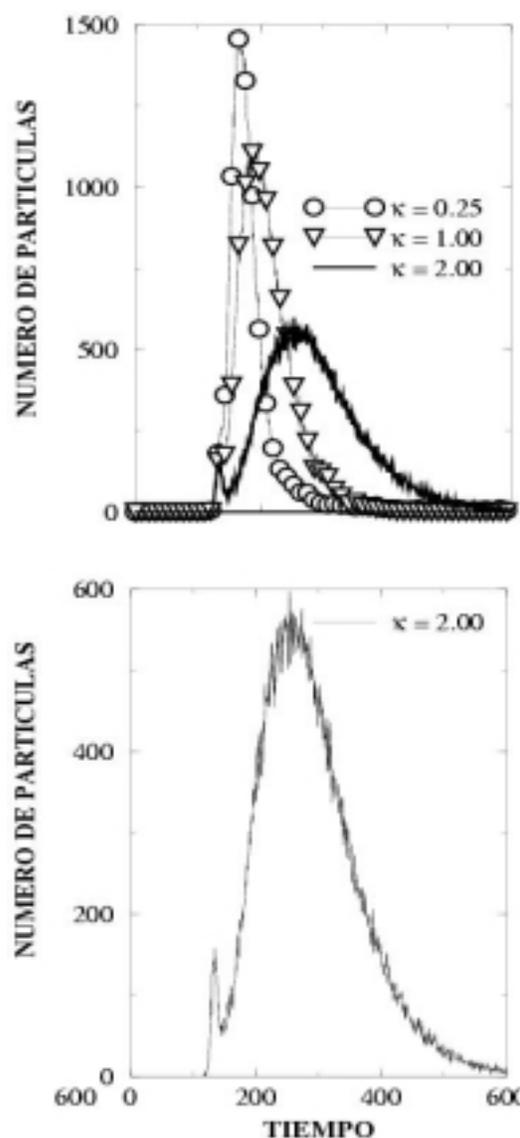


Figura 2. Curvas de irrupción para una fracción de ocupación de la fase no mojanete 0,2, para diferentes coeficientes de partición.

dad de tiempo es mucho menor debido a que el movimiento es únicamente por difusión. Esta información puede utilizarse para determinar la fracción de fase inmóvil.

- La separación entre los picos también crece si el parámetro variado es la

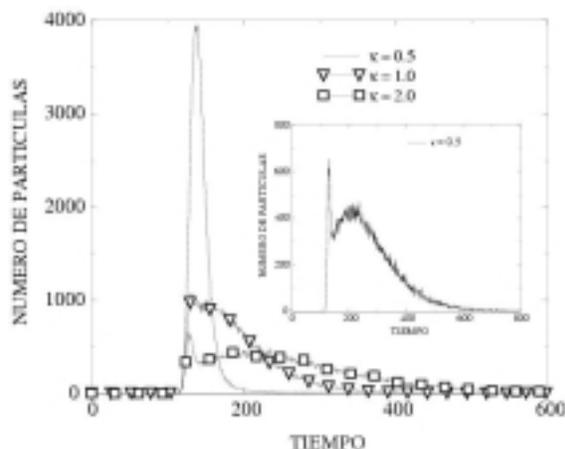


Figura 3. Curvas de irrupción para la fracción de ocupación de la fase no mojante correspondiente a 0,075. La muestra corresponde a un sistema bidimensional de 100x50 celdas, en el cual se asignó $D_m = 0,01$ en la fase mojante y $D_m = 0,001$ en la fase no mojante.

constante de difusión, aumentando la distancia entre picos a medida que la diferencia entre las constantes de difu-

sión en las dos fases sea mayor, ya que los tiempos de residencia difieren según la fase en que se muevan las partículas.

Agradecimientos

Los autores agradecen a PDVSA Intevep por el permiso para publicar este artículo.

Referencias Bibliográficas

1. LABOLLE E., QUASTEL J., FOGG G. *Water Resour Res* 34(7): 1685-1693, 1998.
2. KITANIDIS P., *Water Resour Res* 30(11): 3225-3227, 1994.
3. LABOLLE E., FOGG G., TOMPSON A. *Water Resour Res* 32(3): 583-593, 1996.
4. TOMPSON A., GELHAR L. *Water Resour Res* 26(10): 2541-2562, 1990.
5. BEAR J. *Dynamics of Fluids in Porous Media* Elsevier Pub. Co., New York (USA), 136-300, 1972.
6. GARDINER C. *Handbook of Stochastic Methods for Physics Chemistry and The Natural Sciences* Springer-Verlag, Berlin, 2nd Edition, 80-115, 1985.