Capítulo 1

Metodología Basada en Modelos de Red de Poros para la Estimación de Propiedades Efectivas de Flujo en Medios Porosos: Caso de Estudio para una Arenisca

Edgar G. Martínez Mendoza¹
Martín A. Díaz Viera²

Abstract: This work presents a methodological approach for porous media characterization at pore scale, in order to predict effective properties. Pore network modeling is a technique that has been booming in recent years, and several authors have used it to compute flow properties, which are regularly obtained by laboratory tests and/or experimental correlations. Briefly, the literature on pore network modeling is introduced, showing the versatility and rising application that this approach has earned in recent decades. In the same way, the pore network model elements and characteristics are described. Subsequently, a pore network model based methodology for obtaining effective flow properties is proposed. Finally, two case studies that show the methodology application are presented. In these case studies, flow processes and primary drainage through a sandstone are recreated in order to estimate absolute permeability, capillary pressure and relative permeability curves.

Keywords: Pore network model, primary drainage, fluid flow, immiscible displacement, relative permeability, capillary pressure.

Resumen: Este trabajo presenta un enfoque metodológico para la caracterización de medios porosos a escala de poro, con el propósito de estimar propiedades efectivas de flujo. La modelación de red de poros es una técnica que ha tenido gran auge en los últimos años, la cual varios autores la han empleado para obtener propiedades de

 $^{^{1}{\}rm edgarg.martinezm@gmail.com}.$ Universidad Nacional Autónoma de México

²mdiazv@imp.mx. Instituto Mexicano del Petróleo

flujo, las cuales son regularmente obtenidas por pruebas de laboratorio y/o correlaciones experimentales. De forma breve se presenta una revisión de la literatura de la modelación de red de poros, dejando ver la versatilidad y el auge de aplicación que ha obtenido este enfoque en las últimas décadas. De esta misma manera, se describen los principales elementos y características que conforman a una red de poros. Posteriormente, una metodología para la obtención de propiedades de flujo basada en modelos de red de poros es propuesta. Por último, se presentan dos casos de estudio que muestran la aplicación de la metodología propuesta. En estos casos se recrean los procesos de flujo y drene primario a través de una arenisca para así estimar permeabilidad absoluta, curvas de presiones capilares y permeabilidades relativas.

Palabras clave: Modelo de red de poros, drene primario, flujo de fluido, desplazamiento inmiscible, permeabilidad relativa, presión capilar.

1.1. Introducción

Los fenómenos de flujo y transporte en medios porosos (suelos, rocas, madera, etc.), así como matrices porosas sintéticas (concretos y tejido artificiales), surgen en diversos campos de la ciencia y la tecnología, que van desde la agricultura, biomedicina, construcción, cerámica, química y la industria petrolera, a ciencias de la alimentación y del suelo ([27]). En todos estos campos, los procesos se estudian a diferentes escalas de tiempo y espacio. Cada escala incorpora diferentes variables que intervienen en el comportamiento de los fenómenos físicos, de ahí que se necesiten metodologías adecuadas para la estimación de propiedades ([30, 28, 25]). Cualquier modelo para el estudio de fenómenos de flujo y transporte en un medio poroso debe incluir, como primer elemento, una descripción realista del medio ([12]). Sin embargo, la selección del modelo dependerá del tipo de medio que se desee estudiar y de las propiedades objetivo, así como las limitaciones computacionales que se tengan. En general, los modelos deben ser lo suficientemente simples para la simulación computacional y contener las características esenciales del medio poroso de interés.

El estudio a escala de poro es importante para desarrollar relaciones constitutivas que son difíciles e incluso imposibles de obtener a través de pruebas experimentales. Además, esta escala de estudio permite una mayor versatilidad en la selección de parámetros, una mayor variedad de datos cuantitativos, frecuencia de observación, diseños de experimentos numéricos más sencillos, y la incorporación de la morfología del medio; siendo esta última la característica que ha detonado un mayor interés en este enfoque ([5]). El modelado a escala de poro comprende tres aspectos: (i) la conceptualización de la geometría y estructura del medio, (ii) la formulación y solución de las ecuaciones físicas, y (iii) la definición de parámetros macroscópicos ([28]). De esta manera, es posible incluir propiedades del medio que en escalas más grandes son subestimadas. En este enfoque, el

medio poroso es representado por espacios vacíos distribuidos heterogéneamente, con fases fluidas y/o sólidas presentes. La heterogeneidad de esta escala, así como la complejidad de los sistemas saturados, conllevan desarrollos de teorías particulares.

A pesar del gran número de estudios de flujo y transporte en una y varias fases que se han hecho, el estudio de estos procesos a escala de poro está todavía en una etapa temprana ([33]). Sin embargo, la evolución computacional nos ofrece oportunidades para la simulación en dominios más grandes y el modelado de un rango de procesos más amplio. Esto hace que los enfoques a escala de poro sean potencialmente atractivos como herramientas de medición de propiedades referentes a un fenómeno; ejemplo de esto, los modelos de red de poros ([25]).

Los modelos de red de poros (MRP) fueron presentados por vez primera en los trabajos de Irving Fatt en 1956 ([24, 8, 25]). Fatt desarrolló un sistema de redes para el estudio de flujo a escala de poro. En sus trabajos observó la importancia de las fuerzas capilares en procesos de flujo de fluidos mediante una red física de resistores eléctricos. Demostró que con el empleo de redes de geometrías simples, tal y como lo hizo con su modelo de tubos capilares, es posible modelar los componentes esenciales del flujo en medios porosos ([13]). A partir de ese momento, se inició la mejora de las características de los MRP y la ampliación de su aplicación. Los trabajos de Lenormand and Boris, Chandler et al. muestran la incorporación de la teoría de la percolación con el fin de representar desplazamientos de fluidos inmiscibles en medios porosos. Esta característica es de gran importancia ya que permite simular procesos de drene primario y de imbibición ([23, 9, 10, 18, 3, 19]). La teoría de la percolación estudia propiedades de conectividad emergentes debido a una colección de objetos conectados. Los conceptos fundamentales de esta teoría fueron presentados por Flory y Stockmayer, quienes estudiaron los efectos de la conectividad de polímeros sobre propiedades macroscópicas de gelificación ([15, 34]). Basado en esas nociones, una teoría moderna fue presentada por Broadbent and Hammersley ([6]).

En el periodo de 1991-1994, varios temas de estudio emergieron. Los temas más prominentes fueron: 1) la estructura de poro y el papel de las correlaciones espaciales; 2) la influencia de diferentes mecanismos de imbibición y el papel de la películas de la fase mojante; 3) procesos de desplazamiento miscibles; 4) sistemas de flujo trifásico; 5) identificación de estructuras porosas ([8]). Posteriormente, otro de los grandes avances en MRP fue realizada por Oren et al.. Su trabajo consistió en el desarrollo de un método de reconstrucción de imágenes, por medio de un conjunto de esferas de diferentes tamaños para simular drene primario e inyección de agua en escenarios con cambio de mojabilidad, derivando así relaciones entre la estructura de poro, la mojabilidad y la presión capilar ([26, 31]).

Los modelos de red de poros contemplan varios campos de estudio, tales como geoestadística, técnicas de imagen, modelación matemática, entre otros, los cuales coadyuvan en la representación de los fenómenos deseados. Ejemplo de ello son los trabajos del Profesor Martin Blunt. Parte de sus investigaciones se

enfocan en técnicas especializadas de imagen de medios porosos y sus reconstrucciones tridimensionales. Después generan modelos para observar los efectos de diferentes factores en flujo de fluidos newtonianos y no newtonianos, para varios tipos de roca ([4, 5, 36]).

Para presentar una aplicación de los modelos de red de poros en la caracterización de medios porosos, este documento está estructurado de la siguiente manera. Primero, se presentan las características de los modelos de redes de poros. Después, se discuten los elementos de una metodología de modelación propuesta. Finalmente, se desarrollan dos casos de estudios que muestran la aplicación de la metodología. En estos casos, se recrean flujo y drene primario para estimar permeabilidad absoluta, presión capilar y permeabilidad relativa.

1.2. Modelos de red de poros

Un modelo de red de poros es un enfoque que permite estudiar una amplia gama de fenómenos, tomando en cuenta tanto la geometría como la conectividad del medio. Una de las principales aplicaciones es estimar propiedades efectivas de flujo y transporte, tales como: curvas de presión capilar, permeabilidades efectivas, coeficiente de difusión efectiva, entre otras, las cuales, regularmente son obtenidas por pruebas de laboratorio y/o correlaciones experimentales. Los modelos de red de poros discretizan la morfología del medio, la cual se conforma por (i) la geometría de la estructura interna y (ii) la forma en la que el medio está conectado (topología) ([30]). En principio, la estructura interna, que representa la porosidad, se constituye de poros y gargantas. Los poros se definen como los espacios vacíos más grandes del medio que son conectados por caminos más estrechos llamados gargantas ([5]).

En general, las partes fundamentales de los modelos de red de poros son la estructura del medio y los modelos de los fenómenos físicos, acordes a la escala de estudio. El primer elemento es conocido comúnmente como geometría, el cual consiste en expresar la conectividad del medio y la de representar mediante entes geométricos a los poros y gargantas ([1]). El segundo elemento son las expresiones matemáticas que describen a los fenómenos en el medio poroso. Acoplar óptimamente estos elementos, permitirá estimaciones admisibles ([25, 2]). En este trabajo, se descomponen los dos elementos principales con el fin de entender mejor el modelo en general. Los elementos que se obtienen son: (i) red, (ii) geometría, (iii) fases, (iv) física a escala de poro, y (v) métodos (véase Figura 1.1). La extensión y capacidad de estos cinco elementos mejorará el alcance del modelo de red de poros, de ahí la importancia que existan líneas de estudio para cada uno de ellos. A continuación, se describe brevemente cada elemento.

• Red. Es el conjunto de sitios localizados en el espacio, los cuales se pueden entrelazar a través de enlaces ([27]). La red es el elemento que denota la conectividad del medio, sustenta la geometría del modelo y funge como malla de simulación. La conectividad entre nodos y enlaces está descrita

por el número de coordinación z, el cual describe el número de enlaces conectados a un nodo.

- Geometría. Se emplean entes geométricos localizados en la red del modelo para representar la estructura interna del medio. Los nodos sustentan a los poros; mientras que, los enlaces a las gargantas. Estos elementos pueden tener tanto formas regulares como irregulares, siendo las primeras quienes ofrecen una mayor facilidad para describir el comportamiento de los procesos físicos; pero, las formas irregulares permiten ampliar el campo de estudio sobre factores que en escalas mayores son despreciables ([30]).
- Fases. Las fases que se recreen deben de ser caracterizadas física y químicamente, a través de ecuaciones o correlaciones. El modelo puede considerar tanto fases fluidas como sólidas; por consiguiente, el modelo de red de poros puede simular procesos en una fase y multifásicos.
- Física a escala de poro y métodos. Para establecer el comportamiento de las fases a escala de poro, se debe combinar la geometría de poros y gargantas con definiciones, leyes y ecuaciones físicas de las fases; de esta forma, se describen expresiones apropiadas para el modelo de red de poros. A esto último, se le conoce como física a escala de poro ([21, 16]). A partir de estas declaraciones, se formulan métodos que denotan la naturaleza de los eventos deseados.

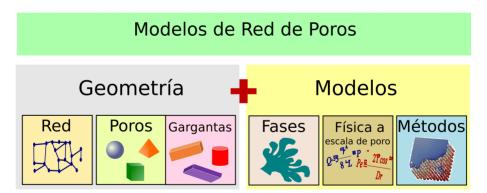


Figura 1.1: Elementos que constituyen a un modelo de red de poros: (i) red, (ii) geometría, (iii) fases, (iv) física a escala de poros, y (v) métodos.

Los fenómenos de interés para este trabajo son flujo y drene primario. Estos fenómenos nos permitirán estimar valores de permeabilidad absoluta y curvas de presión capilar y de permeabilidad relativa. Por lo cual, se requiere establecer un modelo de flujo y el método para recrear drene primario en redes de poros. Los modelos matemáticos, para flujo y drene primario, se presentan a continuación.

1.3. Flujo

El flujo a través del modelo de red de poros considera la relación Hagen-Poiseuille, la cual describe el flujo laminar de un fluido newtoniano incompresible a través del modelo, bajo la acción de un gradiente de presión aplicado a los extremos:

$$q = -\frac{\pi r^4 \Delta p}{8\mu l} \tag{1.3.1}$$

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

$$\kappa = \frac{\pi r^4}{8\mu l} \tag{1.3.2}$$

Realizando un balance de masa para el flujo volumétrico en cada poro en la red, y sustituyendo la Ecuación 1.3.2, da lugar al modelo de flujo:

$$\sum_{j=1}^{n} \kappa_{ij} (p_i - p_j) = 0 \tag{1.3.3}$$

Donde κ es la conductancia hidráulica total de flujo que conecta a los poros i y j, mientras que p_i y p_j son las presiones en cada elemento. La conductancia hidráulica total es calculada como la conductancia hidráulica a través de la mitad del poro i, la garganta conectora t, y la mitad del poro j. Este parámetro depende del tamaño y longitud de los poros y gargantas. La conductancia hidráulica total para el ensamble poro-garganta-poro se obtiene considerando la teoría de resistores, para resistores en serie:

$$\frac{1}{\kappa_{ij}} = \frac{1}{2\kappa_i} + \frac{1}{\kappa_t} + \frac{1}{2\kappa_j} \tag{1.3.4}$$

El sistema a resolver es representado por la Ecuación 1.3.3, la cual expresa el flujo volumétrico a través de la red. Expandiendo la expresión en la red, se conforma un sistema de ecuaciones de la forma $A\underline{x} = \underline{b}$, donde A es una matriz bandeada conformada por las conductividades κ_{ij} , \underline{x} es el vector de presiones en los poros, y \underline{b} contiene los valores de las condiciones de frontera.

Una vez resuelto el problema de flujo, la permeabilidad absoluta del modelo de red de poros se obtiene mediante la Ley de Darcy:

$$K = \frac{\mu QL}{A(p_{inlet} - p_{outlet})} \tag{1.3.5}$$

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

1.4. Drene primario

Los desplazamientos de un fluido por otro fluido inmiscible en un medio poroso son conocidos en la literatura de ingeniería de yacimientos petroleros como procesos de drene e imbibición. Un gran número de factores afectan a esta clase de fenómenos, tales como: fuerzas capilares y de gravedad, las viscosidades de los fluidos, la tensión interfacial, las propiedades físicas del medio, y la conectividad del medio ([30]). La presente investigación se enfoca solamente a pruebas de drene, en el cual un fluido mojante que inicialmente satura al medio (fluido defensor) es desplazado por un fluido no mojante (fluido invasor).

El modelo de drene para redes de poros considera fundamentos de la teoría de percolación, ya que permite representar el avance del fluido invasor de forma sistemática ([30, 22, 9, 37, 24]), siendo la presión capilar el discriminante para la secuencia de invasión. El cálculo de este parámetro depende tanto de la forma geométrica del conducto como de las propiedades del fluido. Para este trabajo, al ser las gargantas representadas por cilindros, se considera la ecuación de Young-Laplace:

$$p_c = -\frac{2\sigma\cos\left(\theta\right)}{r}\tag{1.4.1}$$

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

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

1.5. Metodología de modelación

En la literatura, no se ha encontrado un flujo de trabajo general que describa la aplicación de los MRP; no obstante, se reconocieron prácticas recurrentes. Tras esta revisión, se seleccionaron los procedimientos y técnicas fundamentales, para así conformar una metodología de modelación. Cabe mencionar que cada com-

ponente de la metodología puede dividirse en más disciplinas, permitiendo así un mejor alcance de estudio. Sin embargo, se debe procurar un progreso equivalente en cada uno de los elementos ([25]). La metodología, la cual es esquematizada en la Figura 1.2, comprende cinco etapas fundamentales: adquisición de los datos, análisis estadístico, modelo de redes de poros, validación y evaluación de la incertidumbre, y aplicación en modelos de flujo multifásico.

1.5.1. Adquisición de los datos

En esta etapa se obtienen las propiedades que caracterizan al medio poroso, a los fluidos, y a las interacciones del medio poroso con los fluidos. Es crucial describir la forma y tamaño de los poros y de las gargantas, así como la forma en que se conectan estos elementos. Por lo cual, de la información a recolectar deben encontrarse las siguientes propiedades: ubicación espacial, número de coordinación, área, diámetro inscrito, perímetro, longitud total, volumen, sección transversal, factor de forma, entre otras. Para caracterizar el medio poroso existen técnicas de imágenes tales como el microscopio electrónico de barrido (1-20 [nm]), el haz de iones focalizados (<1 [nm]), el microscopio confocal de barrido láser (1 $[\mu m]$), la microtomografía computarizada de rayos X (1-200 $[\mu m]$), y la resonancia magnética nuclear (2 [nm]-1 $[\mu m]$) ([38, 11]). Del procesamiento de las imágenes obtenidas de estas técnicas, se infieren los tamaños de poros y gargantas, las coordenadas de los nodos de la red y sus conexiones con otros nodos. Finalmente, para caracterizar a los fluidos y al sistema roca-fluido se realizan pruebas de laboratorio para medir la densidad, viscosidad, tensión interfacial, ángulo de contacto, etc.

1.5.2. Análisis estadístico de los datos

Esta etapa comprende realizar análisis estadísticos de las principales propiedades de la estructura del medio (tamaños de gargantas y poros, número de coordinación, entre otras) para ajustar funciones de distribución de probabilidad. Las funciones de distribución de probabilidad generarán posteriormente las propiedades seleccionadas para medios análogos al original. Además, se recomienda ampliamente realizar análisis estadísticos espaciales de los nodos de la red para inferir propiedades de conectividad y de percolación, y con éstas construir un modelo estocástico espacial, a partir del cual se pueden obtener diferentes realizaciones del modelo de red de poros.

1.5.3. Modelo de red de poros

Las etapas anteriores conforman un marco óptimo para establecer los elementos fundamentales de una red de poros: red, geometría, fases, física a escala de poro y métodos. La complejidad y detalle con que se representen la red y geometría será punto de partida para establecer la física a escala de poro, y por consecuencia el alcance de los métodos.

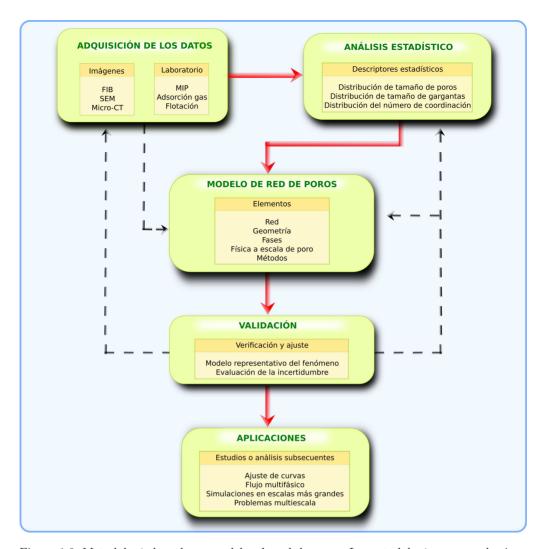


Figura 1.2: Metodología basada en modelos de red de poros. La metodología comprende cinco etapas fundamentales: adquisición de los datos, análisis estadístico, modelo de redes de poros, validación y evaluación de la incertidumbre, y aplicación en modelos de flujo multifásico. La línea roja señala el seguimiento propuesto de la metodología. Sin embargo, dependiendo de la etapa en curso, se pueden llevar a cabo desviaciones del flujo sugerido (línea negra discontinua). Por ejemplo, una red de poros se puede generar directamente en la adquisición de datos (redes extraídas), sin realizar un análisis estadístico previo. Del mismo modo, es posible crear una red si el flujo de trabajo comienza en el análisis estadístico. Finalmente, después de la validación y la evaluación de incertidumbre, el flujo de trabajo puede regresar a la adquisición de datos o al análisis estadístico para generar nuevas realizaciones.

En principio, un modelo de red de poros se puede obtener a partir de una reconstrucción tridimensional de la muestra, y de la extracción de la red y la geometría de los poros y gargantas. Aunque esta forma de trabajo es una de las más frecuentes, no siempre se puede contar con la información y/o herramientas

necesarias. Además, si se trabaja con una única red extraída, nuestra ventana de estudio será estrecha, y hasta posiblemente no representativa. Por lo cual, realizar el análisis estadístico de los datos ofrece la ventaja de generar diferentes realizaciones de los elementos de red y geometría, y por consecuencia generar diferentes modelos de red de poros. Posteriormente, los resultados de las simulaciones con estos modelos conformarán una ventana de confiabilidad, la cual describe un rango de valores que pueden tomar las propiedades objetivo para el medio bajo estudio.

1.5.4. Validación y evaluación de la incertidumbre

La validación de los resultados de las estimaciones de propiedades, como porosidad, permeabilidad absoluta, presión capilar, y permeabilidad relativa, se realiza mediante la comparación contra datos de pruebas de laboratorio correspondientes. Ésto con el fin de verificar, ajustar y garantizar que la implementación del modelo de red de poros sea representativa de la naturaleza de los fenómenos. Además, se sugiere realizar múltiples simulaciones y explorar el espacio de los parámetros del modelo de red de poros (por ejemplo, diferentes realizaciones de la red y de las distribuciones de gargantas y poros) con lo que se obtiene una evaluación de la incertidumbre.

1.5.5. Aplicación en modelos de flujo multifásico

Finalmente, los valores de las propiedades objetivo serán empleadas en análisis o estudios posteriores, tales como ajuste de ecuaciones, modelos de flujo multifásico, simulaciones a escalas más grandes, estudios multiescala, entre otras.

En este trabajo, se emplea la metodología descrita para recrear procesos de flujo y desplazamiento inmiscible en dos casos de estudio. A partir de esto, son estimados la permeabilidad absoluta, la presión capilar y las permeabilidades relativas, mediante el *software* de código libre y multiplataforma *OpenPNM*. Estas propiedades son cruciales en estudios de recuperación de petróleo, ya que la recuperación observada depende en gran medida de estos parámetros.

1.6. Caso de estudio 1

Este caso recrea la porosimetría de intrusión de mercurio en una muestra de arenisca. En la recreación, consideramos las condiciones y propiedades reportadas en una prueba de laboratorio. Sin embargo, dado que no se pudo acceder al servicio de análisis de imágenes, se emplea la información de libre acceso de una arenisca genérica, que, en términos de propiedades geológicas, es similar a la muestra considerada en el experimento. La información de la arenisca genérica, denominada arenisca S1, provienen de una reconstrucción tridimensional ([20]). La geometría y la topología de la muestra arenisca S1 se obtuvieron por técnicas de imagen y reconstrucción tridimensional. Las imágenes fueron adquiridas por Dong a través de microtomografía computarizada ([11]).

Brevemente, el flujo de trabajo se describe de la siguiente manera: de acuerdo con la información disponible de la arenisca S1, se realiza un análisis estadístico de los tamaños de poro y garganta, y se ajustan dos modelos de distribución de probabilidad. De la información original, se toma la red irregular y la geometría de poros y gargantas. Posteriormente, se definen las propiedades de los fluidos considerados en nuestra recreación. Finalmente, se simula flujo y drene primario para estimar permeabilidad absoluta y presión capilar, respectivamente.

Estadígrafo	$d_p \ [\mu m]$	$d_t \ [\mu m]$	z
N	1868	3048	1868
Mínimo	1.77	1.74	0
Primer cuartil	28.55	11.98	2
Mediana	45.05	21.47	3
Media	51.17	24.63	3.15
Tercer cuartil	68.86	33.28	4
Máximo	228.00	121.70	20
Rango	226.23	119.95	20
Rango intercuartil	40.30	21.29	2
Varianza	943.67	280.59	4.99
Desviación estándar	30.71	16.75	2.23
Asimetría	1.03	1.26	1.76
Curtosis	1.44	2.28	6.30

Cuadro 1.1: Descripción estadística de los valores de diámetro de poro d_p y garganta d_t , y del número de coordinación z de la muestra arenisca S1.

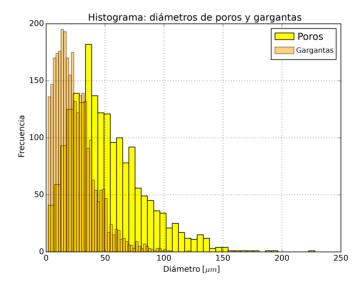


Figura 1.3: Histograma de los diámetros de poro (amarillo) y garganta (naranja) de la muestra arenisca S1. Esta información fue considerada para establecer el modelo de red de poros del caso de estudio 1.

La estadística descriptiva para los diámetros de poro y garganta de la muestra arenisca S1 se presenta en el Cuadro 1.1. El mismo análisis descriptivo se realizó para el número de coordinación z. La información puede emplearse para generar modelos estocásticos a la muestra original. En principio, los modelos generados deben de recrear la estadística de las propiedades seleccionadas, para así garantizar medios análogos al original. Los histogramas de los valores de diámetro de poros/gargantas y del número de coordinación se muestran en la Figura 1.3 y Figura 1.4, respectivamente.

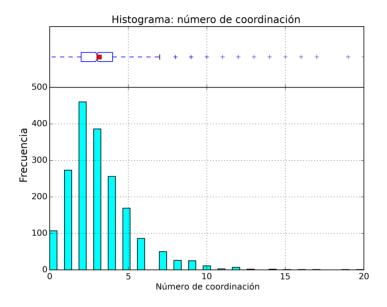


Figura 1.4: Histograma del número de coordinación de la muestra arenisca S1.

El modelo de red de poros, que discretiza a la muestra arenisca S1, consta de una red irregular en un sistema coordenado x-y-z. Los poros se representan por esferas y las gargantas por cilindros regulares; además, los poros y gargantas poseen una sección transversal circular. Para este propósito, utilizamos la plataforma OpenPNM, el cual es un marco de trabajo de código abierto para el modelado de redes de poros que permite administrar una amplia gama de algoritmos ([17, 14, 35, 29]). Además, este software es empleado para llevar a cabo las simulaciones del presente trabajo. En la Figura 1.5 se muestra el modelo de red de poros generado, en donde los poros están en rojo y las gargantas en azul. Más detalles sobre la red empleada se resume en el Cuadro 1.2. Cabe señalar que para generar la red de poros, se descartaron los poros aislados y los que no se encontraban conectados a otros elementos (z=0). De ahí que el modelo empleado constará de 1717 poros y 2824 gargantas (valores menores a los reportados en el Cuadro 1.1).

	Arenisca S1
Red	Red irregular 1717 poros 2824 gargantas Volumen = $1.76\text{E-8} \ [m^3]$ Porosidad = $14.35 \ (\%)$ Permeabilidad absoluta = $1.53\text{E-}12 \ [m^2]$
Geometría	Poros: esferas Gargantas: cilindros Sección transversal: circular Diámetros reportados por Dong [11]
Física	Presión capilar: Young-Laplace Conductividad hidráulica para esferas y cilindros

Cuadro 1.2: Descripción del modelo de red de poros empleado en el caso de estudio 1.

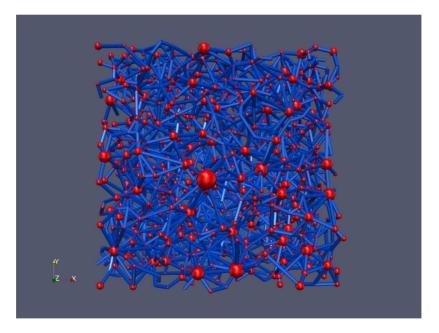


Figura 1.5: Modelo de red de poros que discretiza el espacio poroso de la arenisca S1. Los poros se representan por esferas (rojo) y las gargantas por cilindros (azul). Este modelo es empleado en el caso de estudio 1 para recrear flujo y drene primario.

En el modelo se identifican dos conjuntos de poros, que conforman dos caras externas del modelo. Estas caras representan la entrada y salida para los procesos aquí presentados. Para reconocer estos conjuntos, la información de la arenisca S1 describe indirectamente la condición (entrada o salida) de los poros. Sin embargo,

solo se reporta un par de caras entrada-salida, cuya dirección es en el eje x del modelo. Al no encontrar un discriminante satisfactorio para establecer los poros entrada y salida correspondientes a las direcciones y y z, en este trabajo se desarrollan las simulaciones en una sola dirección.

1.6.1. Permeabilidad absoluta

El cálculo de la permeabilidad absoluta de la muestra S1 conlleva resolver el problema de flujo. Consideramos el flujo de mercurio a través de la red, en dirección del eje x del modelo. Además, se establece que los poros entrada conforman una condición de frontera con valor de 0.6 [Pa]; de la misma manera, el conjunto de poros salida constituyen una frontera con una presión de 0.2 [Pa]. Con estos datos, tras resolver el problema de flujo, se obtuvo una permeabilidad absoluta igual a 4.38E-12 $[m^2]$. El Cuadro 1.3 resume las principales propiedades obtenidas de la simulación de flujo realizada en OpenPNM. La presión resultante en la red, al finalizar el algoritmo de flujo, se visualiza en la Figura 1.6.

Propiedad	Valor	Unidad
Longitud del modelo, L Área de la sección transversal del modelo, A Flujo volumétrico, Q Permeabilidad absoluta, K	0.0024 6.82E-06 3.14E-12 4.38E-12	$m \\ m^2 \\ m^3/s \\ m^2$

Cuadro 1.3: Propiedades obtenidas de la simulación de flujo para el caso de estudio 1.

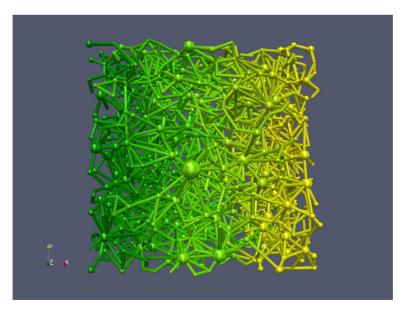


Figura 1.6: Presión resultante en la red al finalizar el algoritmo de flujo en el caso de estudio 1. La dirección del flujo fue de izquierda a derecha.

1.6.2. Presión capilar

En la simulación de drene primario, el desplazamiento consideró un sistema mercurio-aire, siendo la fase defensora el aire, mientras que el mercurio la fase invasora. La dirección del desplazamiento fue en el eje x del modelo, a través del plano y-z. Bajo estas condiciones, el algoritmo requirió una secuencia de 87 pasos para que el mercurio lograra desplazar al aire de la red. Un momento importante en los procesos de desplazamiento inmiscibles es cuando el sistema alcanza la ruptura. La ruptura se da lugar cuando la fase invasora llega a la frontera de salida. En nuestra simulación, el sistema logra la condición de ruptura a una saturación de mercurio (s_m) igual a 28.04%; condición que necesitó 17 pasos de la secuencia de invasión. La Figura 1.7 presenta el momento cuando el mercurio alcanza la cara opuesta a la entrada. En azul se representan los poros y gargantas que almacenan aire (fase defensora), y en rojo los de mercurio (fase invasora).

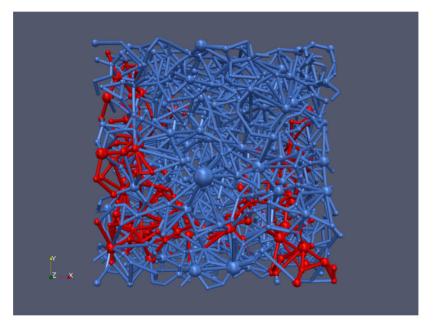


Figura 1.7: Secuencia de invasión de mercurio en la red de poros para el caso de estudio 1. La imagen presenta el momento cuando el mercurio alcanza la cara opuesta a la entrada. En azul se representa a los poros y gargantas que almacenan aire (fase defensora), y en rojo los de mercurio (fase invasora). El desplazamiento fue de izquierda a derecha.

De la secuencia de invasión se calculan los valores de presión capilar para el sistema mercurio-aire. En la Figura 1.8 se grafica la presión capilar contra saturación, donde los valores de presión capilar van desde 0.3 hasta 680 [kPa]. Además, se obtiene una saturación de aire (s_a) irreductible de 23.58 %. Información relacionada a la simulación de drene primario se resume en el Cuadro 1.4.

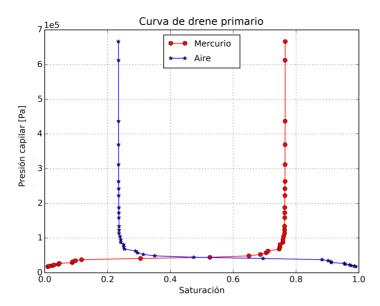


Figura 1.8: Curva de presión capilar para el caso de estudio 1. La curvas fueron calculadas a partir de la simulación de drene primario mediante el enfoque de red de poros. En el algoritmo se consideró al aire (azul) como la fase defensora, y al mercurio (rojo) como la invasora.

Propiedad	Valor
Número de pasos en la secuencia de invasión	87
Saturación de aire irreductible s_{airr}	23.58%
Secuencia de invasión en la ruptura	17
Poros invadidos en la ruptura	179
Gargantas invadidas en la ruptura	176
Saturación de aire en la ruptura	28.04%
Saturación de mercurio en la ruptura	71.96%

Cuadro 1.4: Información obtenida de la simulación de drene primario para el caso de estudio 1.

1.6.3. Permeabilidades relativas

A partir de la secuencia de invasión de drene primario y del algoritmo de flujo, se estimó la curva de permeabilidades relativas para la arenisca S1, en la dirección x del modelo. La Figura 1.9 muestra el comportamiento de la permeabilidad relativa del aire k_{ra} (en azul) y del mercurio k_{rm} (en rojo).

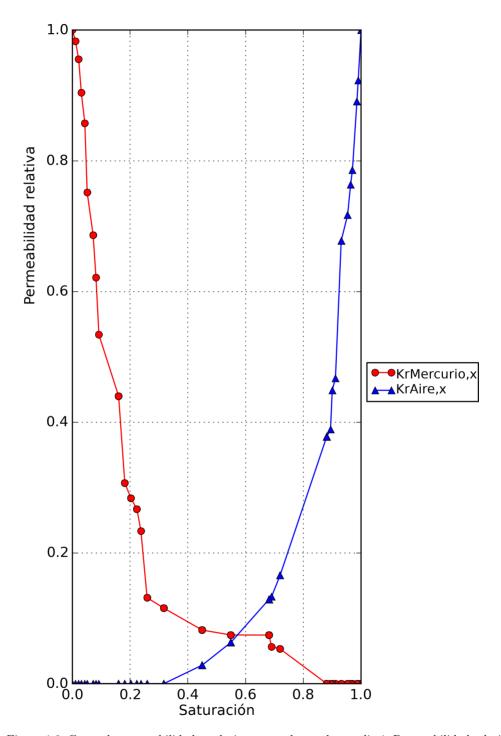


Figura 1.9: Curva de permeabilidades relativas para el caso de estudio 1. Permeabilidad relativa del mercurio en rojo, y en azul la permeabilidad relativa del aire.

Comenzando con una saturación de aire igual a $100\,\%$, las curvas indican que una disminución en la saturación de aire al $88\,\%$ (un aumento de s_m a $12\,\%$) reduce fuertemente la permeabilidad relativa al aire de 1.0 a 0.37, en cambio la permeabilidad relativa al mercurio es prácticamente 0. Este valor de saturación de mercurio de $12\,\%$ es denominada saturación crítica; saturación a la que el mercurio comienza a fluir a medida que la saturación de mercurio aumenta. También se denomina saturación residual de mercurio (s_{mr}) al valor por debajo del cual no puede reducirse la saturación en un sistema mercurio-aire. A medida que la saturación de aire disminuye, la permeabilidad relativa al aire también disminuye, en tanto que la permeabilidad relativa al mercurio aumenta. A una saturación de aire del $32\,\%$, la permeabilidad relativa al aire se hace nula y la permeabilidad relativa al mercurio es alta. A esta saturación de aire de $32\,\%$ es conocida como saturación crítica, y puede ser mayor o igual a la saturación irreductible del aire.

De acuerdo con la metodología propuesta, la arenisca S1 posee características geométricas y de conectividad para representar a un medio poroso real. Sin embargo, no se cuentan con datos experimentales suficientes para recrear tanto el proceso de flujo como el de desplazamiento. Hasta este momento, no se ha encontrado algún trabajo que emplee la misma muestra, tanto para simulación como para prueba experimental. A los resultados aquí presentados, al no poder ser comparados con otra estimación, no es capaz de verificar su precisión y exactitud, así como evaluar la implementación realizada.

1.7. Caso de estudio 2

Del caso anterior, el análisis exploratorio de los tamaños de poros y gargantas nos permite conocer estadígrafos que denotan la estructura interna del medio. En ocasiones no es posible contar con la reconstrucción del medio poroso y/o el modelo de red de poros extraído. En esta sección, la descripción estadística, en términos de distribuciones de probabilidad, se emplea como una alternativa en la generación de la red de poros. Para ello, consideramos que la topología de la arenisca S1 es invariante y generamos los tamaños de poro/garganta a partir de distribuciones tipo Weibull, las cuales fueron ajustadas al análisis exploratorio del caso 1. Tras establecer estas condiciones, se realizaron 100 modelos de red de poros con diferentes tamaños de poros y gargantas cada uno; pero, que comparten la misma topología. El Cuadro 1.5 resume los parámetros de las distribuciones ajustadas.

Propiedad	Forma	Localización	Escala
Poro	1.62	1.22	55.93
Garganta	1.37	1.63	25.11

Cuadro 1.5: Parámetros de ajuste de la distribución tipo Weibull para el caso de estudio 2.

Los modelos generados se emplearon para recrear drene primario, donde un

aceite de interés es la fase invasora y una salmuera la fase defensora. Esta información se tomó de una prueba experimental de drene primario en una arenisca similar a la arenisca S1 (véase Cuadro 1.6). En la recreación, se establecieron las condiciones y propiedades de la prueba experimental, y consideramos que el medio es preferiblemente mojado por agua. Además, la curva experimental (Figura 1.10) se empleó como referencia en nuestros resultados.

Propiedad	Valor
Fase defensora Fase invasora Saturación de agua residual s_{wr}	Salmuera Aceite 30 %
Tensión interfacial σ Ángulo de contacto θ	$0.0356 \ [N/m]$ $35 \ (^{\circ})$

Cuadro 1.6: Información de una prueba experimental considerada en el caso de estudio 2.

Con los 100 modelos de red de poros, se realizaron 100 simulaciones de drene primario donde las propiedades del Cuadro 1.6 se mantuvieron constantes para todos los escenarios. Lo que varió en cada modelo fue su geometría, en términos de los tamaños de poros y gargantas. De esta forma, se evaluó el impacto de una misma distribución de tamaños de poros y gargantas, pero para diferentes realizaciones, en la curva de presión capilar. La familia de curvas de presión capilar, para los sistemas aceite-salmuera, se muestran en la Figura 1.11. De la nube de puntos (en gris), se halló la curva mediana (en rojo) de las 100 realizaciones.

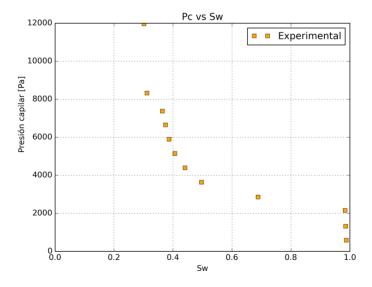


Figura 1.10: Curva experimental de presión capilar para una arenisca. Esta curva se tomó de una prueba experimental de drene primario para un sistema de arenisca-aceite-salmuera. Las condiciones y propiedades reportadas en la prueba se consideraron para establecer modelos de red de poros.

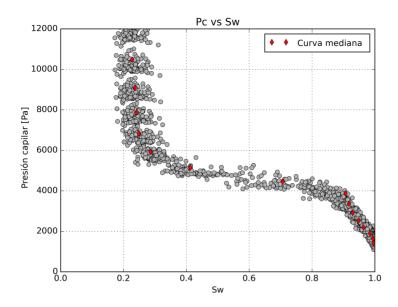


Figura 1.11: Curvas de presión capilar. Los valores de presión-saturación fueron generados a partir de 100 simulaciones de drene primario. Los puntos en rojo muestran la curva mediana de los puntos $p_c(s_w)$ en gris.

La principal ventaja de obtener una familia de curvas, que potencialmente podría ser considerada característica de la arenisca S1, es la de ajustar un modelo del tipo $p_c(s_w)$. En este trabajo, consideramos los modelos de Brooks and Corey y Skjaeveland et al. para ajustar un modelo $p_c(s_w)$ a la familia de curvas, dado que ambos modelos son capaces de recrear escenarios de mojabilidad al agua ([7, 32]). La representación matemática de los modelos es:

Brooks and Corey

$$p_c = p_t s_e^{-\frac{1}{\lambda}} \tag{1.7.1}$$

Donde p_c es presión capilar, p_t es la presión de entrada, λ es un índice que caracteriza la distribución de los tamaños de poros, y s_e es la saturación efectiva. La saturación efectiva es definida como:

$$s_e = \frac{s_w - s_{wr}}{1 - s_{wr}} \tag{1.7.2}$$

Donde s_w es la saturación del fluido mojante (por ejemplo agua), s_{wr} y s_{nwr} son las saturaciones residuales de los fluidos mojante y no mojante, respectivamente.

Skjaeveland et al.

$$p_c = \frac{c_w}{\left(\frac{s_w - s_{wr}}{1 - s_{wr}}\right)^{a_w}} - \frac{c_o}{\left(\frac{s_o - s_{or}}{1 - s_{or}}\right)^{a_o}}$$
(1.7.3)

Donde s_w es la saturación del agua y s_o la saturación del aceite. El subíndice r hace referencia a las saturaciones residuales. Para drene primario, $c_o = 0$ y c_w es igual a la presión de entrada. Cuando es imbibición, $c_w = 0$ y c_o equivale a la presión de entrada del agua en el medio $100\,\%$ saturado por aceite. Los parámetros a_w y a_o describen el índice de la distribución del tamaño de poro.

La Figura 1.12 presenta la comparación entre las curvas de presión capilar experimental (en amarillo), las simuladas (en gris) y las ajustadas. De manera cualitativa, se nota que el modelo de Skjaeveland sigue el comportamiento de la nube de puntos. Por su parte, el Cuadro 1.7 resume los parámetros de los modelos ajustados. Posteriormente, se calcularon dos curvas de presión capilar para las condiciones de la prueba experimental ($s_{wr}=0.3$) y empleando los modelos ajustados (Cuadro 1.7). En principio, se esperaría que estas nuevas curvas fueran lo más cercanas a la curva experimental. La Figura 1.13 muestra la curva experimental y las generadas con los modelos de Brooks-Corey (en verde) y Skjaeveland (en azul). De esto, se obtienen que el modelo Skjaeveland es el representativo de la prueba experimental, lo cual es debido a que la relación $p_c(s_w)$ reproduce ambas asíntotas de la curva experimental (en $s_w=0.3$ y 1.0).

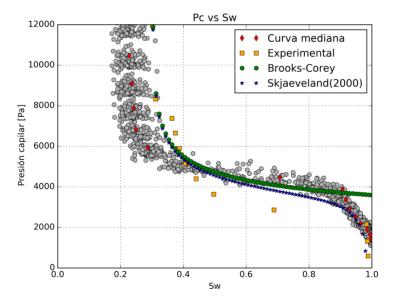


Figura 1.12: Comparación entre las curvas de presión capilar experimental (amarillo), simuladas (gris) y ajustadas, para un proceso de drene en un sistema arenisca-aceite-salmuera. En el ajuste de curvas, se consideraron el modelo de Brooks-Corey (verde) y el de Skjaeveland (azul).

Modelo de $p_c(s_w)$	Parámetros
Brooks-Corey	$p_t = 3599, \ \lambda = 0.22$
Skjaeveland	$c_w = 3583, a_w = 0.22, c_o = -889, a_o = 0.87$

Cuadro 1.7: Modelos ajustados de Brooks-Corey y Skjaeveland para el caso de estudio 2.

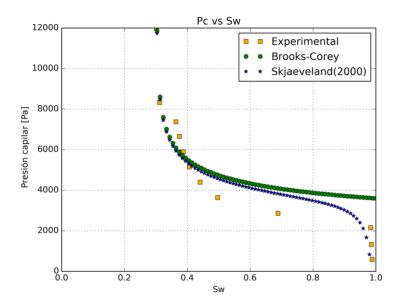


Figura 1.13: Curvas de presión capilar a partir de un modelo Brooks-Corey (verde) y Skjaeveland (azul). Los modelos tomaron en cuenta parámetros de la curva experimental (amarillo) para estimar los valores $p_c(s_w)$. En la imagen, se observa que el modelo de Skjaeveland sigue y reproduce ambas asíntotas de la curva experimental.

Los resultados del caso 2 muestran que los modelos de red de poros conforman una herramienta predictiva de propiedades efectivas de flujo en medios porosos. En el caso seleccionado, bajo las características de la prueba experimental y de la arenisca S1, se establece un modelo $p_c(s_w)$ particular para el medio poroso discretizado, así como una ventana de confianza para la presión capilar.

1.8. Conclusiones

A través de este trabajo, establecimos y propusimos una metodología para estudiar fenómenos a escala de poro. Esta propuesta considera los modelos de red de poros como enfoque para discretizar y caracterizar un medio poroso a escalas muy finas. También, la metodología permite establecer un modelo de red de poros como herramienta en la estimación de propiedades efectivas. La principal ventaja

23

de esta metodología es que posee un carácter general y a la misma vez flexible, ya que las etapas y la secuencia de trabajo no son restrictivas. Además, esta propuesta puede emplearse en cualquier fenómeno de interés para medios porosos. Sin embargo, en el flujo de trabajo sugerido, pueden ser requeridas diferentes áreas multidisciplinarias, tales como la estadística, geoestadística, procesamiento de imágenes, ajuste de curvas, entre otras. En particular, este estudio se caracteriza por presentar una metodología sistemática. En la literatura sobre modelos de red de poros, se han reconocido técnicas y procedimientos recurrentes para el estudio de diferentes fenómenos, pero no se ha establecido un flujo de trabajo concreto para esta escala.

A través de dos estudios de caso, aplicamos la metodología propuesta para evaluar el alcance y versatilidad de los modelos de red de poros. En el caso 1, se simuló flujo y drene primario a través de una arenisca, para predecir permeabilidad absoluta, presión capilar y permeabilidad relativa. La información disponible de la arenisca seleccionada fue la idónea para seguir nuestra metodología. Sin embargo, al no encontrar otro trabajo que use la misma muestra, no se logró validar los resultados. En el caso 2, mostramos la importancia de tomar en cuenta el análisis estadístico en nuestra metodología, ya que se generaron diferentes redes que diferían en sus tamaños de poro y garganta. Esta generación de modelos consideró distribuciones de probabilidad tipo Weibull. A partir del conjunto de redes de poros, ajustamos un modelo de presión capilar para una arenisca, la cual puede describir un comportamiento particular de presión capilar para la muestra de roca dada.

Como trabajo futuro, se plantea desarrollar modelos que consideren la variabilidad espacial de las propiedades de los fluidos. Es de gran interés estudiar el impacto de tensión superficial y ángulo de contacto sobre las curvas de presión capilar y de permeabilidad relativa. Con respecto a la geometría de los modelos de red de poros, queda por examinar formas irregulares para la representación de poros y gargantas, lo que nos permitiría estudiar los efectos de la mojabilidad.

Nomenclatura

Subíndices

c Capilar, presión

e Efectiva, saturación

i Índice de poro

ij . . . Índice de garganta

j Índice de poro

nw ... Fluido no mojante

r Residual, saturación

w Fluido mojante

Símbolos griegos

 κ Conductancia hidráulica

 λ Índice que caracteriza la distribución del tamaño de poro

 μ . . . Viscosidad

Símbolos

A Área de la sección transversal

K Permeabilidad absoluta

L Longitud del modelo de red de poros

l Longitud de garganta

n Total de poros; parámetro de ajuste

p Presión

Q Gasto total

q Flujo volumétrico

r Radio

s Saturación

Bibliografía

- [1] E. Aker, K. Maloy, A. Hansen, and G. Batrouni. **A two-dimensional network simulator for two-phase flow in porous media.** Transport in Porous Media, 32(2):163–186, 1998. doi: 10.1023/A:1006510106194.
- [2] J. Arns, V. Robins, A. Sheppard, R. Sok, W. Pinczewski, and M. Knackstedt. Effect of network topology on relative permeability. *Transport in Porous Media*, 55(21):21–46, 2004. doi: 10.1023/B:TIPM.0000007252.68488. 43.
- [3] B. Berkowitz and R. Ewing. **Percolation theory and network modeling aplications in soil physics**. Surveys in Geophysics, (19):23–72, 1998.
- [4] M. Blunt, M. Jackson, M. Piri, and P. Valvatne. **Detailed physics, predictive capabilities and macroscopic consequences for pore-network models of multiphase flow**. *Advances in Water Resources*, 25(8-12):1069–1089, 2002. doi: 10.1016/S0309-1708(02)00049-0.
- [5] M. Blunt, B. Bijeljic, H. Dong, O. Gharbi, S. Iglauer, and P. Mostaghami. **Pore-scale imaging and modeling**. *Advances in Water Resources*, 51(1): 197–216, 2013. ISSN 03091708. doi: 10.1016/j.advwatres.2012.03.003.
- [6] S. Broadbent and J. Hammersley. Percolation processes I. Crystals and mazes. Proc. Camb. Philos. Soc., 629(53), 1957.
- [7] R. Brooks and A. Corey. **Hydraulic properties of porous media**. *Hydrology Paper No. 3, Colorado State University*, pages 1–37, 1964.
- [8] M. Celia and P. Reeves. Recent advances in pore scale models for multiphase flow in porous media. Reviews of geophysics, 32(S2):1049– 1057, 1995. doi: 10.1029/95RG00248.
- [9] R. Chandler, J. Koplik, K. Lerman, and J. Willemsen. Capillary displacement and percolation in porous media. J. Fluid Mech., 119:248–267, 1982. doi: 10.1017/S0022112082001335.
- [10] M. Dias and D. Wilkinson. **Percolation with trapping**. *J. Phys A: Math. Gen.*, (19):3131–3146, 1986.

26 BIBLIOGRAFÍA

[11] H. Dong. Micro-CT imaging and pore network extraction. *Imperial College London*, (Doctor of Philosophy):1–213, 2007.

- [12] F. Dullien. Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure. Academic Press, first edition, 1979.
- [13] I. Fatt. The network model of porous media 1: Capillary pressure characteristics. Society of Petroleum Engineers SPE, (574):1–38, 1956.
- [14] M. Fazeli, J. Hinebaugh, and A. Bazylak. Incorporating Embedded Microporous Layers into Topologically Equivalent Pore Network Models for Oxygen Diffusivity Calculations in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Gas Diffusion Layers. *Electrochimica Acta*, 216 (1):364–375, 2016. doi: 10.1016/j.electacta.2016.08.126.
- [15] P. Flory. Molecular size distribution in three dimensional polymers.
 I. Gelation. J. Am. Chem. Soc., 63(3083), 1941.
- [16] J. Gostick, M. Ioannidis, M. Fowler, and M. Pritzker. Pore network modeling of fibrous gas diffusion layers for polymer electrolyte membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 1(177):277–290, 2007. doi: 10.1016/j.jpowsour.2007.04.059.
- [17] J. Gostick, M. Aghighi, J. Hinebaugh, T. Tranter, M. A. Hoeh, H. Day, B. Spellacy, M. H. Sharqawy, A. Bazylak, A. Burns, W. Lehnert, and A. Putz. OpenPNM: A Pore Network Modeling Package. Computing in Science and Engineering, 18(4):60-74, July 2016. ISSN 15219615. doi: 10.1109/MCSE.2016.49.
- [18] A. Heiba, M. Sahimi, L. Scriven, and H. Davis. **Percolation Theory of Two-Phase Relative Permeability**. Society of Petroleum Engineering (SPE), (16):123–132, 1992.
- [19] A. Hunt and R. Ewing. **Percolation Theory for Flow in Porous Media**. *Lecture notes in physics. Springer*, 2009.
- [20] ICL. Imperial College Consortium on Pore-scale Modelling: S1 Sandstone. 10 2014. doi: 10.6084/m9.figshare.1189274.v1.
- [21] M. Ioannidis and I. Chatzis. **Network Modelling of Pore Structure and Transport Properties of Porous Media**. *Chemical Engineering Science*, 48(5):951–972, 1993. doi: 10.1016/0009-2509(93)80333-L.
- [22] R. Larson, L. Scriven, and H. David. **Displacement of residual non-wetting fluid from porous media**. Chemical Engineering Science, 36(1): 75–85, 1981. doi: 10.1016/0009-2509(81)80049-8.
- [23] R. Lenormand and S. Boris. Acad. Sci., (291):279, 1980.

BIBLIOGRAFÍA 27

[24] R. Lenormand, C. Zarcone, and A. Sarr. Mechanisms of the displacement of one fluid by another in a network of capillary ducts. *J. Fluid Mech.*, (135):337–353, 1983. doi: 10.1017/S0022112083003110.

- [25] E. G. Martínez-Mendoza. Modelos de red de poros para la obtención de propiedades efectivas de flujo y transporte en yacimientos petroleros. *Universidad Nacional Autónoma de México*, Facultad de Ingeniería(Licenciatura):103, 2016.
- [26] P. Oren, S. Bakke, and O. Arntzen. **Extending predictive capabilities to network models**. *Society of Petroleum Engineers SPE*, (52052-PA): 324–336, 1998. doi: 10.2118/52052-PA.
- [27] A. Raoof. Reactive/Adsorptive Transport in (Partially-) Saturated Porous Media; from pore scale to core scale. Geologica Ultraiectina. Utrecht University, Geosciences Faculty, Earth sciences department, first edition, 2011. ISBN 978-90-393-56272.
- [28] A. Raoof, H. Nick, S. Hassanizadeh, and C. Spiers. **PoreFlow: A complex pore-network model for simulation of reactive transport in variably saturated porous media**. *Computers & Geosciences*, 61(1):160–174, 2013. doi: 10.1016/j.cageo.2013.08.005.
- [29] M. Sadeghi, M. Aghighi, J. Barralet, and J. Gostick. Pore network modeling of reaction-diffusion in hierarchical porous particles: The effects of microstructure. *Chemical Engineering Journal*, 330(1):1002–1011, 2017. doi: 10.1016/j.cej.2017.07.139.
- [30] M. Sahimi. Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock. Wiley-VCH, second edition, 2011.
- [31] D. Silin and T. Patzek. A pore-scale model of two-phase flow in water-wet rock. Lawrence Berkeley National Laboratory, pages 1–32, 2009. doi: 10.2172/949046.
- [32] S. M. Skjaeveland, L. M. Siqveland, A. Kjosavik, W. L. H. Thomas, and G. A. Virnovsky. Capillary pressure correlation for mixed-wet reservoirs. Society of Petroleum Engineers, 3(1):60–67, 2000. doi: 10.2118/60900-PA.
- [33] K. Sorbie and A. Skauge. Can network modelling predict two-phase flow functions? *International Symposium of the Society of Core Analysts*, (SCA2011-29), 2011.
- [34] W. Stockmayer. Theory of molecular size distribution and gel formation in branched-chain polymers. J. Chem. Phys., 11(45), 1943.
- [35] T. Tranter, J. Gostick, A. Burns, and W. Gale. **Pore Network Modeling of Compressed Fuel Cell Components with OpenPNM**. Fuel Cells, 16(4):504–515, 2016. doi: 10.1002/fuce.201500168.

28 BIBLIOGRAFÍA

[36] P. Valvatne, M. Piri, X. Lopez, and M. Blunt. **Predictive pore-scale modeling of single and multiphase flow**. Transp Porous Med, 58(1-2): 23–41, 2005. doi: 10.1007/s11242-004-5468-2.

- [37] D. Wilkinson and J. Willemsen. **Invasion percolation: a new form of percolation theory**. *Journal Physics*, (16):3365–3376, 1983. doi: 10.1088/0305-4470/16/14/028.
- [38] Q. Xiong, T. G. Baychev, and A. P. Jivkov. Review of pore network modelling of porous media: Experimental characterisations, network constructions and applications to reactive transport. *Journal of Contaminant Hydrology*, 192:101–117, 2016. ISSN 18736009. doi: 10.1016/j.jconhyd.2016.07.002.