

II.- Modelo de estimación de la composición de hidratos de gas

En este capítulo, y en los dos siguientes, describo y utilizo un modelo numérico de simulación de Monte Carlo para estimar la concentración de metano en acumulaciones marinas de hidratos de gas, partiendo de imágenes sísmicas en profundidad como únicas observaciones directas (Lerche y Noeth, 2003). A partir de la concentración de metano, infiero la densidad de energía contenida considerando los resultados de concentración de metano y suponiendo un valor arbitrario de porosidad -de los sedimentos en la zona de acumulación- y saturación de hidratos. En la figura 1 (siguiente página), propongo una secuencia metodológica de exploración, caracterización y cuantificación de hidratos. En esta figura aparecen señalados los objetivos del trabajo presente.

El modelo se aplicó a una imagen sísmica en profundidad (figura 2, página 13), que forma parte de un conjunto de datos sísmicos 3D adquiridos dentro de aguas territoriales mexicanas.

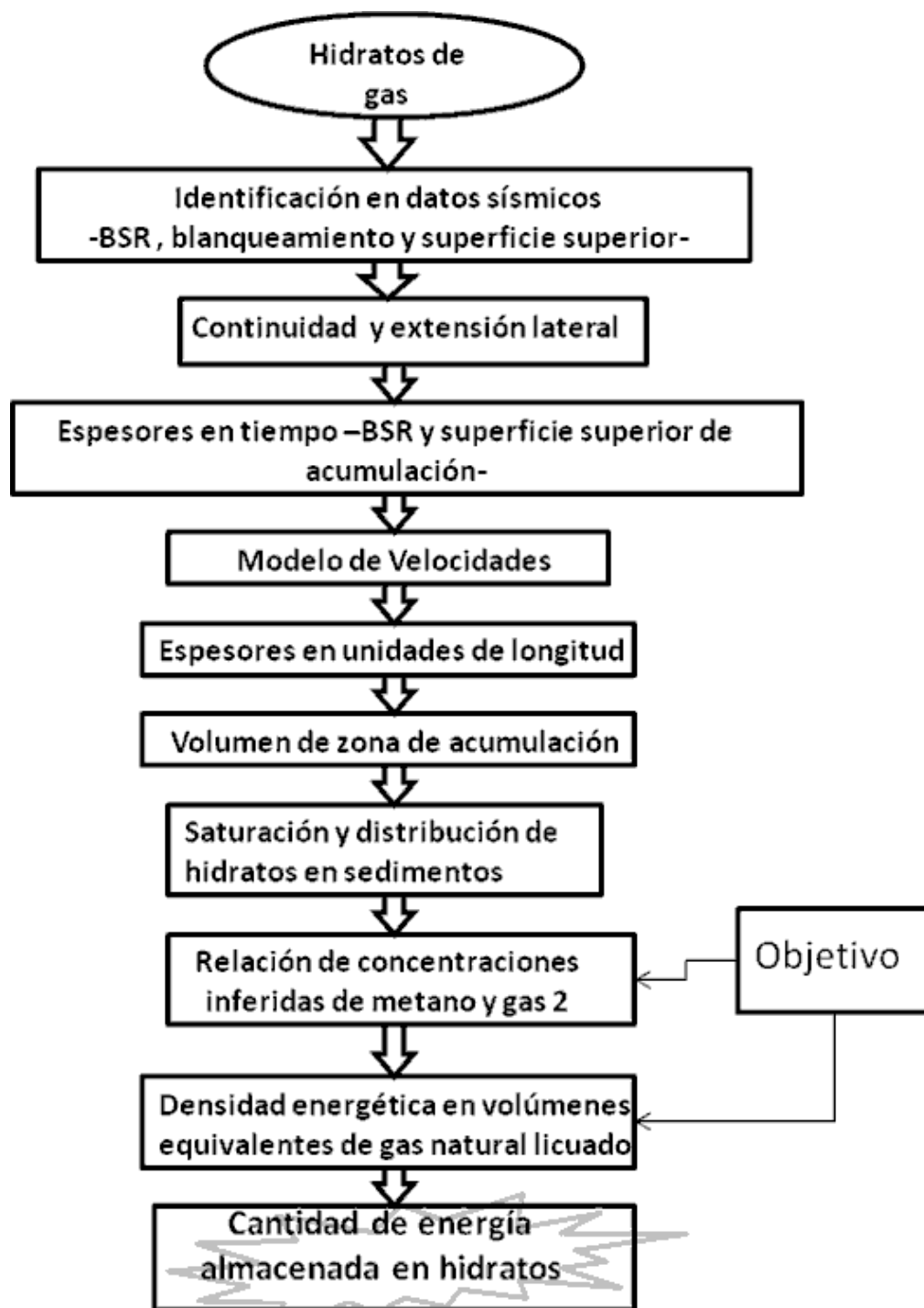


Figura 1. Secuencia metodológica para la exploración, caracterización y cuantificación del potencial energético de acumulaciones de hidratos de gas.

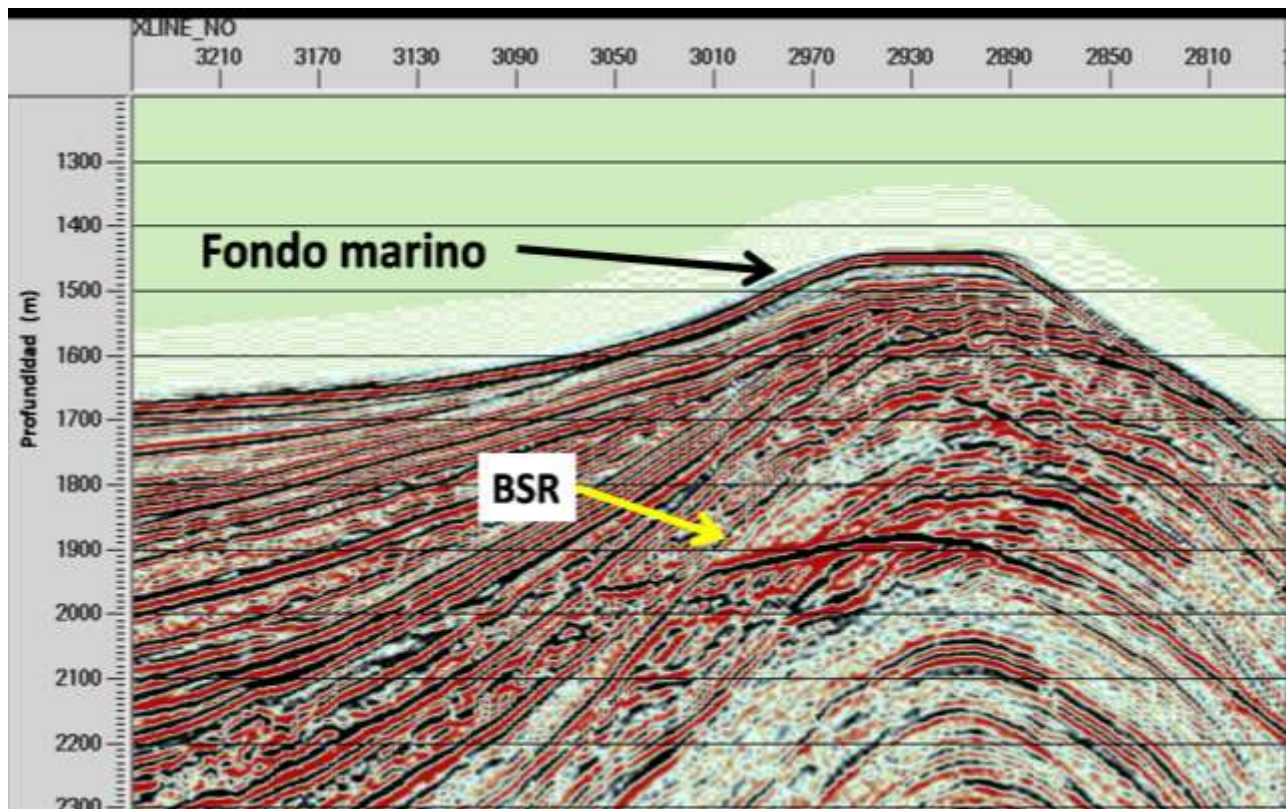


Figura 2. Sección sísmica en profundidad. En esta imagen identifiqué una acumulación de hidratos de gas. El BSR y la superficie superior de la zona de acumulación aparecen señalados. Imagen del Golfo de México. Proporcionada por Petróleos Mexicanos a través del Instituto Mexicano del Petróleo.

Los hidratos de gas existen en la naturaleza en ambientes con condiciones de presión y temperatura específicas. Si la presión disminuye o la temperatura aumenta más allá de ciertos valores límite se disocian y forman una solución acuosa saturada más gas libre o *solución acuosa sobresaturada*. De manera contraria una solución acuosa sobresaturada producirá hidratos si la temperatura disminuye y la presión aumenta lo suficiente. Los rangos de estabilidad de presión y temperatura de los hidratos son reportados con base en observaciones en campo, simulaciones computacionales y experimentos de laboratorio (Maekawa et al., 1995; Collett et al., 2000). La figura 3 muestra un esquema de una curva de equilibrio entre la fase hidratos y una solución acuosa en un ambiente marino. Las curvas definen pares de valores temperatura-presión para los cuales los hidratos se forman o disocian.

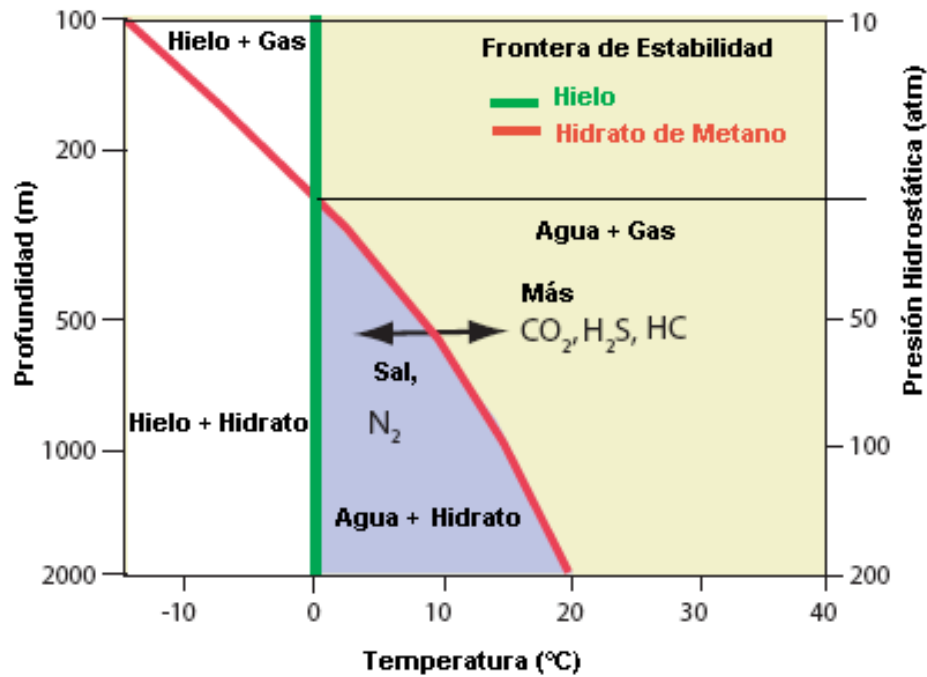


Figura 3. Diagrama de fases de hidratos de gas en un ambiente marino. La línea sólida roja indica la frontera de estabilidad entre la fase de hidratos y la solución acuosa de gas. La línea sólida verde la frontera de estabilidad entre el hielo y el agua líquida. Las flechas indican el efecto de los solutos en la posición de la frontera de estabilidad entre los hidratos y la solución acuosa de gas. Modificada a partir de Tréhu et al. (2002).

Las características del agua formadora (solvente) como la cantidad de solutos disueltos, así como la composición del huésped (solutos formador), influyen drásticamente en las propiedades termodinámicas. Por otro lado, la composición de los hidratos y su abundancia, dependerá de la disponibilidad de los solutos formadores en el sitio de interés (Bhatnagar et al., 2007; Lerche y Noeth, 2003).

La presencia de sales y otros solutos limitan la formación de hidratos de gas. Estos solutos desplazan la curva de equilibrio entre la solución acuosa y el hidrato, hacia regiones de menor temperatura y mayor presión. De manera inversa, si la cantidad de solutos disminuye, la curva se desplaza a regiones de menor presión y mayor temperatura (Maekawa et al., 1995). Dentro del presente trabajo consideré que el agua formadora tiene una salinidad fija de 30 ppm, que es el valor promedio del agua de mar.

La composición química de los huéspedes también influye de manera drástica en el rango de presiones y temperaturas dentro de los cuales los hidratos son estables. Por ejemplo, la adición de etano a una acumulación de hidrato de metano provoca una caída drástica de la presión mínima de estabilidad. En condiciones marinas los hidratos de metano puros, a una temperatura de 0°C, son estables a partir de 26 atmósferas de presión. Sin embargo, al añadir tan solo 10% de etano, la presión mínima de estabilidad a 0°C, cae hasta 10.2

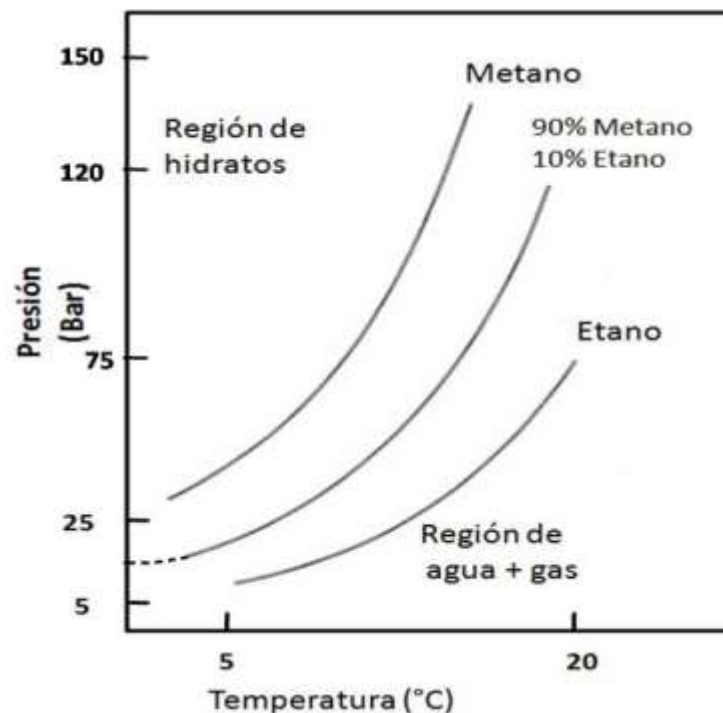


Figura 4. Diagrama de presión y temperatura que muestra la dependencia de la frontera de estabilidad (curva de equilibrio) entre la fase de hidratos de gas y la de agua más gas (o solución acuosa de gas), respecto de la proporción de etano y metano como gases incluidos en los hidratos. Modificada a partir de Lerche y Noeth (2003).

atmósferas (Lerche y Noeth, 2003). En la figura 4 se muestra un esquema con las curvas de equilibrio de fases, para hidratos de metano, etano y la mezcla 90% metano y 10% etano.

Para la caracterización y modelación de la acumulación de hidratos, es importante expresar cuál es el rango de presiones y temperaturas de formación, a través de ecuaciones de estado. Las ecuaciones de estado o más precisamente, de **equilibrio de fases**, describen las curvas de equilibrio entre la fase de hidratos y la de agua más gas. Permiten definir condiciones termodinámicas, específicas y necesarias dentro de un cuerpo de agua, si se han de encontrar hidratos.

Existen valores de temperatura máximas y presión mínimas que limitan la existencia de hidratos. En ambientes acuáticos (lacustres o marinos) los valores posibles de presión quedan restringidos por la

carga hidrostática y litostática sobre cierto paquete sedimentario. Por esta razón existen cuerpos de agua cuya profundidad reducida vuelve de antemano imposible encontrar hidratos.

En un cuerpo de agua, la presión hidrostática aumenta alrededor de una atmósfera por cada 10 metros que aumenta la profundidad. Las profundidades adecuadas para la formación de hidratos varían dependiendo de la temperatura del agua, la salinidad y tipo de sedimento dentro de la zona de acumulación, suponiendo que la composición química de los huéspedes en los hidratos es constante y homogénea. Los valores usuales mínimos rondan los 250 metros para un hidrato de metano puro, en agua de mar con salinidad de 30 ppm (Lerche y Noeth, 2003).

Dentro de los grandes lagos, los mares y océanos, existe un gradiente de temperaturas a lo largo de la columna de agua denominado termoclina y otro dentro del sedimento, que es el gradiente geotérmico. (Dai et al., 2004).

En climas cálidos, en los cuerpos de agua la temperatura disminuye dentro de la columna de agua a medida que aumenta la profundidad, hasta un valor mínimo alrededor del fondo. Con suficiente profundidad, esta temperatura rondará los 4°C alrededor del fondo, puesto que es la temperatura a la cual el agua es más densa.

Al internarse en el sedimento la presión sostiene su tendencia, y aumenta aun más rápido que en la columna de agua dado que los sedimentos tienen mayor densidad. En cambio, la distribución vertical de temperaturas cambia su comportamiento, y comienza a aumentar gradualmente -debido al gradiente geotérmico-, hasta que los valores son tan altos que, si existiesen, los hidratos de gas se disociarían formando gas libre y una solución acuosa. Por esta causa en el fondo de cuerpos de agua, la zona donde se presentan las acumulaciones de hidratos de gas es en los primeros cientos de metros de sedimento bajo el fondo (Tréhu et al, 2002).

Usualmente el gas libre se acumula justo por debajo de la zona saturada de hidratos, que actúa como sello, produciendo una interfaz con un fuerte contraste de propiedades mecánicas. Este rasgo fundamental es frecuentemente detectable en datos sísmicos. Se presenta como un reflector prominente y de polaridad negativa que corre paralelo y por debajo del fondo marino. Este reflector es denominado Reflector Simulador de Fondo o **BSR**-*Bottom Simulating Reflector*- por sus siglas en inglés (Collett et al., 2000; Hardage y Roberts, 2006).

Dado que a la profundidad del **BSR** coexisten el gas libre, el agua y los hidratos, las temperaturas y presiones dentro de esta superficie, representan puntos dentro de la curva de equilibrio entre la solución acuosa de gas y los hidratos. **Por lo tanto, cuando se identifica, el BSR señala el límite inferior de la zona de estabilidad termodinámica de los hidratos y define una superficie de equilibrio entre las fases o interfaz.**

En contraste, las características y formas de las superficies superiores de las acumulaciones de hidratos de gas, suelen estar controladas por otras condiciones más complejas, como la presencia de una zona de actividad bioquímica (conocida como zona sulforreductora), la temperatura del agua en el fondo marino (Reston et al., 2006) y la naturaleza del sedimento (Hardage y Roberts, 2006).

Existen además, otras restricciones para la acumulación de hidratos de gas. Entre las más importantes figura la disponibilidad de una superficie de adherencia para los cristales. Esto se debe a que los hidratos de gas se acumulan, siempre y cuando exista sedimento u otros cristales de hidratos sobre cuya superficie puedan precipitar y adherirse. De no ser así, los cristales de hidratos, sin anclarse, ascienden por la columna de agua debido a su densidad reducida $-850-900 \text{ Kg/m}^3$, y finalmente se disocian (Lerche y Noeth, 2003).

Suponiendo que todas las condiciones anteriores sean satisfechas, los valores específicos de presión y temperatura determinarán -en principio- **la forma de la superficie superior de una acumulación de hidratos.**

Los sedimentos saturados con hidratos a menudo presentan velocidades de onda P y S anormalmente altas -con respecto al sedimento circundante- y, de manera opuesta a todo lo previsible, un coeficiente de atenuación elevado (Chand, 2008; Lee, 2007). La presencia de sedimentos con velocidad de onda P baja sobre la superficie superior de una acumulación de hidratos de gas, (~1350m/s), produce un fuerte contraste de impedancias acústicas en la interfaz con la zona de estabilidad, cuyas velocidades de onda P son altas [≥ 1600 m/s de acuerdo a Hardage et al., (2006)]. Esta característica aparece como un reflector que se ubica justo por debajo o al nivel de fondo marino. Posee polaridad positiva y delimita la superficie superior de una acumulación de hidratos de gas.

Dentro del presente trabajo, la zona delimitada por la superficie superior de acumulación de los hidratos y el BSR, es denominada zona de acumulación de hidratos de gas (**ZAHG**).

La ZAHG coincide u ocurre dentro de un espacio denominado zona de estabilidad de hidratos de gas (**ZEHG**) o GHSZ -*Gas Hydrate Stability Zone*- por sus siglas en inglés. La zona de estabilidad es el espacio físico que posee las condiciones termodinámicas adecuadas para la formación de hidratos aunque no necesariamente existan en toda su extensión (Hardage y Roberts, 2006). El concepto se ilustra en la figura 5.

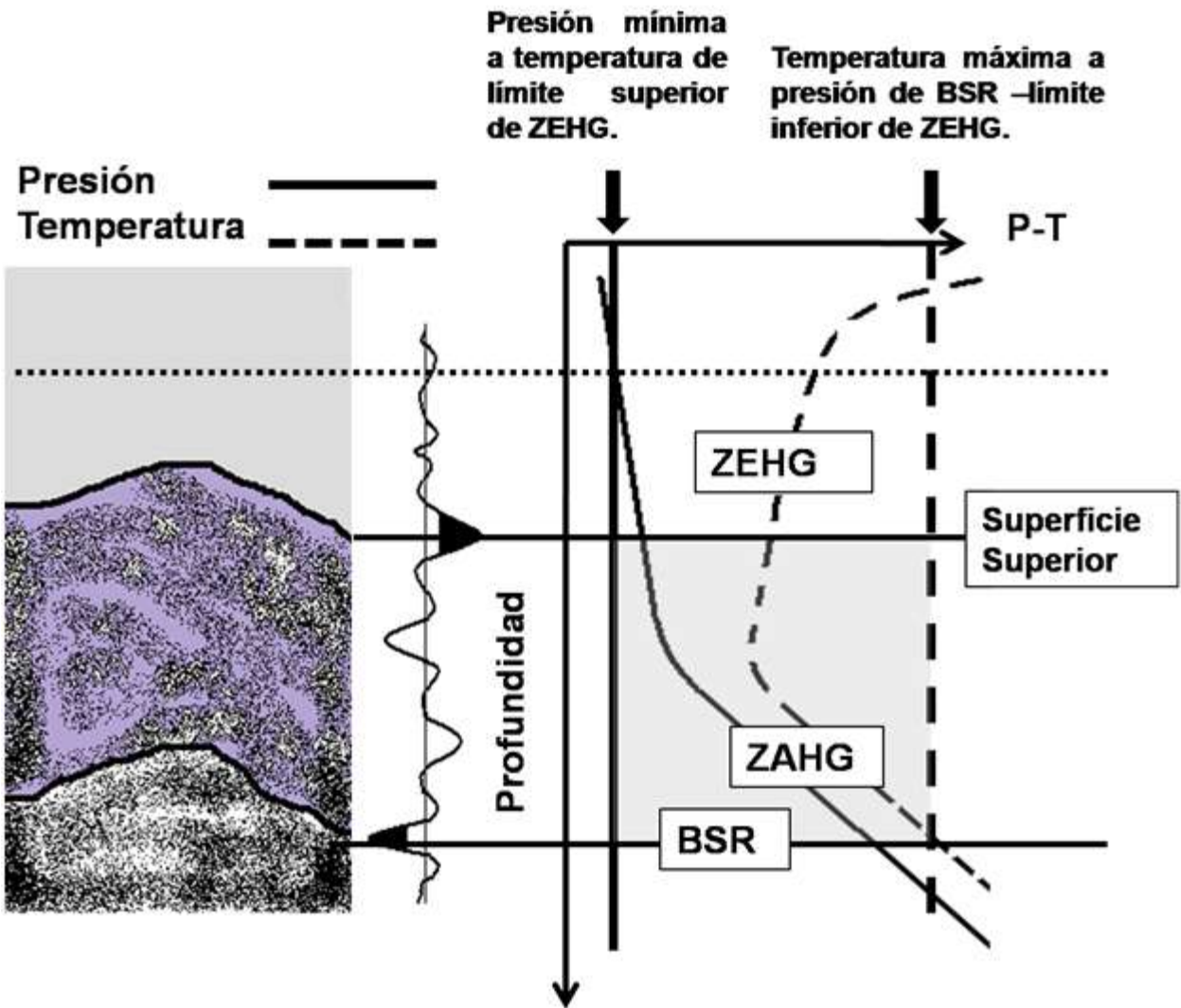


Figura 5. La zona de estabilidad de hidratos de gas (ZEHG) posee las condiciones termodinámicas para la formación de hidratos. Dentro de la ZEHG, ocurre la zona de acumulación de los hidratos de gas (ZAHG). La superficie superior de la ZAHG y el reflector simulador de fondo (BSR) a menudo se pueden identificar por la polaridad opuesta de sus reflexiones (traza sísmica) y la forma análoga del BSR y el fondo marino.

Dentro de la ZAHG, la presencia de los hidratos de gas provoca un cierto efecto de “homogeneización” de las propiedades elásticas de los distintos paquetes sedimentarios, al actuar como cementante. Dado que los hidratos no presentan rasgos de estratificación, las interfaces entre estratos se vuelven difusas en términos de sus contrastes de impedancias. Esto ocasiona que los reflectores dentro de una acumulación de hidratos se vuelvan débiles y caóticos. Este efecto es denominado “**blanqueamiento**” (Rocha-Legorreta, 2009). En la imagen sísmica que presento en este trabajo (figura 6), el reflector

marcado como la superficie superior de acumulación fue elegido debido a la presencia de zonas de blanqueamiento justo por debajo del mismo. Tanto el BSR como el reflector de la superficie superior de la acumulación de hidratos, aparecen marcados en amarillo. En la porción derecha de la figura, aparece señalada la zona que presenta “blanqueamiento”.

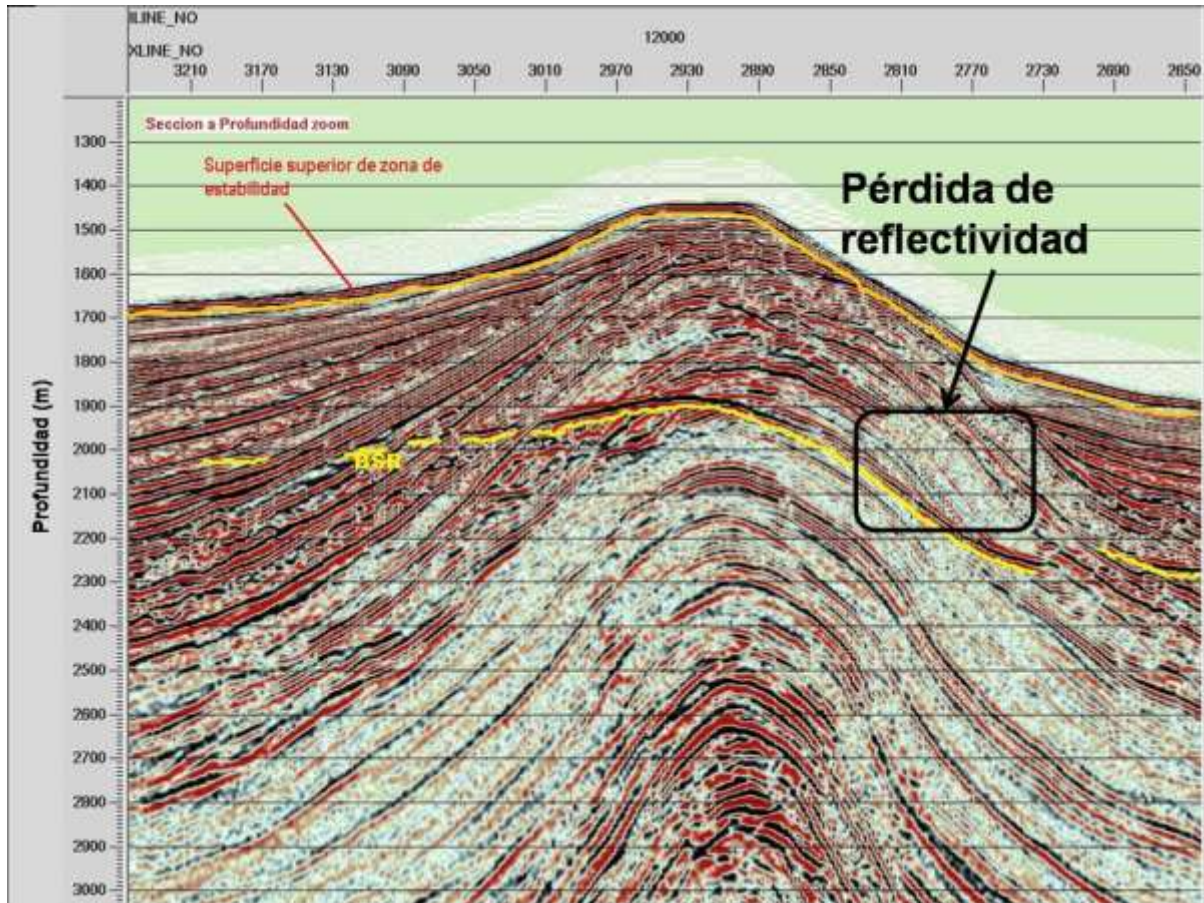


Figura 6. Las superficies superior de la zona de estabilidad y del BSR son resaltadas de manera aproximada en color amarillo. La escala de lado izquierdo permite conocer las profundidades del BSR y la superficie superior de la zona de estabilidad en metros. Imagen del Golfo de México. Proporcionada por Petróleos Mexicanos a través del Instituto Mexicano del Petróleo.

Los espesores de la zona de acumulación se calculan al identificar el tiempo de viaje de las ondas sísmicas a través de la zona de acumulación (Hardage y Roberts., 2006). Posteriormente, al proponer una distribución de velocidades en el medio geológico de interés, los datos en tiempo se convertirán a distancia para obtener los espesores y la profundidad a las superficies en unidades de longitud.

Convertidos los datos sísmicos a profundidad es posible calcular las presiones lito e hidrostáticas en las superficies superior de la acumulación de hidratos y el BSR, de acuerdo a las profundidades en las que se ubica la zona de estabilidad de hidratos (Lerche y Noeth, 2003).

II.1.-Descripción de modelo

II.1.1-Inferencia de la composición de gases contenidos en hidratos de gas a partir de datos sísmicos de reflexión

El modelo que aquí se expone permite inferir la relación de concentración de metano a partir de la estimación de las presiones y temperaturas en las superficies que delimitan la zona de acumulación de hidratos. Requiere solamente un equipo de cómputo de escritorio, paquetería como *Microsoft Excel*® y algún software o rutina propia, para la simulación de Monte Carlo.

Como herramientas, en el presente trabajo recurrí a la utilización del software de simulación de sistemas *Crystal Ball*®, y una rutina que escribí en el ambiente de programación y simulación *MatLab R 2007a*®. Como material de trabajo, se requiere de datos o imágenes sísmicas de reflexión convertidos a profundidad. En las secciones sísmicas, **tanto el BSR como la superficie superior de la zona de acumulación de hidratos deben ser identificables** (Lerche y Noeth, 2003).

Para todos los cálculos supuse que el huésped en la acumulación de hidratos es una mezcla binaria de metano, más otro gas, cuya curva de equilibrio de fases sea conocida. **En este caso, consideré una mezcla de metano y etano como huéspedes únicos en las acumulaciones de hidratos** (Lerche y Noeth, 2003).

A profundidad de las superficies de la zona de acumulación, estimé las presiones mediante la carga litostática e hidrostática producidas por la columna de sedimento y agua respectivamente. Calculé las

temperaturas, a partir de la temperatura en el fondo del cuerpo de agua y un gradiente geotérmico [consultar Lerche y Noeth, (2003)]. Un esquema explicativo del problema, es presentado en la figura 7.

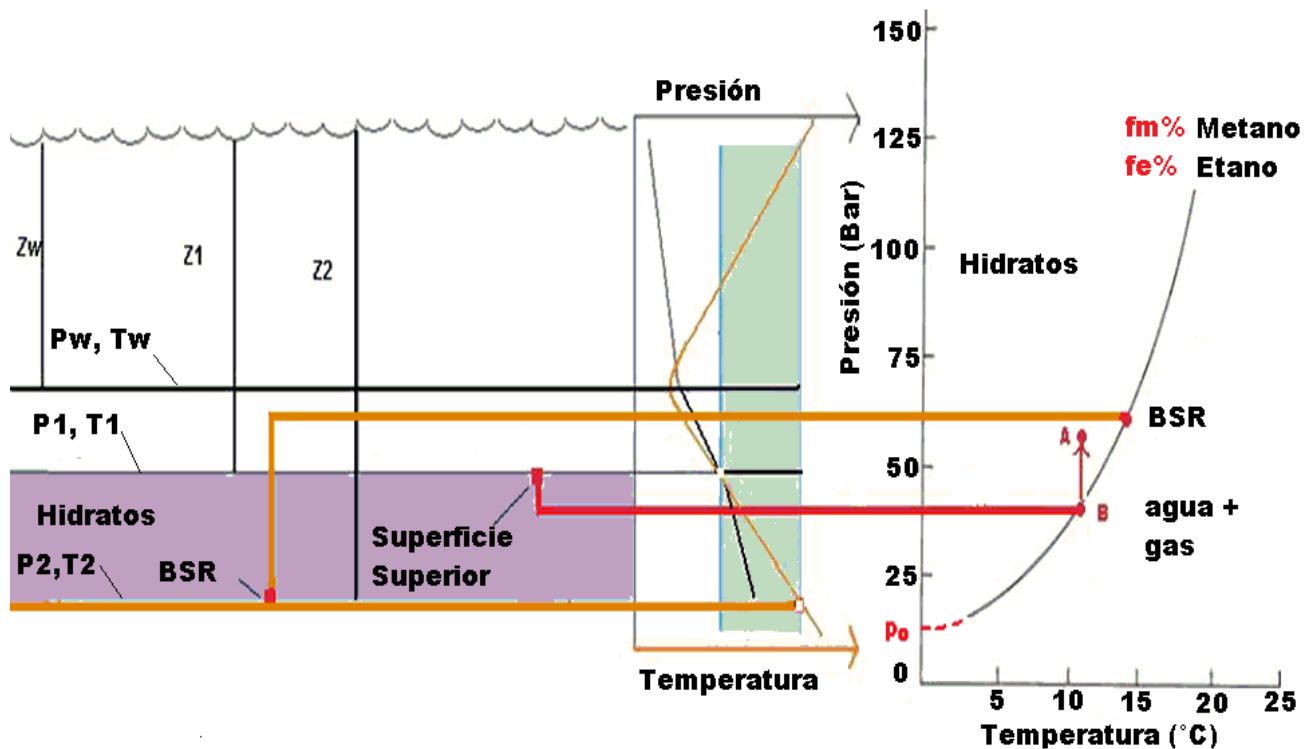


Figura 7. Ilustración de las condiciones de presión y temperatura en el BSR y la superficie superior de la acumulación de hidratos (líneas naranja y roja respectivamente). Cada superficie tiene condiciones particulares de presión (P) y temperatura (T), a cierta profundidad "Z". Para el caso del fondo marino las literales que representan, la temperatura, la presión y la profundidad, tienen el subíndice w. En el caso de la superficie superior de la zona de estabilidad, el subíndice para las tres variables es 1, y para el caso del BSR, 2. La presión crítica P_o , es el valor de presión en la intersección del eje de presión con la curva de equilibrio. En algunos casos la superficie superior de la zona de estabilidad, posee valores de temperatura y presión que caen en la curva de equilibrio -punto B. Cuando la presión hidrostática es muy grande puede representar un punto en la zona de estabilidad de los hidratos -punto A. Figura basada en Lerche y Noeth (2003).

De acuerdo al modelo, es necesario que la curva de equilibrio entre la fase de hidratos y la solución acuosa, corresponda a una sola relación de concentraciones de metano y el segundo gas. Esa curva de equilibrio marcará la frontera de presiones y temperaturas para la formación o disociación de hidratos con esa relación de concentración de gases específica.

En el lado derecho de la figura 7, presento la curva de equilibrio de fases para una mezcla con relación de concentración arbitraria de metano y etano (Lerche y Noeth, 2003). El metano tiene una relación de proporción $F_m\%$ y el etano $F_e\%=100-F_m\%$. Como se indica en la figura el BSR identifica una **superficie de equilibrio. Por lo tanto los valores de presión y temperatura, dentro del BSR deben pertenecer a la curva de equilibrio.**

En cambio, la superficie superior de la zona de acumulación no siempre representa una interfaz o superficie de equilibrio entre fases. Estas condiciones son representadas por los puntos *A* y *B* identificados en la figura 7.

En los ambientes acuáticos, existen acumulaciones de hidratos donde la presión sobre la superficie superior, coincide con la presión crítica de formación, para las condiciones particulares de temperatura y composición de gases que prevalecen en el sitio. La situación se representa con el punto *B* en la figura 7. Estas acumulaciones, las denominaré "**acumulaciones someras**".

En el segundo caso, las "**acumulaciones profundas**" se presentan cuando la presión lito e hidrostática sobre la superficie superior, es mayor a la presión crítica de formación de hidratos con cualquier relación de concentración de ambos gases. En muchas acumulaciones de hidratos -como en el Golfo de México-, los tirantes de agua son tan grandes que la sola presión hidrostática está muy por encima de la presión crítica de formación. En estos casos la presión y temperatura en la superficie superior de acumulación, **no pertenecen a la curva de equilibrio** (Lerche y Noeth, 2003), como ocurre en el punto *A* de la figura 7.

Las presiones deducidas a partir de las profundidades al BSR, y en los casos someros la superficie superior de la zona de acumulación de hidratos, se relacionan con valores de temperatura que satisfacen la ecuación de equilibrio. A partir de esta ecuación es posible establecer una relación

probable entre la presión, la temperatura y la composición de los hidratos. A continuación presento una condición de estabilidad (Lerche y Noeth, 2003) para un hidrato con una mezcla binaria de metano y otro gas como huésped:

$$\ln P \geq \ln P_0 + bT + cT^2 \quad (1)$$

La ecuación (1) describe el rango de presiones mínimas P a partir de las cuales los hidratos son estables, a una temperatura T y dada una presión crítica de formación - o presión de escalamiento- P_0 . La presión de formación corresponde a la presión necesaria para formar hidratos del gas de interés a 0°C de temperatura. La ecuación tiene además dos parámetros, b y c , de ajuste para la temperatura. Tienen unidades de $(1/^\circ\text{C})$ y $(1/^\circ\text{C})^2$, respectivamente.

Expresando (1) en forma exponencial podemos visualizar que la presión de formación es por así llamarle una “presión de escalamiento” pues afecta todos los valores de presión (produciendo un “escalamiento” de la curva de equilibrio):

$$P \geq P_0 e^{bT + cT^2} \quad (2.a)$$

Para el equilibrio entre la fase de hidratos y la solución acuosa sobresaturada de gas, la ecuación (4) se convierte en una igualdad:

$$P = P_0 e^{bT + cT^2} \quad (2.b)$$

Para la superficie superior y el BSR, de acuerdo a la figura 7, y aplicando de nuevo la función logaritmo natural la ecuación (2.b):

$$\ln P_{B,BSR} = \ln P_0 + bT + cT^2 \quad (3)$$

Los subíndices B y BSR , representan las condiciones de presión en los puntos B y BSR de la curva de equilibrio.

De acuerdo a la figura 7 y dada la ecuación (3), existen valores definidos de temperatura que corresponden a las presiones en los puntos B y BSR . La presión de escalamiento es ajustable y representa la ordenada al origen de la curva de equilibrio en un diagrama de fases. Tiene un valor único para cierta proporción de metano y etano.

De acuerdo a Lerche y Noeth, 2003, la presión de escalamiento depende fuertemente de la composición de los gases en los hidratos. Su valor se determina con precisión por métodos experimentales. En contraste, los valores de las constantes b y c son prácticamente independientes de la concentración del segundo gas añadido al metano y, en cierta medida, de su composición.

Los valores de presión en las superficies de la zona de acumulación se definen a partir de los datos sísmicos una vez definidos los valores de los parámetros b , c y la temperatura en esos puntos. Las temperaturas calculadas deben coincidir con las temperaturas posibles en el ambiente de depósito de los hidratos. Dados estos valores, la presión de escalamiento es calculada mediante la relación (3). Los valores posibles de gradiente geotérmico determinan qué valores de temperatura son aceptables y por tanto limitan a su vez, qué valores de b , c y la presión de escalamiento son factibles (Lerche y Noeth, 2003).

La generalización de este modelo para gases distintos del metano y el etano, debe realizarse con cautela, dado que no existe un compendio de valores de los parámetros b y c , para cualquier mezcla de gases y agua (Lerche y Noeth, 2003). Su utilidad dependerá de que todas las observaciones directas y los valores de entrada sean consistentes entre sí.

La relación entre la presión crítica de formación de hidratos y la proporción de cada gas en una mezcla binaria huésped, es la media armónica de las presiones críticas de formación de hidratos de los dos gases por separado:

$$P_0 = [f_m/P_m + (1-f_m)/P_2]^{-1} \quad (4)$$

para una mezcla con fracción de metano f_m , presión de escalamiento P_m para el hidrato de metano al 100 % y presión de escalamiento del segundo gas, como único huésped, P_2 .

La validez de la ecuación (4) es limitada. Diverge de los valores reportados experimentalmente a medida que la temperatura disminuye hasta 0°C. Según Lerche y Noeth (2003), los valores de presión crítica (o de escalamiento) obtenidos por medio de la ecuación (4) para el metano y el etano a 0°C (~18.5 Atm), difieren rotundamente de los valores experimentales (~10.1 Atm). En cambio, a temperaturas de algunos grados por encima de 0°C la ecuación (4) permite aproximar el valor de la presión de formación, con una precisión aceptable. La presión crítica establece por tanto una relación entre las ecuaciones (4) y (3) para fracciones definidas de los gases de interés. De acuerdo a (4), los valores de P_0 quedarán restringidos en el rango que comprende la presión crítica del gas 2 y la del metano.

De manera inversa, partiendo de (4) podemos calcular la fracción de metano (f_m) y del segundo gas ($f_e = 1 - f_m$). La fracción de metano se infiere por medio de la relación aritmética sencilla de presiones críticas de formación de hidratos para cada uno de los dos gases y la presión crítica de la mezcla P_0 :

$$f_m = 1 + \frac{(P_0 - P_m)(1 - f^*)}{(P_m - P^*)} \quad (5a)$$

para casos donde la fracción de metano f_m , sea mayor que la de una mezcla arbitraria -bien caracterizada experimentalmente- con fracción de metano f^* y presión crítica P^* definidas. La mezcla arbitraria que empleé para todos los cálculos que presento fue 90% metano y 10% etano [consultar

Lerche y Noeth, (2003)]. Cuando la fracción de metano esperada f_m , es menor que la de la mezcla arbitraria, la fracción que se desea conocer se obtiene por medio de la expresión:

$$f_m = [(P_0 - P_2) / (P^* - P_2)] f^* \quad (5b)$$

Los valores finales de concentración de metano se calculan a partir de (5a) y (5b), comparando la presión de escalamiento estimada contra la de la mezcla arbitraria P^* con fracción de metano f^* . El resultado es una cantidad decimal adimensional con rango de cero a uno. Cero representa ausencia total de metano en la composición de los hidratos y uno indica que el total del gas huésped es metano. Dado que la presión hidro y litostática en las acumulaciones de hidratos que analicé es mucho mayor a la de la mezcla de comparación, la concentración esperada de metano era elevada y probablemente mayor al 90% (comunicación personal Rocha, 2009). En la rutina que elaboré en MATLAB® los resultados que obtuve al utilizar simultáneamente las ecuaciones (5a) y (5b), mostraron que la fracción de metano sería muy probablemente mayor al 90%. Realicé pruebas con las ecuaciones (5a) y (5b), y dadas las profundidades a la ZAHG, al emplear la ecuación (5b) en todos los ejemplos obtuve saturaciones negativas que implican $P_0 > P_2 > P^*$. Debido a las razones anteriores, elegí la ecuación (5a) para el cálculo de las fracciones de metano en *Crystal Ball*®.

Las ecuaciones (5a) y (5b) establecen que la fracción de metano que deseamos conocer (f_m), corresponde biunívocamente a la presión de escalamiento de la mezcla. Si existen el mismo número de observaciones y valores de entrada que ecuaciones presentadas, el modelo es compatible determinado y los problemas al seleccionar valores de entrada desaparecen.

No obstante, la cantidad de variables termodinámicas y geológicas involucradas supera el número de ecuaciones disponibles. Además, las imágenes sísmicas solo permiten estimar presiones en la zona de estabilidad mas no las temperaturas ni los coeficientes de la ecuación de equilibrio. El modelo es por tanto un sistema de ecuaciones compatible indeterminado. Esto significa que existe una infinidad de

valores de temperatura y curvas de equilibrio –descritas por los coeficientes de la ecuación- que pueden dar origen a una variedad de composiciones de hidratos que satisfagan los valores estimados de presión de escalamiento.

Para la correcta solución del problema de indeterminación de los coeficientes de la ecuación de equilibrio y de las temperaturas, debemos diferenciar entre acumulaciones someras y profundas de hidratos.

En los casos someros, las presiones y las temperaturas estimadas en la superficie superior de la zona de acumulación y el BSR son muy cercanas a las de formación y disociación de hidratos. Por esta razón, es posible asignar valores deterministas de temperatura en ambas superficies y la curva de equilibrio estará “anclada” en dos puntos distintos. El gradiente geotérmico, en consecuencia, queda automáticamente definido y las únicas variables indeterminadas serán los coeficientes b y c de la ecuación de equilibrio (3). Esta condición se ilustra en la figura 8.

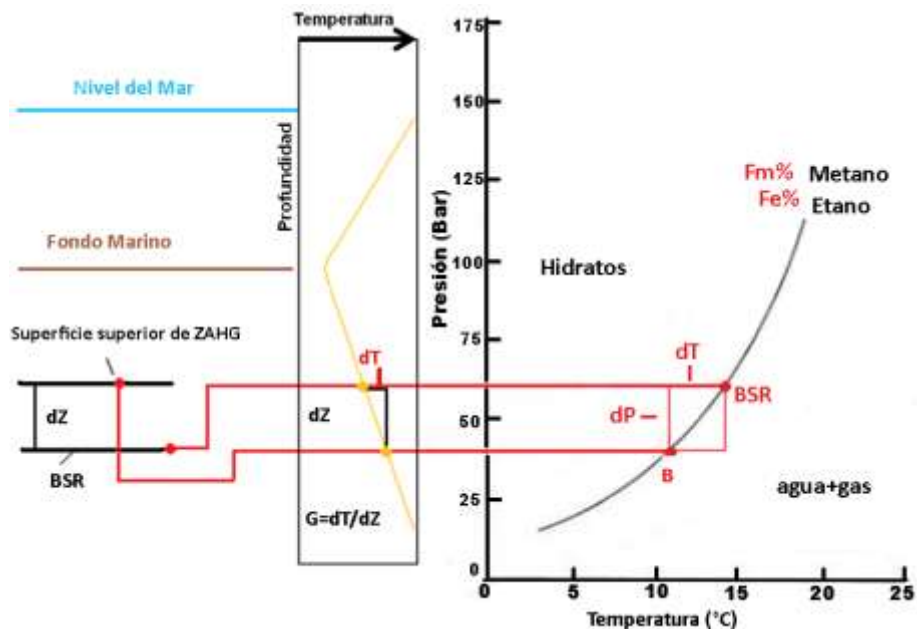


Figura 8. En acumulaciones someras de hidratos las condiciones de presión y temperatura en la superficie superior de los hidratos y el BSR, pertenecen al menos a una curva de equilibrio (puntos “B” y “BSR”). Debido a la condición de equilibrio, en la superficie superior y el BSR, el gradiente geotérmico (G) queda automáticamente definido al elegir una curva de equilibrio de fases en particular. Basada en Lerche y Noeth (2003).

Por otro lado, en los casos profundos, los valores de presión y temperatura en la superficie superior de la zona de acumulación no pertenecen a la curva de equilibrio y como resultado, el gradiente geotérmico no puede ser determinado directamente. Para resolver el problema, la alternativa es generar valores aleatorios gradiente geotérmico además de los de las dos constantes de la curva de equilibrio. Los valores de los tres parámetros deben ser tales que los valores de presión y temperatura a profundidad del BSR, sean consistentes entre sí.

Durante el desarrollo de este trabajo, generé los valores de los dos coeficientes de la ecuación de equilibrio y del gradiente geotérmico por el método de simulación de Monte Carlo. En la figura 9, presento un diagrama de flujo que expresa el funcionamiento básico del modelo.

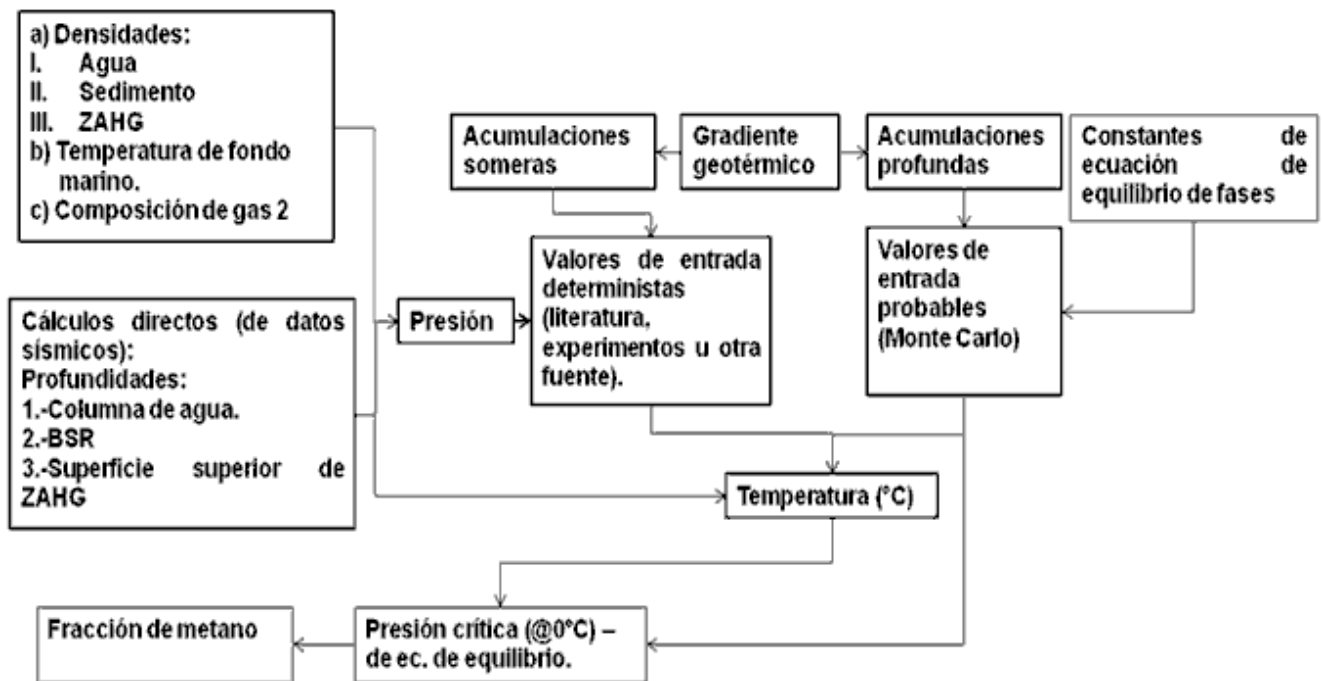


Figura 9. Diagrama de flujo de modelo de inferencia de composición de hidratos a partir de datos sísmicos. El diagrama presenta el caso de una acumulación profunda de hidratos. Tanto el conjunto de los valores de gradiente, como de los coeficientes de la curva de equilibrio deben ser calculados por medio del método de Monte Carlo y ensayados para conocer si cumplen con la condición de equilibrio de fases en el BSR, y valores admisibles de presión crítica para cualquier mezcla binaria metano-gas 2.

El procedimiento fundamental para producir los valores de entrada en un modelo operado por el método de Monte Carlo, consiste en asignar al azar los valores de entrada y sustituirlos en las expresiones y ecuaciones correspondientes. En cada ensayo, se toman valores de entrada de una muestra con una función de densidad de probabilidad específica y un rango que dicta los valores máximos y mínimos que pueden tomar las variables. Las distribuciones de probabilidad son seleccionadas por el usuario.

Durante el ensayo, para cada conjunto de valores de entrada seleccionados se calculará una salida mediante las ecuaciones y reglas de asignación que provee el modelo.

Las salidas generadas a lo largo de todos los ensayos se distribuyen en una forma específica y dentro de un rango que acota los valores de salida del modelo. Como resultado, una función de distribución, y un rango de valores de entrada específicos, producirán una población única de valores de salida, con una función de distribución de probabilidad y rango únicos.

Aunque las constantes de la curva de equilibrio y el gradiente geotérmico son variables aleatorias, solo una porción del total de los valores probados satisfacen el modelo. De esta manera ciertos valores de gradiente geotérmico quedan restringidos por lo que es físicamente posible y por lo tanto, no cualquier par de valores de temperatura y presión son aceptables. Como ejemplo tomemos el esquema de la figura 7. Los valores de temperatura a profundidad del BSR, estarán determinados por el gradiente geotérmico:

$$T_2 = T_w + G(Z_2 - Z_w) \quad (6)$$

Los valores de temperatura a la profundidad del BSR, presentados como T_2 en la ecuación (6), son calculados a partir del gradiente geotérmico G . Dado que es físicamente imposible tener dos valores de temperatura en un mismo punto, los valores de temperatura, deberán coincidir forzosamente con el

valor de temperatura predicho mediante la ecuación de equilibrio (3). La ecuación (3) para el BSR, de acuerdo a la figura 8, es:

$$\ln P_2 - \ln P_0 = bT_2 + cT_2^2 \quad (7)$$

Sustituyendo (6) en (7), la ecuación de equilibrio en la superficie marcada por el BSR, dado el gradiente geotérmico G será finalmente:

$$\ln P_2 - \ln P_0 = b[T_w + G(Z_2 - Z_w)] + c [T_w + G(Z_2 - Z_w)]^2 \quad (8)$$

La ecuación (8) representa el núcleo y la clave del funcionamiento del modelo. Es la pieza fundamental para relacionar una acumulación de hidratos de gas identificada en datos sísmicos con la concentración de metano. Provee una relación directa entre los parámetros geométricos (las profundidades al BSR, la superficie superior de la acumulación y el fondo marino), físicos (la temperatura del fondo marino), geológicos (el gradiente geotérmico y la presión a profundidad de BSR) presentes en la zona de acumulación, y los parámetros que dependen puramente de cantidades teóricas o experimentales, como la presión crítica y los coeficientes b y c .

Las premisas de las que parte la ecuación (8) son resumibles en dos puntos:

- i- Dado que el BSR representa una interfaz de equilibrio termodinámico y químico, cada par de valores de presión y temperatura, a lo largo de toda su superficie, satisfacen una ecuación de equilibrio entre fases.
- ii- Los valores de temperatura calculados mediante la curva de equilibrio, dado un valor de presión a profundidad del BSR, deben ser iguales a los predichos por el gradiente geotérmico para tal punto. Esto implica que para una composición definida de los gases huéspedes en los hidratos, existe uno y sólo un valor de temperatura posible para cada punto en la superficie definida por el BSR, relacionado con un solo valor de gradiente geotérmico, profundidad y presión en ese punto.

A partir de (8), es posible obtener una relación funcional entre el gradiente geotérmico y los parámetros b y c , para una mezcla conocida de gases con presión de escalamiento $P_0=P^*$ y fracción de metano f^* definida. Despejando T_2 de la ecuación (7) quedará:

$$T_2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4(c) \ln\left(\frac{P_0}{P_2}\right)}}{2(c)} \quad (9)$$

Sustituyendo(6) en (9):

$$T_w + G(Z_2 - Z_w) = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4(c) \ln\left(\frac{P_0}{P_2}\right)}}{2(c)} \quad (10)$$

Despejando el gradiente geotérmico G , la ecuación (10) queda como:

$$G = \frac{\left[\frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4(c) \ln\left(\frac{P_0}{P_2}\right)}}{2(c)} - T_w \right]}{(Z_2 - Z_w)} \quad (11)$$

Además de los valores aleatorios de b y c , los valores de gradiente geotérmico obtenidos de (11) dependen de valores deterministas de entrada, como las densidades que se emplean para calcular la presión P_2 a profundidad del BSR. Las fuentes de los valores deterministas pueden ser cálculos, observaciones directas (en campo o laboratorio) o valores reportados en la literatura. La presión crítica se obtiene de datos experimentales. La presión a nivel del BSR se calcula por medio de la suma de las presiones litostáticas parciales del sedimento (sobre y en el cuerpo de hidratos) y la presión hidrostática:

$$P_2 = g(\rho_w Z_w + \rho_1(Z_1 - Z_w) + \rho_2(Z_2 - Z_1)) \quad (12)$$

La presión en la superficie superior de acumulación será:

$$P_1 = g(\rho_w Z_w + \rho_1(Z_1 - Z_w)) \quad (13)$$

Las densidades del agua, el sedimento, sobre la acumulación de hidratos y en la acumulación de hidratos, son ρ_w , ρ_1 y ρ_2 respectivamente. Las diferencias de profundidades entre superficie, están basadas en la nomenclatura de la figura 7. Z_w , Z_1 y Z_2 y representan la profundidad al fondo del cuerpo de agua, la superficie superior de la acumulación de hidratos y al BSR. Consideré la temperatura T_w en el fondo del cuerpo de agua 4°C. Todas las unidades son por definición las del Sistema Internacional de Unidades, excepto en cálculos de presión, donde se utiliza como unidad la atmósfera, para la temperatura cuya unidad serán los grados Celsius y el gradiente geotérmico, con unidades [°C/100m].

Con base en la ecuación (11) y mediante un código elaborado en el ambiente de programación y simulación *MatLab R 2007a*® realicé una gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico en función de los valores de las constantes b y c , que aparece en la figura 10. Los valores de entrada se presentan en la tabla 1 – página 36.

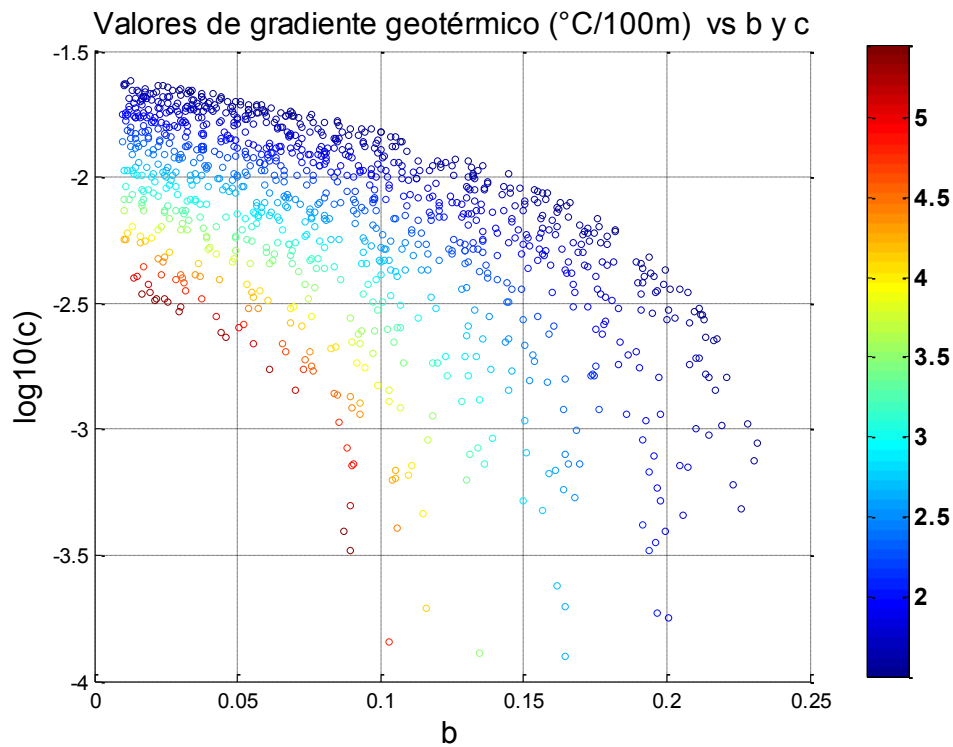


Figura 10. Gráfica de dispersión del gradiente geotérmico en función de los coeficientes de la ecuación de equilibrio b y c .

Esta gráfica expresa la dependencia y sensibilidad de los valores de gradiente geotérmico en función de los valores de b y c , para una mezcla de 90% metano y 10% etano. Tanto el código, como los datos de entrada y parámetros completos, son reportados en el apéndice del presente trabajo.

Los valores aleatorios de b y c fueron generados con distribuciones uniformes cuyos rangos son $b=(0.01,0.25)[1/°C]$ y $c=(0.0001,0.1)[1/°C]^2$ y los valores aceptados de gradiente geotérmico están dentro del rango $G=[1.5,5.5](°C/100m)$.

A continuación presento las variables de entrada fundamentales para una acumulación de hidratos ficticia:

Tabla 1. Valores de entrada empleados para el ejemplo expuesto en las gráficas 14, 17a, 17b y 18.

Datos de entrada	
Profundidad del agua (m)	250.00000
Temperatura de agua en fondo (°C)	4.00000
Profundidad de superficie superior de hidratos desde fondo marino (m)	100.00000
Espesor de hidratos (m)	250.00000
Densidad del agua (Kg/m³)	1030
Densidad promedio de sedimentos sobre hidratos (Kg/m³)	1750
Densidad promedio de sedimentos en hidratos (Kg/m³)	1500

El objetivo de generar gráficas de dispersión de valores de gradiente geotérmico, en función de los coeficientes b y c , es poder determinar qué valores en los coeficientes producen valores de gradiente geotérmico que sean aceptables para el entorno geológico de la acumulación de hidratos a estudiar.

Una vez calculados los valores de gradiente, podemos calcular el conjunto de valores de las temperaturas en BSR, que satisfagan la ecuación de equilibrio (8). En este punto b , c , T_2 y P_2 , tienen valores conocidos por lo cual podemos generar un conjunto de valores de la presión de escalamiento

P_0 , que pertenezcan al espacio de valores aceptables, para cualquier relación de concentración de metano y el gas 2.

Después de ensayar todos los valores posibles de gradiente geotérmico, los valores de presión de escalamiento que no pertenecen al rango de presiones comprendido entre la presión crítica del metano y el gas 2, deben ser descartados pues violan la relación de presiones de escalamiento impuesta por la ecuación (5a). Esta condición se ilustra en el esquema de la figura 11.

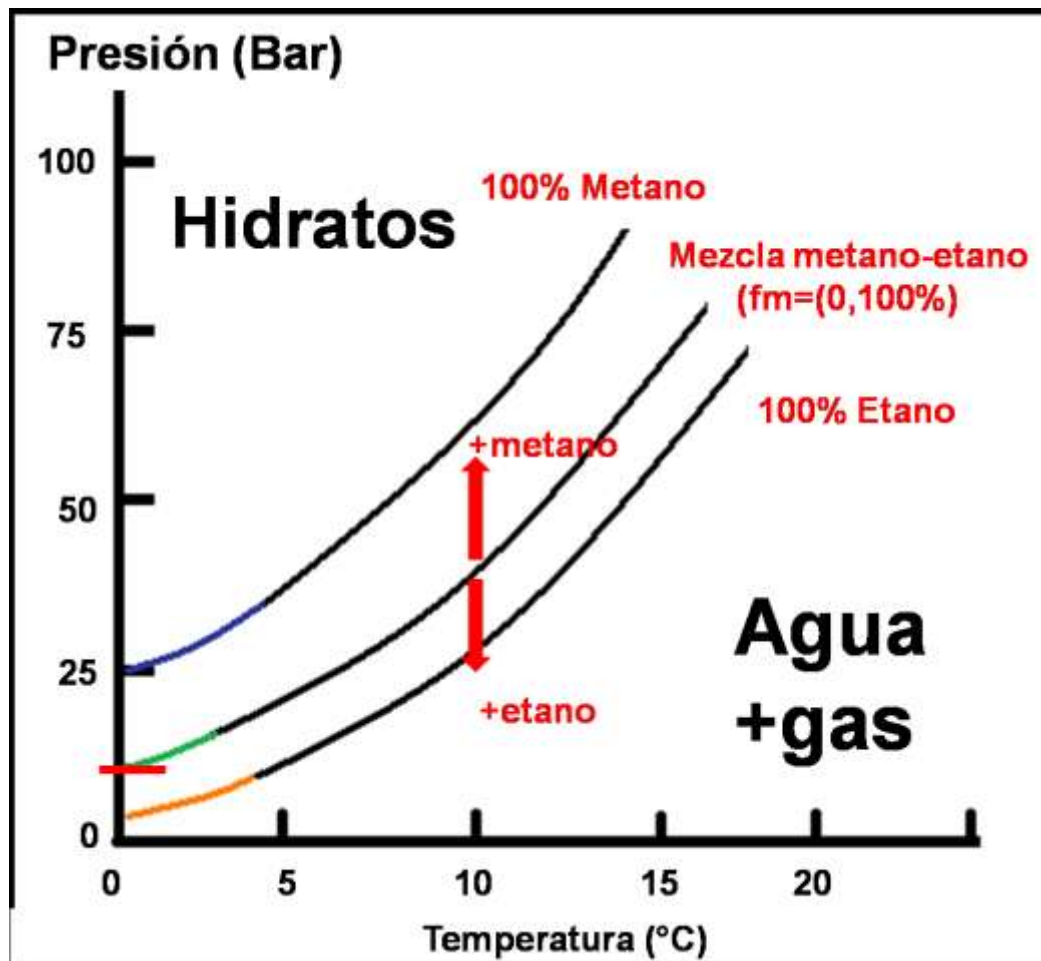


Figura 11. Según el modelo, el rango de presiones críticas que son aceptables para cualquier mezcla de metano más un segundo gas, está restringido por la presión crítica del metano, y el segundo gas (etano). Figura modificada a partir de Lerche y Noeth (2003).

Los valores aceptados de presión de escalamiento se sustituyen en la ecuación (5a) para poder estimar concentraciones de metano y el segundo gas dentro de los hidratos. A partir de estos cálculos produce

histogramas que describen las probabilidades de tener cierta presión de escalamiento y una fracción de metano asociada.

Dado que la relación funcional entre la presión crítica y la fracción de metano es lineal, sus histogramas tienen una distribución semejante. Se sugiere la consulta de algún texto especializado en estadística para la correcta demostración de esta afirmación, como Hogg et al. (1978).

En las figuras 12a y 12b, presento los histogramas generados en *Crystal Ball*[®], de la presión de escalamiento, y la fracción de metano para el ejemplo de la tabla 1.

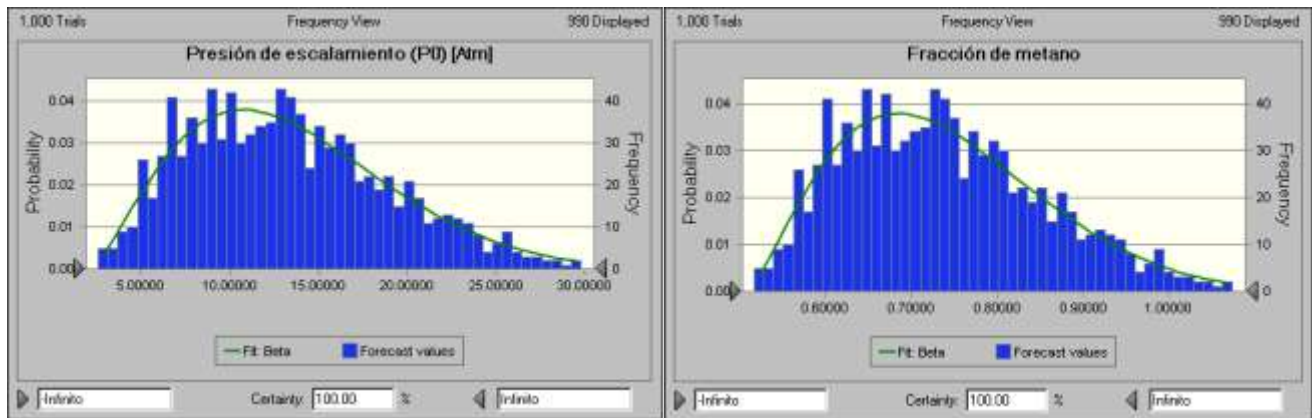


Figura 12a. Histograma de valores de presión crítica generado con 1000 ensayos de Monte Carlo en *Crystal Ball*[®]. La presión es expresada en unidades de *Atmósferas*. **Figura 12b.** Fracción de metano esperada (en decimales de 0 a 1), para la población de presiones críticas aceptadas en 12a. Dado que la relación funcional entre la presión crítica y la fracción de metano es lineal, los histogramas tienen la misma distribución.

II.1.2.-Determinación de la densidad energética de los hidratos de gas en cantidades equivalentes de *Gas Natural Licuado* a partir de la Estimación de la Composición de Hidratos de Gas.

Hasta ahora hemos desarrollado un método de inferencia del contenido de metano y otro gas –en este caso etano-, como constituyentes de una mezcla binaria huésped dentro de hidratos de gas.

Dado su potencial energético, el contenido de metano es una variable de interés fundamental. **No obstante, puesto que el metano no es la única especie química presente en los hidratos (pues**

poseen agua como solvente y otros gases atrapados distintos al metano), no es posible cuantificar directamente el valor energético, en términos de la cantidad de metano, como se podría hacer con el gas natural licuado (GNL), que representa un 100% de combustible.

Para resolver el problema, el siguiente paso consiste en determinar el equivalente energético de un volumen cualquiera de hidratos de metano comparado con un volumen igual de gas natural [consultar Hardage, (2007)]. En la figura 13 presento el diagrama de flujo del modelo y su conexión con el modelo de estimación de composición de hidratos de gas (Lerche y Noeth, 2003).

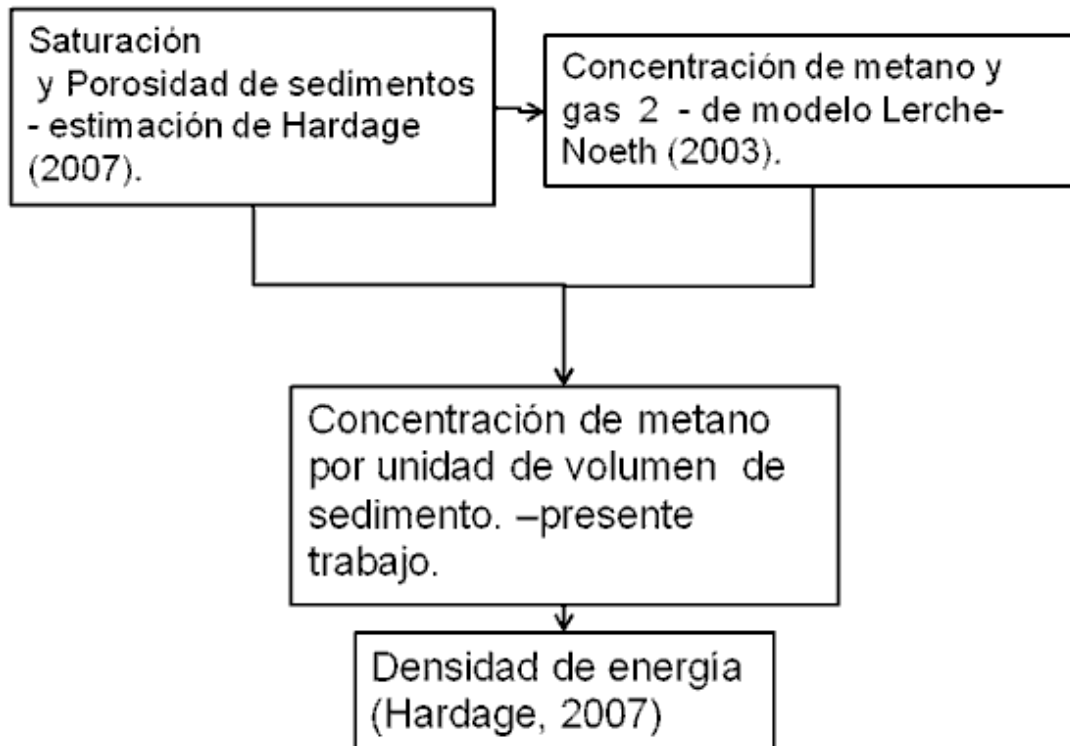


Figura 13. Modelo de estimación de densidad de energía almacenada en una acumulación de hidratos de gas.

A partir de las concentraciones de metano calculadas, desarrollé una relación entre el modelo de estimación de composición de hidratos de gas con sismología de exploración (Lerche y Noeth, 2003) y su equivalente energético en unidades de GNL, propuesto por Hardage (2007). El objetivo fue

establecer un método de inferencia de la concentración de metano y el potencial energético de cierto volumen de hidratos, a partir de datos sísmicos de reflexión como únicas observaciones directas.

Según Hardage (2007), la saturación estimada de hidratos de gas en sedimentos, a través de numerosos sitios identificados en el Golfo de México, oscila entre 50 y 60%. En yacimientos convencionales de gas, como comenta el autor, esta concentración puede resultar poco atractiva desde el punto de vista económico. En contraste, las características de los hidratos de metano como fuente de gases de interés energético son distintas.

Recordemos que, en condiciones de presión y temperatura semejantes a las de los depósitos naturales de hidratos, un 1m^3 de hidratos puede contener hasta 164m^3 de gas. Como consecuencia, modestas concentraciones de hidratos en un volumen considerable de sedimentos pueden producir enormes cantidades de gas.

La relación entre el volumen de hidratos de gas y el volumen potencial de gas contenido no es tan evidente como se puede pensar. Los hidratos de gas se forman por la inclusión de moléculas de los gases de interés dentro de las celdas clatráticas. Las celdas son clasificadas cristalográficamente en función de sus distintas geometrías. Los tipos de celdas que forman los hidratos dependen de las condiciones termodinámicas y los tipos de moléculas huésped. La cantidad y tipo de gases por unidad de volumen que puede contener una acumulación de hidratos, varía sensiblemente en función de la abundancia relativa de cada tipo de celda clatrática. Los hidratos de metano usualmente tienen cristalografías con celdas denominadas tipo I (Uchida et al., 1995). Su estequiometría (Smelik et al., 1997) es:



Las celdas “Y” son dodecaédricas -es decir tienen doce caras pentagonales- conectadas entre sí por sus vértices. Las celdas “X” son tetracaidecaedros –poliedros con doce caras pentagonales y dos hexagonales- que se forman en los espacios libres, al conectarse entre sí las celdas tipo Y. Tanto en las celdas tipo Y como X, se puede alojar una molécula de gas por celda. Si la estructura está totalmente ocupada, por cada ocho moléculas potenciales de gas existen 46 moléculas de agua.

No obstante, aunque la cantidad de celdas de cierto tipo sea constante en una acumulación de hidratos, la estequiometría por sí sola no define la cantidad de gas contenida. En condiciones naturales, la ocupación de las celdas a menudo no es total. Por esta causa la cantidad de gas almacenada varía dependiendo del porcentaje de ocupación de las celdas. Hardage (2007) propone una relación de equivalencia energética entre volúmenes iguales de hidrato de metano y gas natural licuado:

$$E_{hg}=(0.42\phi C_{hg}) * E_{GNL} \quad (13)$$

Donde E_{hg} y E_{GNL} , son las cantidades de energía almacenadas en un volumen unitario de hidratos y en un volumen equivalente de gas natural licuado, respectivamente. En las acumulaciones naturales, los hidratos se encuentran embebidos en una matriz sedimentaria con porosidad ϕ con una saturación C_{hg} , que varía de sitio a sitio. Si la porosidad, la saturación y el volumen de hidratos se mantienen constantes, la ecuación (13) se vuelve una función lineal de la abundancia relativa del gas de interés en el volumen de hidratos. Si suponemos que el único gas combustible es metano, y que su abundancia está medida por el parámetro f_m , el potencial energético neto por unidad de volumen de hidratos, E_{hm} está dado por:

$$E_{hm}=f_m * E_{hg} \quad (14)$$

Pero $E_{hg} = (0.42\phi C_{hg}) * E_{GNL}$. Por lo tanto, la cantidad neta de energía por unidad de volumen, contenida en el hidrato de metano con una concentración de metano f_m , será:

$$E_{hg} = f_m * (0.42\phi C_{hg}) * E_{GNL} \quad (15)$$

Cuando se carece de datos directos o deterministas de la composición exacta del cuerpo de hidratos y de ningún tipo de información, adicional a las secciones sísmicas, la alternativa es generar un modelo de probabilidades de concentración de metano. Este modelo permitirá inferir la probabilidad de tener cierta concentración de metano f_m . Al generar una distribución de concentración, podemos producir una distribución de probabilidad discreta para la densidad volumétrica de energía. El modelo que utilicé para estimar la concentración de metano en este trabajo es, por supuesto, el expuesto en la sección II.1.1.

Suponiendo que la concentración de metano en la mezcla es mayor a la esperada, de acuerdo a la ecuación (5a), la fracción de metano inferida está dada por:

$$f_m = 1 + (P_0 - P_m)(1 - f^*) / (P_m - P^*) \quad (16)$$

Sustituyendo (16) en (17), obtenemos la igualdad:

$$E_{hg} = [1 + (P_0 - P_m)(1 - f^*) / (P_m - P^*)] * (0.42\phi C_{hg}) * E_{GNL} \quad (17)$$

Finalmente, los valores de la presión crítica P_0 se obtienen mediante las ecuaciones de gradiente geotérmico (6) y de equilibrio de fases (8), de acuerdo a lo expuesto en el apartado II.1.1.

Los valores de densidad energética y la fracción de metano –al igual que la presión crítica- producidos en *Crystal Ball*[®] tienen una distribución de probabilidades semejante debido a la relación funcional lineal entre ellas (Hogg et al., 1978).

En la figura 14, presento el histograma de valores de densidad energética por volumen unitario de sedimento, correspondiente al ejemplo de la tabla 1.

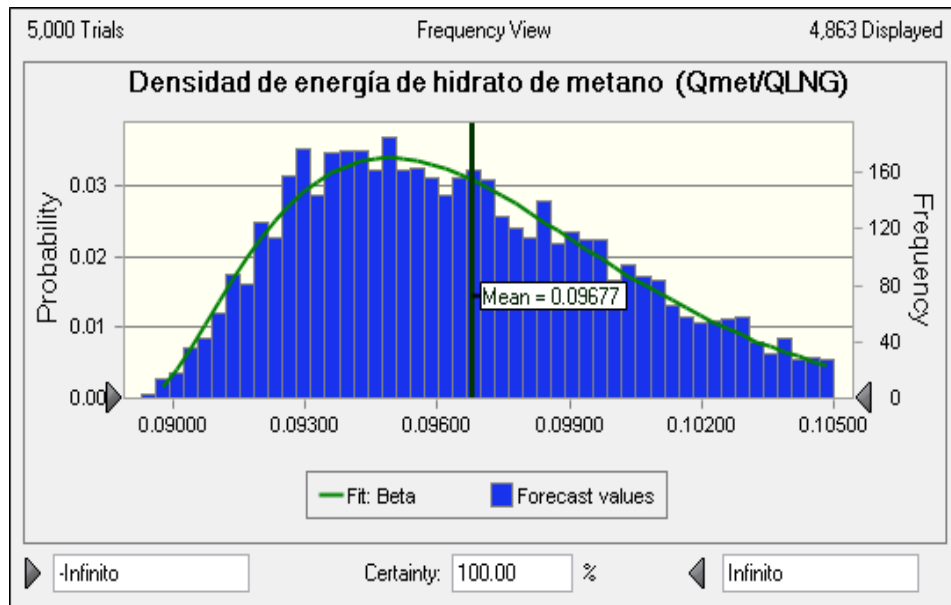


Figura 14. Estimación de la densidad de energía en función de la concentración de metano en un hidrato de gas. Las unidades de energía están normalizadas en función de contenido energético en un volumen equivalente de gas natural licuado.

De esta forma, en un volumen unitario de sedimentos con presencia de hidratos de gas, el total de energía E_{total} acumulada en forma de metano esta dado por la relación:

$$E_{total} = 164 V_{hg} * f_m * (0.42 \phi C_{hg}) * E_{GNL} \quad (18)$$

Tanto E_{hg} como E_{GNL} , deben expresarse como unidades de energía entre volumen de cada sustancia – es decir gas natural licuado o sedimentos con presencia de hidratos. Para expresar el potencial energético de los hidratos en este trabajo, utilicé simplemente el valor normalizado en términos de su equivalente energético en volúmenes de gas natural licuado, como lo presenta en Hardage (2007).

II.2- Análisis del modelo

En todos los ejemplos de acumulaciones de hidratos que presento, el tirante de agua es igual o mayor a 250 metros. Todas por lo tanto, fueron tratadas como acumulaciones “profundas” y el proceso de modelado es como corresponde a lo expuesto para estos casos. Por esta causa, el gradiente geotérmico y los valores de b y c , son muestreados aleatoriamente.

Los valores de salida en su totalidad, son probabilísticos y se distribuyen de manera discreta. Se ajustan a distintas distribuciones de probabilidad que no serán explicadas exhaustivamente en el presente trabajo. Es importante mencionar que las distribuciones de presión de escalamiento calculadas en Crystal Ball® para todos los ejemplos, tendió a una distribución lognormal. Puesto que la fracción de metano y la densidad energética sostienen una relación funcional lineal con la presión de escalamiento, sus distribuciones fueron semejantes.

La media aritmética es un operador lineal. Por lo tanto, la media de la densidad energética se puede obtener, sustituyendo la media de la fracción de metano μ_m en la ecuación de la densidad energética equivalente:

$$E_{hg} = \mu_m * (0.42\phi C_{hg}) * E_{GNL} \quad (19)$$

Dentro del conjunto de valores de entrada deterministas, podemos diferenciar entre observaciones directas y cantidades calculadas. Dado que no existe más material que información sísmica, las profundidades al fondo del cuerpo de agua, a la superficie superior de la zona de acumulación y al BSR, son las únicas observaciones directas.

Existe una cadena de entradas y salidas entre los valores deterministas calculados. Los resultados obtenidos por procedimientos específicos, representan los valores de entrada para los siguientes cálculos. Las primeras entradas son las profundidades, la aceleración gravitacional y las densidades, de las cuales se calculan directamente las presiones en las superficies que acotan la acumulación de hidratos. Para el presente trabajo, la densidad del agua fue $\rho_w=1030$ (Kg/ m³); la del sedimento sobre la ZAHG $\rho_1=1750$ (Kg/ m³) y la densidad dentro

de la acumulación de hidratos $\rho_2=1500(\text{Kg}/\text{m}^3)$. La aceleración de la gravedad que empleé fue el valor convencional de $g=9.81 (\text{m}/\text{s}^2)$ [consultar Lerche y Noeth (2003)].

Obtenidas las presiones en distintos puntos del BSR, se generan valores aleatorios de gradiente geotérmico y de los parámetros de la curva de equilibrio b y c , para obtener los valores de temperatura. Una vez establecidos, la presión a profundidad del BSR, la temperatura y los valores de b y c , podemos obtener la presión de escalamiento de la mezcla mediante la ecuación de equilibrio (8). La presión de escalamiento se utiliza para estimar la fracción de metano por medio de las ecuaciones (5a) y (5b).

Existen modelos cuyos valores de salida son particularmente sensibles respecto de cambios en los rangos o en la función de distribución de los valores de entrada (Lerche y Noeth, 2003).

Lerche y Noeth (2003) presentan los resultados del análisis de sensibilidad para el modelo que aquí se expone. El análisis consistió en comparar las muestras de valores de salida producidas mediante valores de entrada, con distribuciones triangulares y uniformes. Los resultados demuestran que el modelo es esencialmente sensible al rango de los valores de entrada y prácticamente insensible a la función de distribución. Los resultados y conclusiones de este análisis fueron aplicados al desarrollo del presente trabajo.

Para resolver todos los ejemplos, el primer paso fue la aplicación de la rutina elaborada en MATLAB®. Para todos los valores de entrada que solicita, utilicé distribuciones uniformes. En el caso de b y c fueron:

$$b=(0.01,0.25)[1/^\circ\text{C}] \quad (20)$$

$$c=(0.0001,0.1)[1/^\circ\text{C}]^2 \quad (21)$$

Para la estimación del gradiente geotérmico, debemos conocer *a priori* las presiones críticas de formación de hidratos de la mezcla y de los dos gases por separado, junto con la relación de mezcla de los gases. El código de MATLAB® permite modificar tanto las presiones como la relación de mezcla.

La información acerca de la mezcla metano-etano que empleé en este trabajo fue reportada por Lerche y Noeth (2003). Las gráficas de dispersión de valores de gradiente geotérmico fueron generadas con la mezcla de 90%

metano y 10 % etano. Las presiones de escalamiento fueron: i) 2,806, 020 Pascales para el metano, ii) 558,920 Pascales para el etano y iii) 1,020,100 Pascales para la mezcla de los dos gases.

Obtuve además gráficas de dispersión de la ocurrencia de valores de b y c , donde son posibles distintas mezclas de etano y metano. Superpuse estos resultados a la gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico. Los valores de las constantes de la curva de equilibrio, gradiente geotérmico, presión de escalamiento y fracción de metano, que satisfacen las ecuaciones del modelo, aparecen en histogramas de frecuencia. Los histogramas de presión de escalamiento obtenidos en MATLAB, **no** se parecen a los obtenidos en Crystal Ball, aunque las fracciones de metano medias fueron semejantes.

En una segunda etapa de cálculo en MATLAB, tanto la relación metano-etano de la mezcla como el gradiente, se dejaron variar aleatoriamente y obtuve gráficas de dispersión de gradiente para cualquier relación de concentración de metano y etano. Los datos empleados para elaborar estas gráficas pertenecen a los dos primeros objetivos reales.

Para limitar los valores aleatorios de gradiente geotérmico, impuse una condición para aceptar solo los valores de salida en el rango que el usuario desee. En todos los ejemplos el rango aceptado fue $G=(1.5, 5.5)[^{\circ}\text{C}/100\text{m}]$.

El rango de variación de la presión de escalamiento (y en consecuencia de la fracción de metano), tiene límites que quedan restringidos por lo que es posible físicamente y por las premisas de operación del modelo. Dado que la presión de escalamiento es la media armónica de las presiones de escalamiento de cada gas, aunque ciertos valores se predicen como posibles, se descartaron por conducir a conclusiones erróneas sobre la fracción de metano en la acumulación –valores menores que cero o mayores que uno.

El código que desarrollé es de tipo iterativo y permite establecer el número de iteraciones de cálculo deseado. Para los ejemplos que presento utilicé 10 000 iteraciones, aunque realicé pruebas con un máximo de 100 000. Si el número de iteraciones es muy pequeño, se corre el riesgo de que las tendencias de comportamiento de las variables aleatorias no sean identificables en las gráficas. Si el número de iteraciones es muy grande, la mejora

en la calidad de las gráficas será muy pequeña, a cambio de un costo en tiempo de procesamiento que será excesivo.

Durante el desarrollo del presente trabajo encontré que 10 000 iteraciones es un número aceptable para poder apreciar las tendencias de comportamiento del gradiente geotérmico en función de los valores de b y c , a un costo computacional en tiempo aceptable (~5 segundos).

El segundo paso, en todos los ejemplos fue emplear el software de simulación de sistemas *Crystal Ball*. Para el cálculo de las fracciones de metano y densidades de energía, empleé distribuciones estadísticas triangulares para muestrear los valores de gradiente geotérmico y los coeficientes de la ecuación de equilibrio (b y c). Las distribuciones triangulares que empleé en todos los casos fueron distribuciones insesgadas, es decir donde la media, la mediana y la moda tienen el mismo valor.

En las distribuciones triangulares existe un valor modal único. Son adecuadas para casos donde la propiedad muestreada puede tener un solo valor. La moda de la distribución triangular que se escoge representa el valor que creemos debe tener la propiedad de interés o la mediana del rango en el cual puede variar. Por otro lado los valores extremos representarán los valores máximos y mínimos esperados para dicha propiedad.

Para la etapa de cálculo en *Crystal Ball*, el rango de gradiente geotérmico que escogí fue:

$$G=(1.5,5.5; \mu=3)[^{\circ}\text{C}/100\text{m}] \quad (22)$$

Las distribuciones triangulares para los parámetros b y c :

$$b=(0.08,0.17; \mu=0.125)[1/^{\circ}\text{C}] \quad (23)$$

$$c=(0.0001,0.0003; \mu=0.00015)[1/^{\circ}\text{C}]^2 \quad (24)$$

En la figura 15, muestro la gráfica de la distribución triangular para $b=(0.08, 0.17; \mu=0.125)$, como aparece en la interfaz de usuario del programa.

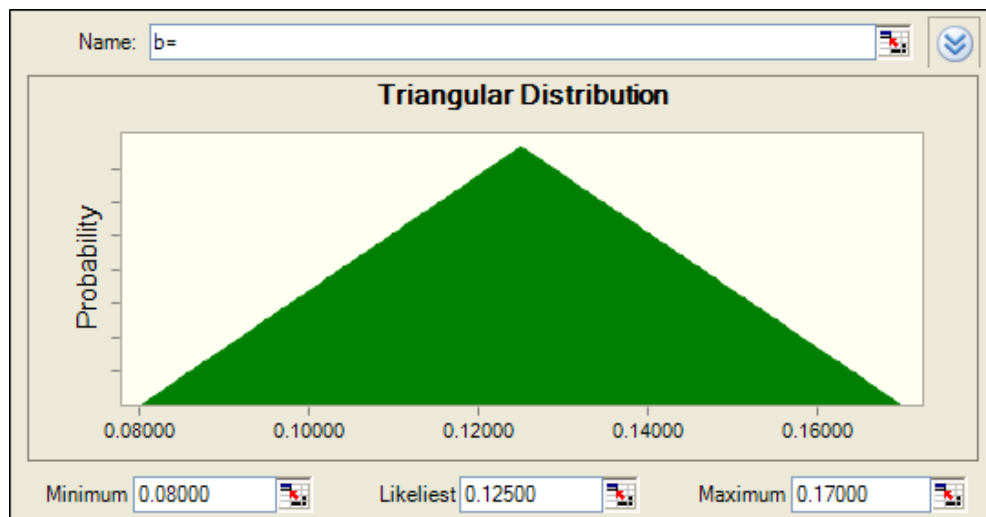


Figura 15. El parámetro b de la ecuación para la curva de equilibrio tiene una distribución triangular insesgada. En la pantalla aparecen el valor mínimo *–minimum–*, 0.08, la moda (*likeliest*), 0.125 y el máximo (*maximum*), 0.17.

En la definición de los rangos que empleo en este trabajo, se presenta la media (μ) aunque en Crystal Ball aparece la moda (el valor más frecuente, que aparece como “*likeliest*” en la interfaz de usuario). Debido a que las distribuciones triangulares que usé son insesgadas, **la definición de rango que uso es válida porque la media, la mediana y la moda tienen valores iguales.**