



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

DIVISIÓN DE INGENIERÍA EN CIENCIAS DE LA  
TIERRA

FACULTAD DE INGENIERÍA

## ***“ Estimación de la Composición de Hidratos de Gas con Sismología de Exploración”***

### **TESIS**

Que para obtener el título de:

**INGENIERO GEOFÍSICO**

P R E S E N T A :

**Bernal Manzanilla Saavedra**

DIRECTOR DE TESIS:  
Dr. Sergio Chávez Pérez

JURADO:  
Dr. Martín Cárdenas Soto  
M. C. David Escobedo Zenil  
Ing. Javier Arellano Gil  
Quím. Guadalupe Contreras Ordaz



Ciudad Universitaria, D. F., a 3 de diciembre de 2009



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## Agradecimientos

Agradezco al Dr. Francisco Rocha Legorreta por su dirección técnica, motivación, orientación y la provisión de medios materiales para realizar esta tesis. El Dr. Rocha fungió como codirector durante todo el desarrollo de este trabajo.

A mi tutor, el Dr. Sergio Chávez Pérez por su motivación, dirección y apoyo metodológico. Su trabajo de edición ha sido acertado, sintético, y formativo para mí. A la M. C. Liliana Vargas Meleza, por su tiempo y orientación en la elaboración de la presentación.

A mis profesores y revisores de tesis, el Dr. Martín Cárdenas Soto, M. C. David Escobedo Zenil, Ing. Javier Arellano Gil y Quím. Guadalupe Contreras Ordaz, por su gran interés y apoyo en la corrección de este texto.

Agradezco a mis amigos y colegas: Francisco Ponce Núñez, Aidé González López, Cecilia Delgado Solórzano e I. Q. Edgar Doroteo Reyes. Su orientación y asesoría técnica en la elaboración la rutina de cómputo, la presentación y el texto fue sumamente útil.

Agradezco a aquellos que fueron una inspiración en las aulas y fuera de ellas. A mi amiga la Dra. Norma Mireles López, Dr. Rafael Sánchez Moreno, Dr. Jorge Aguirre González, Dr. Jesús Leonardo Heiras Aguirre y Dr. Agustín Hayashi Martínez†.

A mis mejores amigos, maestros, tutores y consejeros: mi padre Emilio, mi madre Rita y a mis hermanos Lorena y Rodrigo. Gracias por su apoyo. Margarita, Karolina, toda mi familia y al Dios Vivo. Gracias. Son increíbles.

Agradezco a todos mis amigos. Esta es la cereza del pastel ¡Me alegra que sus nombres no quepan en una sola hoja! Gracias por su apoyo y por permitirme aprender de ustedes.

A todos que fuimos a Saltillo y a sus familias. Les deseo todos sus días llenos.

A todos ustedes les deseo “que tengan todos los días de su vida y toda la vida de sus días.”

***“La imaginación es más importante que el conocimiento.”*** Albert Einstein.  
***“Y si alguno se imagina que sabe algo, aún no sabe nada como debe saberlo.”*** Jesucristo

# Índice

Agradecimientos.....	2
Resumen.....	4
Abstract.....	6
<b>Capítulo I.- Introducción</b>	
<hr/>	
I.-Introducción.....	8
<b>Capítulo II.-Modelo de estimación de la composición de hidratos de gas</b>	
<hr/>	
II.-Modelo de estimación de la composición de hidratos de gas.....	13
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.....	23
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.....	38
II.2.-Análisis del modelo.....	44
<b>Capítulo III.-Aplicación a una sección sísmica en profundidad</b>	
<hr/>	
III.-Aplicación a una sección sísmica en profundidad.....	49
III.1.-Ejemplo 1 (Ejemplo hipotético).....	50
III.2.-Ejemplo 2 (Ejemplo hipotético).....	56
III.3.-Ejemplos reales de estimación de concentraciones de metano y densidades de energía.....	61
III.3.1.-Objetivos A y B.....	63
III.3.2.-Objetivos C al F.....	71
<b>Capítulo IV.- Discusión</b>	
<hr/>	
IV.- Discusión.....	72
IV.1.-Análisis de los valores calculados.....	73
IV.2.-Análisis de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra parámetros de curvas de equilibrio.....	75
IV.3.-Sensibilidad del modelo a la profundidad.....	78
<b>Capítulo V.- Conclusiones</b>	
<hr/>	
V.-Conclusiones.....	84
<hr/>	
Apéndices.....	86
Referencias.....	94

## Resumen

El volumen de metano atrapado en los hidratos de gas representa una posible fuente de recursos energéticos con gran potencial productor. Los datos sísmicos de reflexión son la principal evidencia indirecta de las acumulaciones de hidratos de gas.

En este trabajo presento un modelo -desarrollado por Ian Lerche y Sheila Noeth- para inferir la concentración de metano, dentro de una acumulación de hidratos de gas, a partir de imágenes sísmicas. Para su aplicación se necesita una sección o imágenes sísmicas en profundidad, donde un reflector simulador de fondo y otro, atribuible a una superficie superior de acumulación de hidratos, hayan sido identificados. Como herramientas utilicé una computadora de escritorio, un programa para realizar simulaciones de Monte Carlo y graficar histogramas y una rutina propia elaborada en MATLAB. Tres ecuaciones sencillas constituyen la estructura del modelo. Éstas relacionan la presión litostática e hidrostática y las temperaturas de formación de hidratos a profundidades de los reflectores de interés con las concentraciones de metano y un segundo gas previamente escogido. La primera ecuación permite estimar las temperaturas en función de la profundidad dado un valor de gradiente geotérmico. Definidos los valores de temperatura y la presión *in situ*, una presión crítica de la mezcla para la formación de hidratos a 0° C, se obtiene mediante una ecuación de equilibrio termodinámico. La tercera relación expresa la presión de formación de hidratos de la mezcla como la media armónica de las presiones de formación para ambos gases puros. A partir de ésta, la relación de concentración de ambos gases se obtiene dados los valores de presión crítica. El procedimiento se repite para un número definido de ensayos de Monte Carlo y los resultados se presentan en histogramas de probabilidad de concentración de metano.

A partir de la concentración de metano, generé histogramas de densidad energética en términos del volumen equivalente de gas natural licuado. Finalmente, apliqué el modelo a una imagen sísmica del Golfo de México. Los resultados indican que de existir, los hidratos de gas presentarían concentraciones medias de metano de más del 90%.

## Abstract

The methane volume trapped in gas hydrates represents a possible energy source of great production potential. The reflection seismology data are the main indirect evidence of gas hydrates accumulations.

In this text, I present a model –developed by Ian Lerche and Sheila Noeth- aimed at inferring the methane concentration within a gas hydrate accumulation, from seismic data. The model requires images or a seismic section in depth, where a *bottom-simulating reflector* and a second one, attributable to the upper surface of a hydrate accumulation, may be identifiable. As tools, I only used a desktop computer, software for Monte Carlo simulation and plotting and a self-made routine developed in MATLAB.

Three simple equations feature the framework of the model. They link pressures and temperatures at depths of target reflections with the concentration ratio of methane and a previously chosen second gas. The first equation allows “depth-wise” temperature estimation given a geothermal gradient value. Once pressure and temperature values are defined, I obtained hydrate formation pressure at 0°C via a specific thermodynamic equilibrium equation. Third equation expresses hydrate formation pressure of the gas mix as the harmonic mean of the pure gases formation pressures alone. Provided the formation pressure values, the concentration ratio of the two gases were obtained from this expression. The whole procedure was repeated for a given number of Monte Carlo trials and concentration probability histograms were produced.

Following methane concentration estimations, I produced energy density histograms in terms of the natural liquefied gas equivalent volume. Finally, I applied the model to a seismic image acquired in the

Gulf of Mexico. Results indicated that, if gas hydrates exist, the methane concentration would be up to 90%.



# Introducción

---

Los clatratos, son soluciones sólidas con estabilidad dentro de una región determinada de presión y temperatura. Están constituidos por ensambles cristalinos, donde un conjunto de moléculas encierran a otras especies químicas formando celdas (Englezos, 1993).

Los clatratos, donde las celdas se construyen con moléculas de agua, son llamados “clatratos-hidratos de gas” (Englezos, 1993). Los vértices de las celdas poliédricas son formados por moléculas de agua, interconectadas entre sí por puentes de hidrógeno.

En el ambiente geofísico los clatratos-hidratos de gas usualmente son denominados (de manera imprecisa) como hidratos de metano, hidratos de gas o simplemente hidratos.

A lo largo del presente trabajo, utilizaré el término “*hidratos de gas*” o simplemente “*hidratos*” para referirme a los clatratos-hidratos de cualquier gas. Al referirme a las moléculas huésped alojadas en las celdas, utilizaré indistintamente el término “*huésped*” o “*soluto formador*”. El término “*hidrato de metano*”, se empleará cuando el huésped de interés, o el predominante, sea el metano. Toda otra sustancia que se presente disuelta en el agua pero que no sea de interés para la formación de hidratos de metano será llamada “*soluto*”. El agua, como sujeto en la

formación de hidratos, será denominada “*agua formadora*” o “*solvente*” según se requiera.

Los hidratos de gas son minerales, poco estables termodinámicamente, que ocurren en ambientes terrestres de alta presión y baja temperatura (Makogon et al., 2007). Las especies químicas que contienen como huéspedes dependen fundamentalmente de las dimensiones de la molécula y de la celda que la encierra (Uchida et al., 1995). Entre los huéspedes existen compuestos de interés energético como hidrocarburos ligeros (Englezos, 1993). Los que ocurren típicamente en acumulaciones naturales son el metano, etano, propano e isobutano. De entre todos los huéspedes presentes en los hidratos, el predominante es el metano (Tréhu et al., 2002).

La cantidad de hidrocarburos que contienen los hidratos de gas es extraordinaria (Mahajan et al., 2007; Makogon et al., 2007). Cada volumen de hidratos, contiene aproximadamente 164 volúmenes de gas y 0.8 volúmenes de agua (Makogon et al., 2007).

Los hidratos de gas abundan a lo largo de las regiones polares, lagos, mares y océanos del mundo. Se acumulan en distintas formas desde láminas y capas, betas rellenas de fracturas, o como agregados cristalinos en el espacio poroso entre partículas.

Las cantidades estimadas de metano contenido en los hidratos de gas, a nivel mundial, varían significativamente de autor a autor. Algunos valores propuestos van desde los  $20 \times 10^{15} \text{ m}^3$  hasta  $10^{16} \text{ m}^3$  de metano (Englezos, 1993; Collet et al., 2000).

Actualmente se estima que el contenido de carbono orgánico secuestrado en los hidratos de metano equipara o incluso duplica el total de la cantidad acumulada en las reservas existentes y probables de carbón mineral, petróleo y gas. Según Mahajan et al. (2007), incluso podría equiparar el total compuesto, de todas las acumulaciones naturales de carbono orgánico, sin incluir el kerógeno y los bitúmenes.

Además de su potencial energético, los hidratos de gas representan una fuente de riesgo para el medio ambiente, así como las operaciones de perforación, extracción y manejo de petróleo (Collett et al., 2000). Esto se debe a que son termodinámicamente inestables y se acumulan en ambientes de alta presión y baja temperatura.

Por todas las razones anteriores, los hidratos de gas son recursos naturales de gran interés económico.

La producción de gas a partir de los hidratos es ya, una realidad en algunos de estos sitios. Hacia 1968 un grupo de geólogos rusos descubrió, en regiones transárticas, la presencia de depósitos de hidratos en el campo de gas llamado Messoyakha (Makogon et al., 2007). Se estima que este yacimiento contenía  $79 \times 10^6 \text{ m}^3$  de gas natural antes de empezar la producción. De acuerdo a Collet et al. (2000), un tercio de este volumen provenía probablemente de depósitos de hidratos de gas.

Las herramientas para explorar, caracterizar y cuantificar las acumulaciones naturales de hidratos de gas, son tan diversas como la recuperación de núcleos de pozo, los registros de pozo, métodos electromagnéticos superficiales, acústicos y la exploración

sísmica de reflexión en dos y tres dimensiones, entre otras (Lu y McMechan, 2002; Carcione y Gei, 2004).

Las técnicas de exploración son complementadas por un vasto repertorio de técnicas experimentales y teóricas que permiten estimar o determinar propiedades importantes de los hidratos como la saturación, la distribución y los hábitos de acumulación en distintos sedimentos y medios, así como la concentración y composición de los gases contenidos y por ende, la cantidad de metano presente (Bhatnagar et al., 2007).

Para cuantificar acumulaciones de hidratos de gas existen tres parámetros fundamentales a determinar: la saturación, la continuidad y el espesor de la acumulación (Hardage, 2007).

Sin embargo, las acumulaciones naturales de hidratos de gas a menudo son poco accesibles para su exploración y caracterización extensiva e intensiva. Existe un repertorio de técnicas, cuya aplicación y uso, es limitada por el costo y complicaciones logísticas. Debido a la gran abundancia de acumulaciones de hidratos en el planeta, algunos métodos incluso se vuelven impracticables para campañas de exploración de gran cobertura. Por lo tanto, los métodos que requieran la menor cantidad de herramientas y datos para lograr su cometido serán a menudo los más socorridos.

La exploración sísmica es una herramienta importante y ampliamente difundida en los campos de la exploración, cuantificación y caracterización de los hidratos de gas, por su capacidad para cubrir grandes áreas con una inversión relativamente pequeña – comparada con otros métodos. Permite estimar los espesores de las acumulaciones

cuando existe un contraste de impedancias acústicas apreciable entre la acumulación de hidratos y el sedimento circundante.

Además de ser empleada para delimitar y cuantificar la acumulación de hidratos, la exploración sísmica puede ser empleada con otros propósitos.

El objetivo de esta tesis es presentar y ensayar un modelo numérico que permite estimar la concentración de metano y el potencial energético asociado, en acumulaciones marinas de hidratos de gas. Utiliza exclusivamente imágenes sísmicas como observaciones directas. A partir de éstas se determinan profundidades y las superficies y espesores de la acumulación. De acuerdo a la profundidad, se infieren las condiciones de presión y temperatura. Los valores inferidos de presión y temperatura son utilizados para generar histogramas de frecuencia de la concentración de metano a partir de una ecuación de estado. De manera adicional, calculé la densidad energética (Hardage, 2007) asociada a las concentraciones de metano calculada.

## **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.

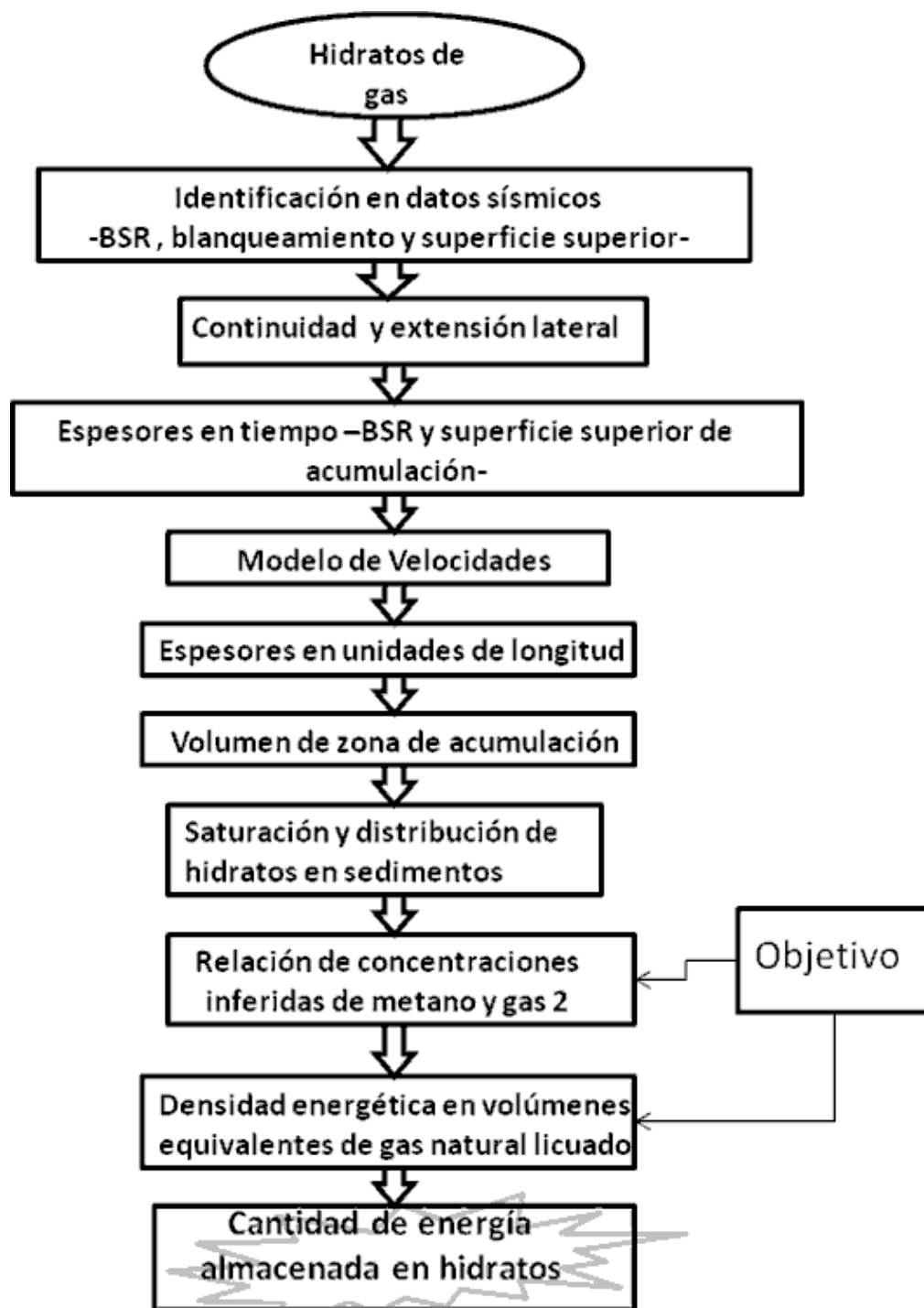
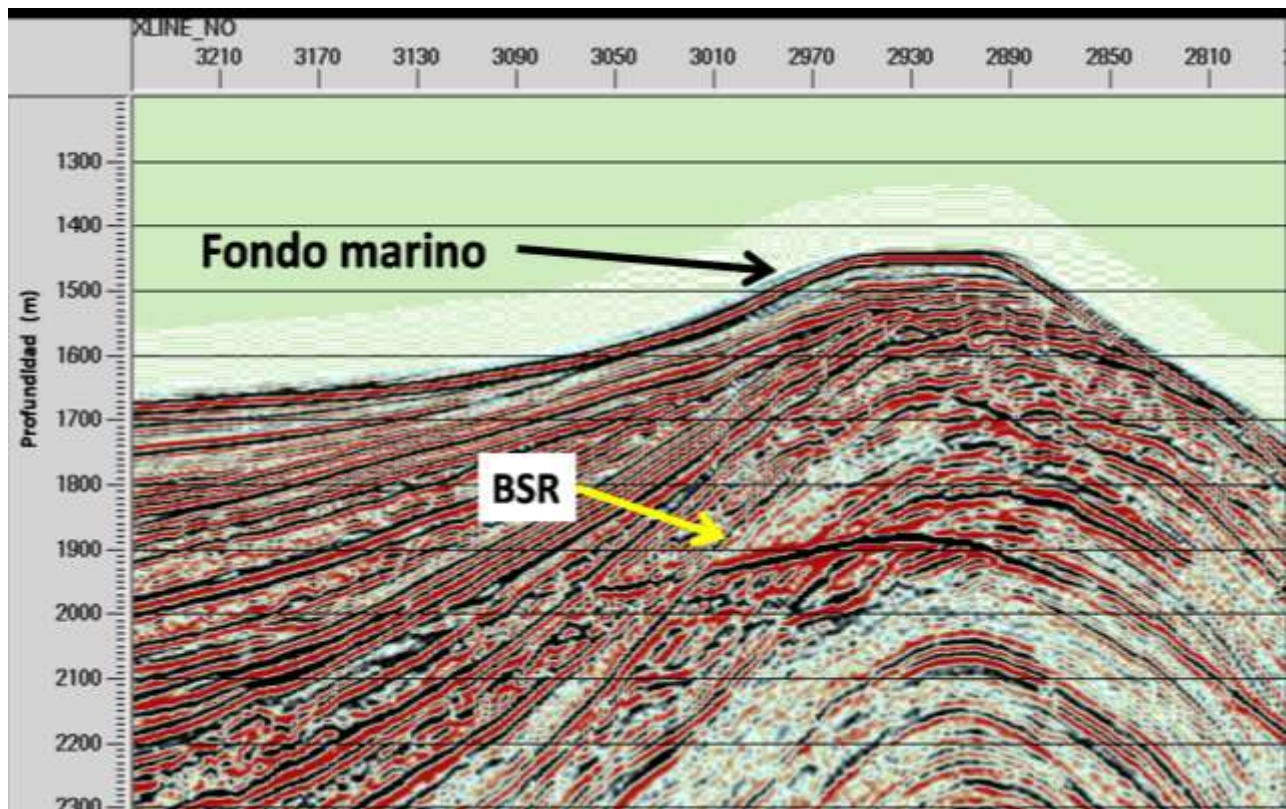


Figura 1. Secuencia metodológica para la exploración, caracterización y cuantificación del potencial energético de acumulaciones de hidratos de gas.



**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.



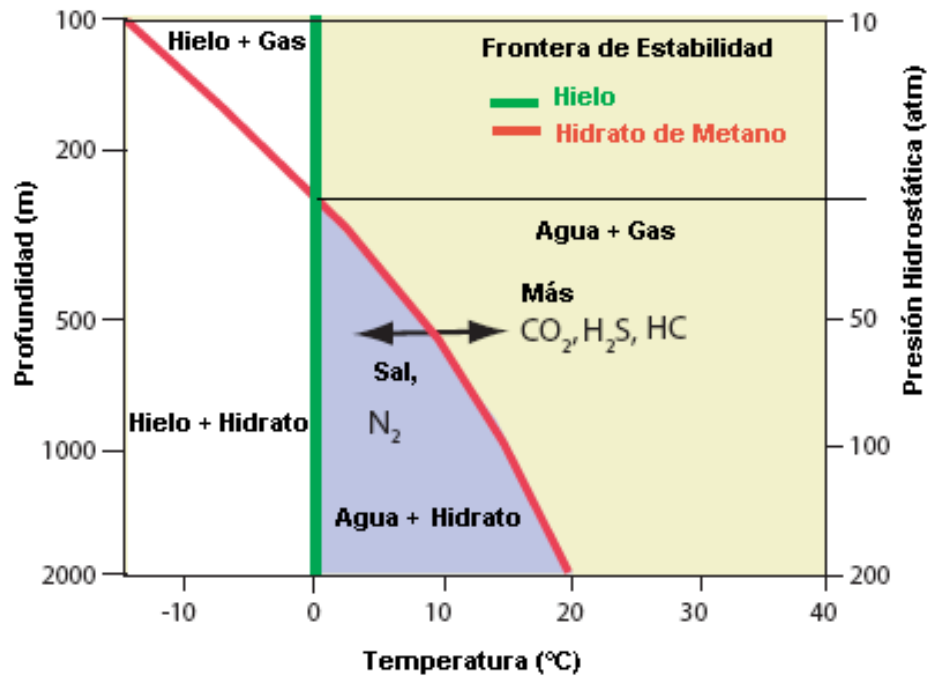


Figura 3. Diagrama de fases de hidratos de gas en un ambiente marino. La línea sólida roja indica la frontera de estabilidad entre la fase de hidratos y la solución acuosa de gas. La línea sólida verde la frontera de estabilidad entre el hielo y el agua líquida. Las flechas indican el efecto de los solutos 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

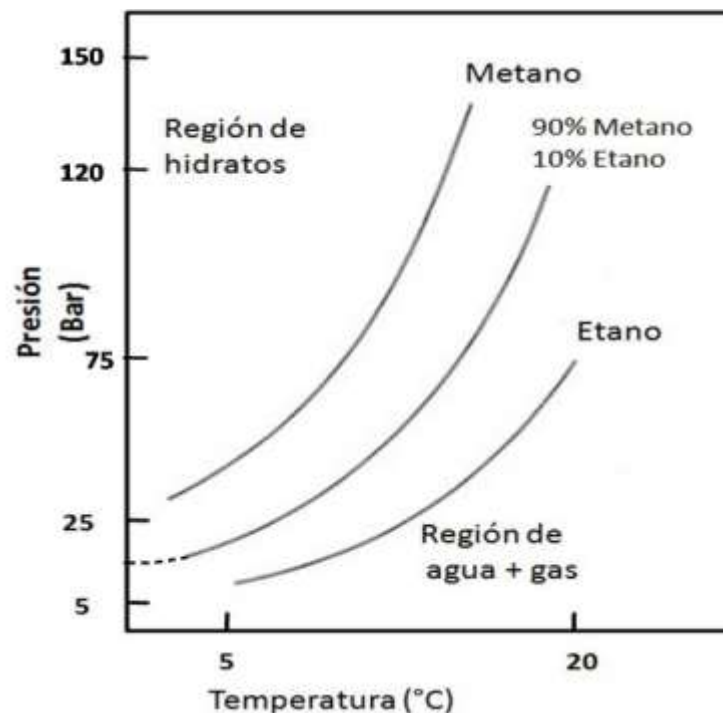


Figura 4. Diagrama de presión y temperatura que muestra la dependencia de la frontera de estabilidad (curva de equilibrio) entre la fase de hidratos de gas y la de agua más gas (o solución acuosa de gas), respecto de la proporción de etano y metano como gases incluidos en los hidratos. Modificada a partir 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 [ $\geq 1600$ 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.

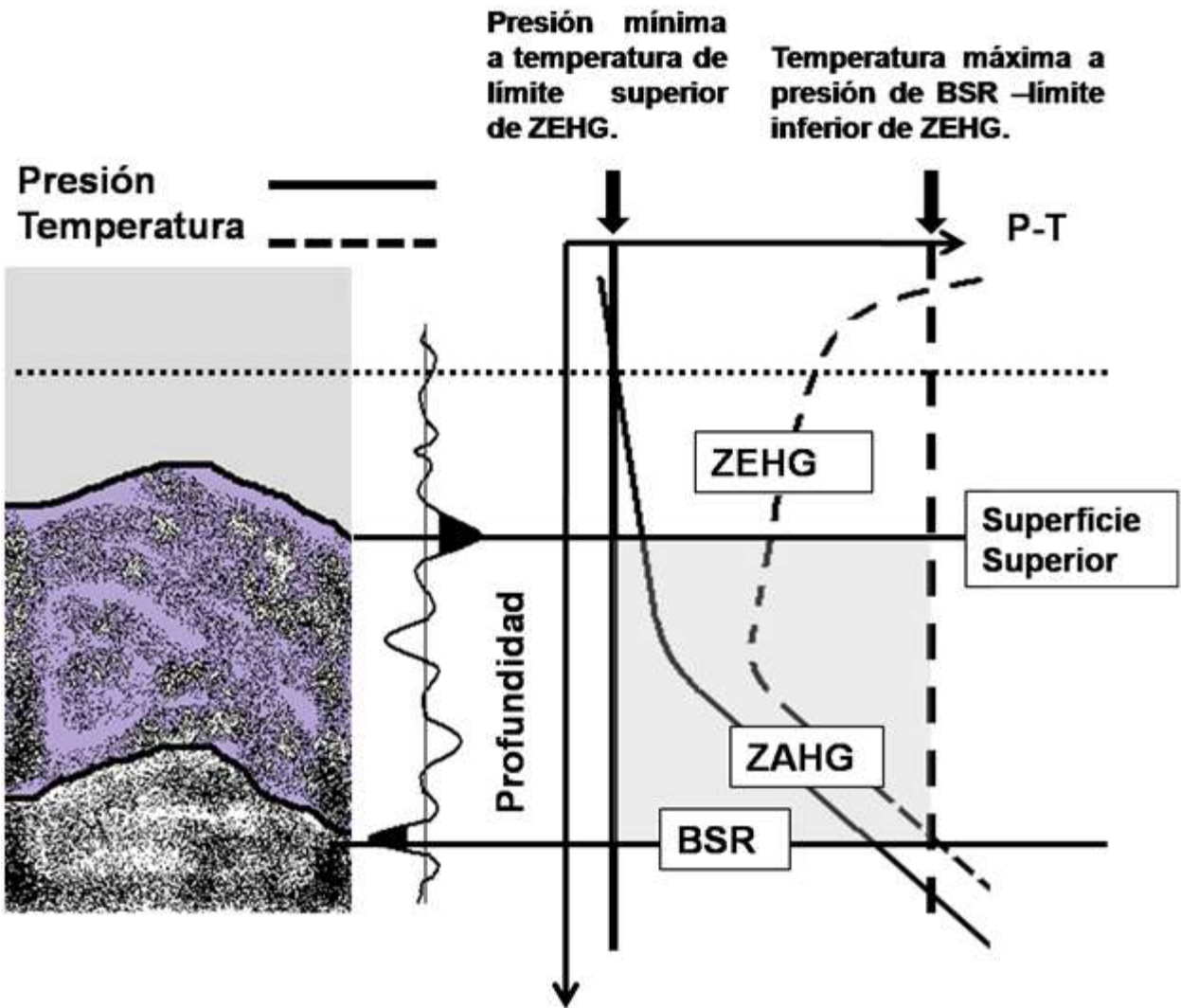
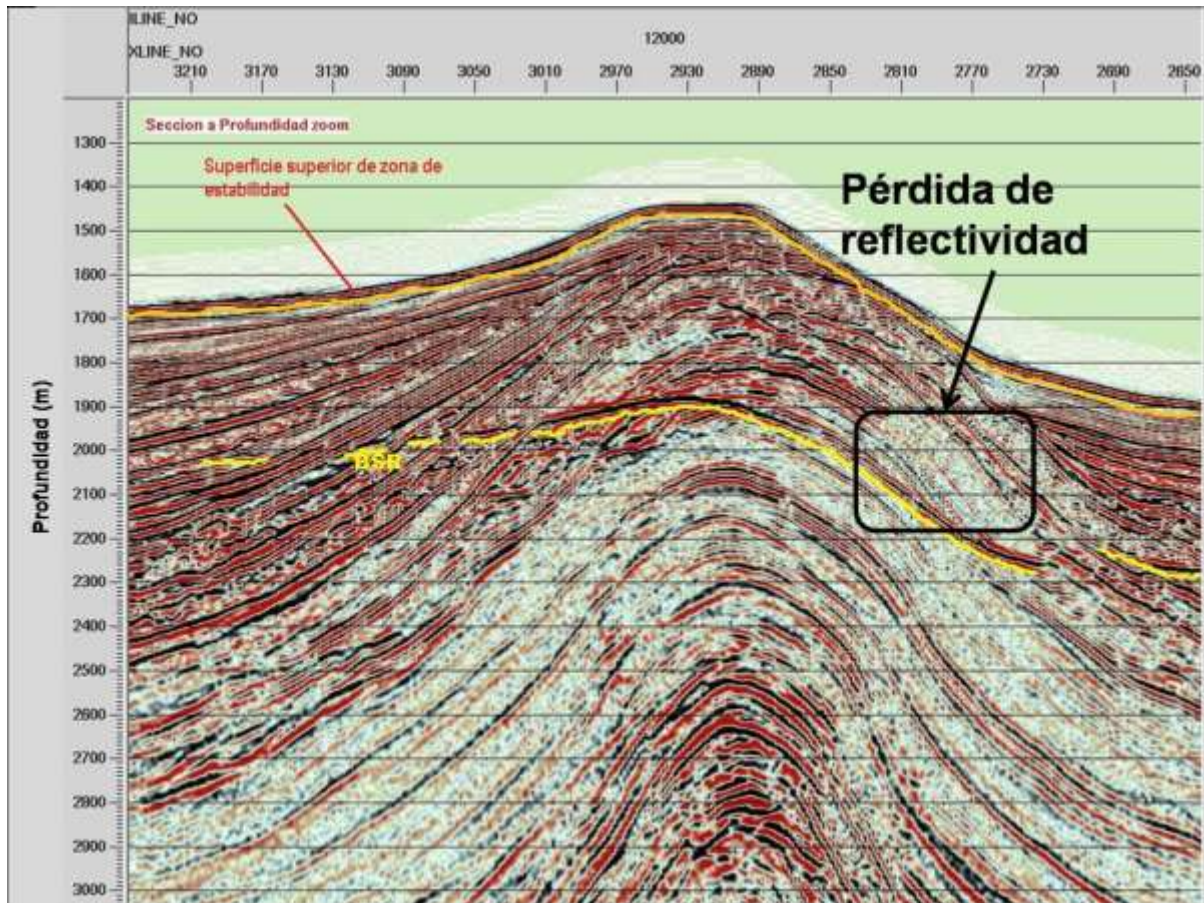


Figura 5. La zona de estabilidad de hidratos de gas (ZEHG) posee las condiciones termodinámicas para la formación de hidratos. Dentro de la ZEHG, ocurre la zona de acumulación de los hidratos de gas (ZAHG). La superficie superior de la ZAHG y el reflector simulador de fondo (BSR) a menudo se pueden identificar 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*<sup>®</sup> 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*<sup>®</sup>, y una rutina que escribí en el ambiente de programación y simulación *MatLab R 2007a*<sup>®</sup>. 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.

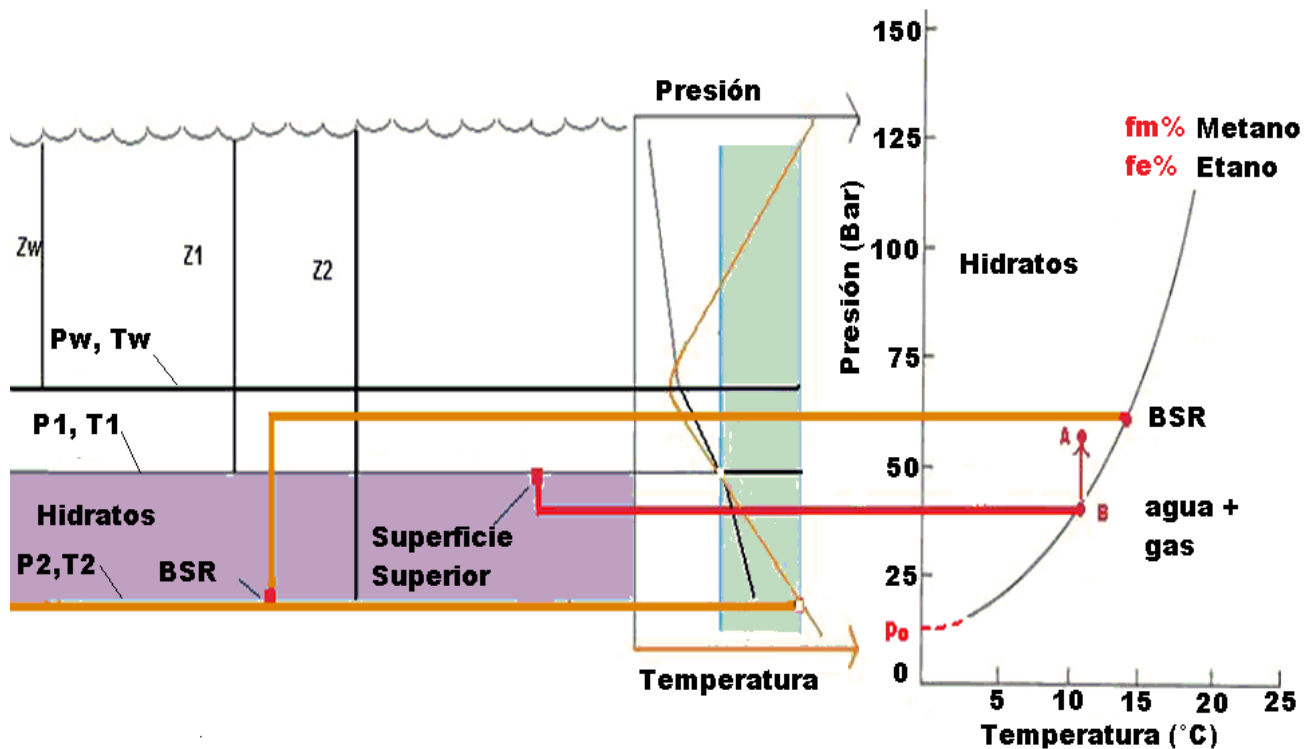


Figura 7. Ilustración de las condiciones de presión y temperatura en el BSR y la superficie superior de la acumulación de hidratos (líneas naranja y roja respectivamente). Cada superficie tiene condiciones particulares de presión (P) y temperatura (T), a cierta profundidad "Z". Para el caso del fondo 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  $0^\circ\text{C}$  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.

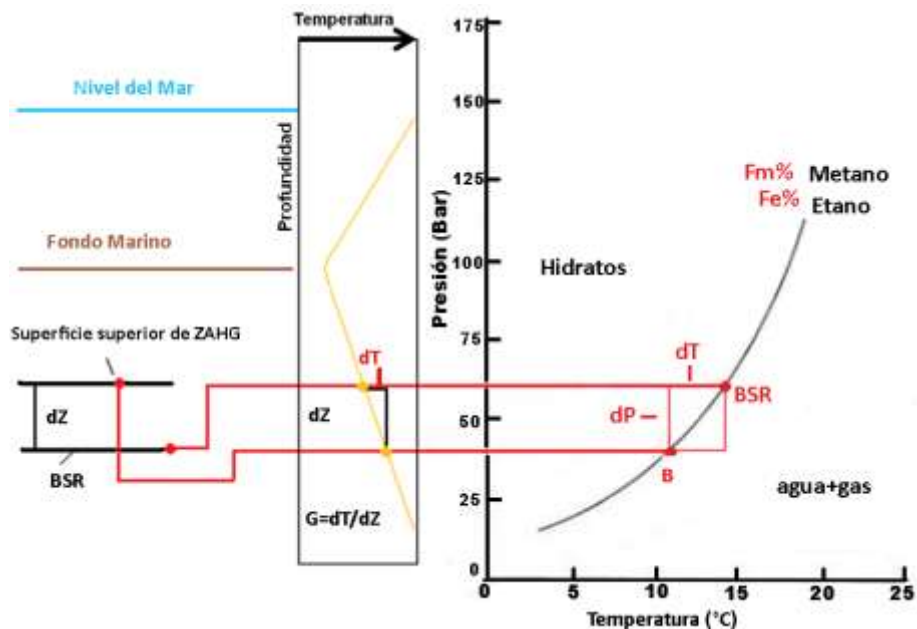


Figura 8. En acumulaciones someras de hidratos las condiciones de presión y temperatura en la superficie superior de los hidratos y el BSR, pertenecen al menos a una curva de equilibrio (puntos “B” y “BSR”). Debido a la condición de equilibrio, en la superficie superior y el BSR, el gradiente geotérmico (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.

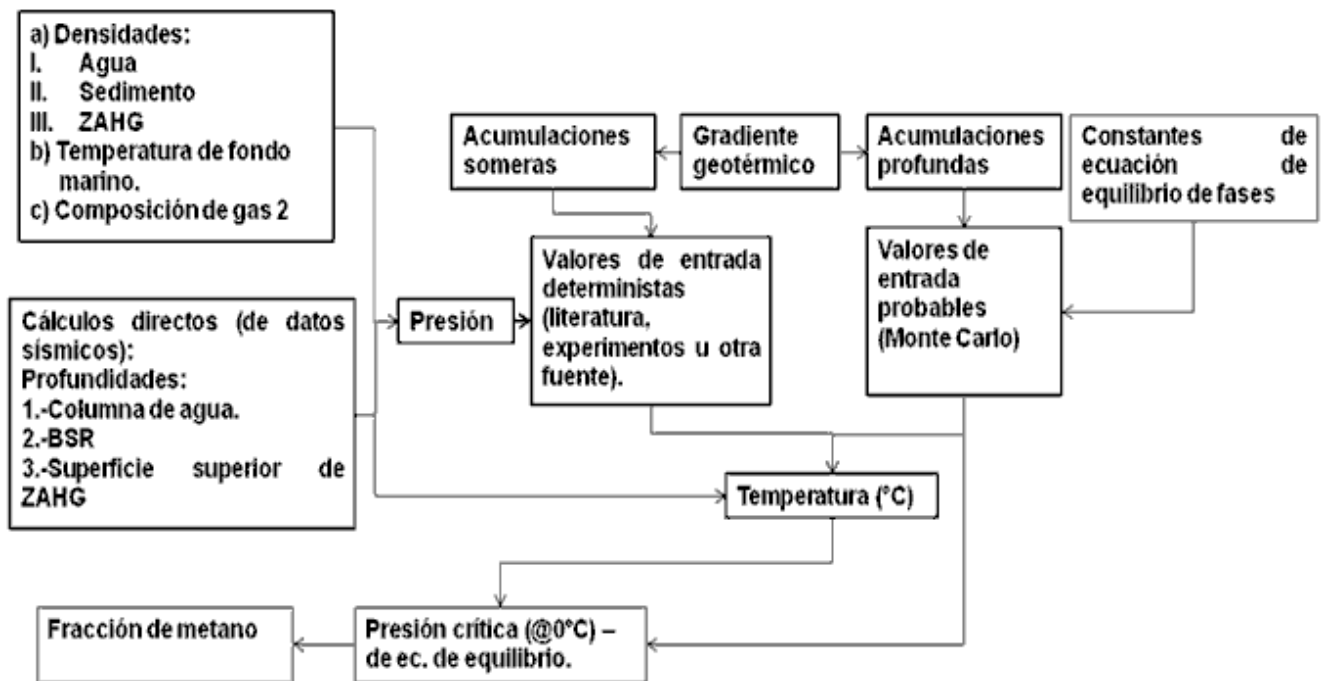


Figura 9. Diagrama de flujo de modelo de inferencia de composición de hidratos a partir de datos sísmicos. El diagrama presenta el caso de una acumulación profunda de hidratos. Tanto el conjunto de los valores de gradiente, como de los coeficientes de la curva de equilibrio deben ser calculados por medio 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:

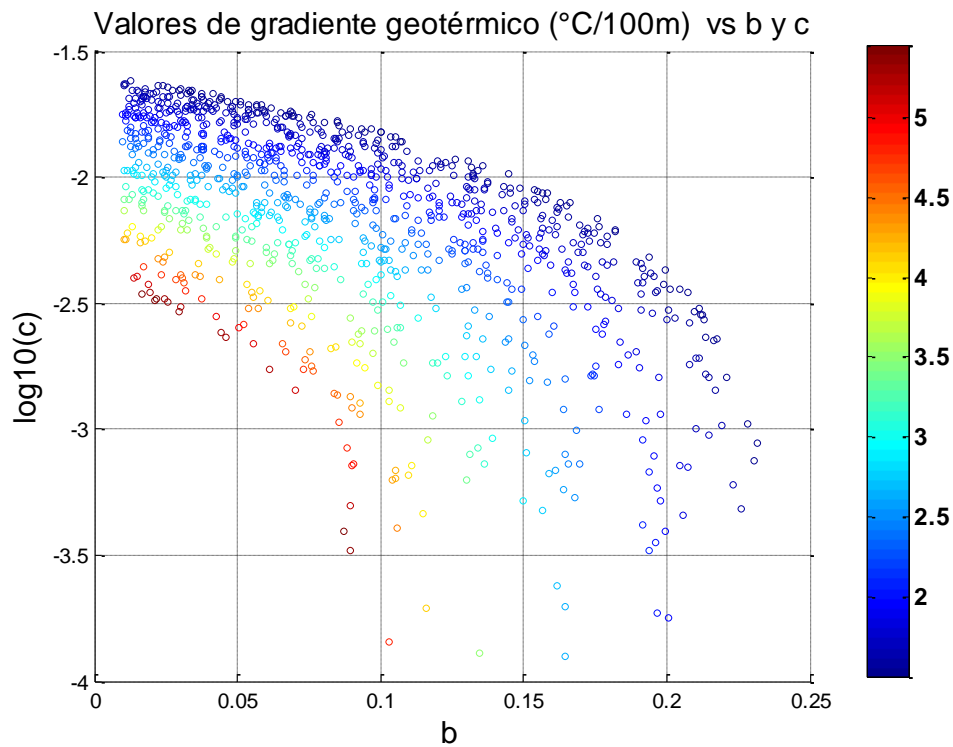
$$P_2 = g(\rho_w Z_w + \rho_1(Z_1 - Z_w) + \rho_2(Z_2 - Z_1)) \quad (12)$$

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  $\rho_w$ ,  $\rho_1$  y  $\rho_2$  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.**

<b>Datos de entrada</b>	
<b>Profundidad del agua (m)</b>	<b>250.00000</b>
<b>Temperatura de agua en fondo (°C)</b>	<b>4.00000</b>
<b>Profundidad de superficie superior de hidratos desde fondo marino (m)</b>	<b>100.00000</b>
<b>Espesor de hidratos (m)</b>	<b>250.00000</b>
<b>Densidad del agua (Kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b>1030</b>
<b>Densidad promedio de sedimentos sobre hidratos (Kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b>1750</b>
<b>Densidad promedio de sedimentos en hidratos (Kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b>1500</b>

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.

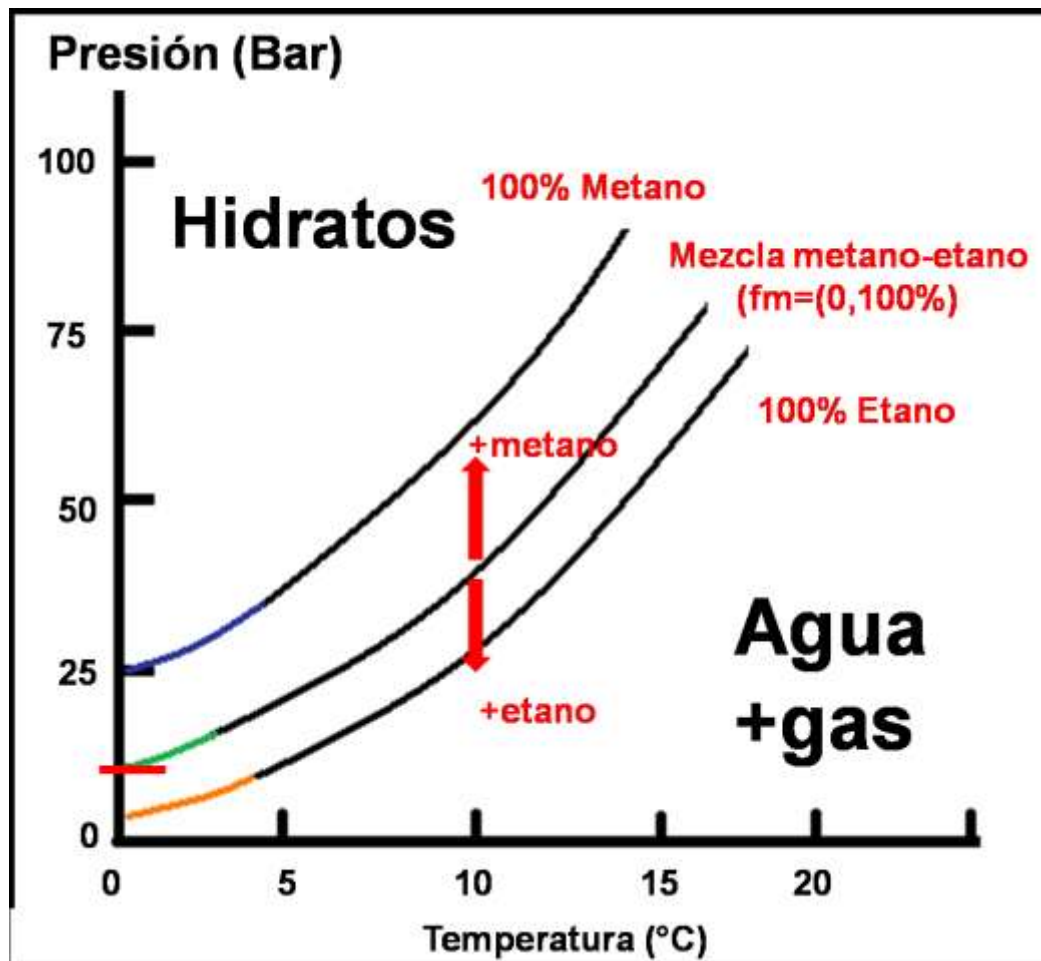


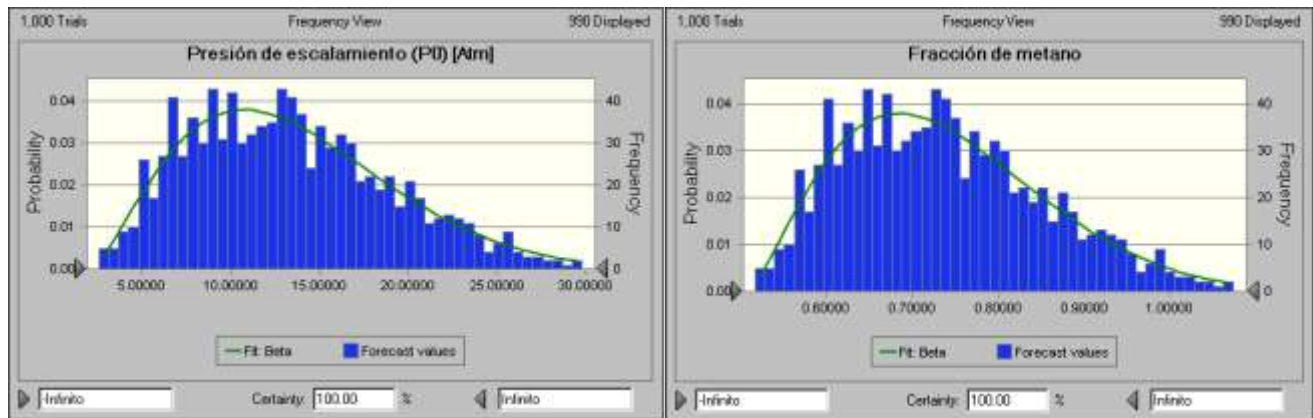
Figura 11. Según el modelo, el rango de presiones críticas que son aceptables para cualquier mezcla de metano más un segundo gas, está restringido por la presión crítica del metano, y el segundo gas (etano). Figura modificada a partir de Lerche y Noeth (2003).

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*<sup>®</sup>, 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*<sup>®</sup>. 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).

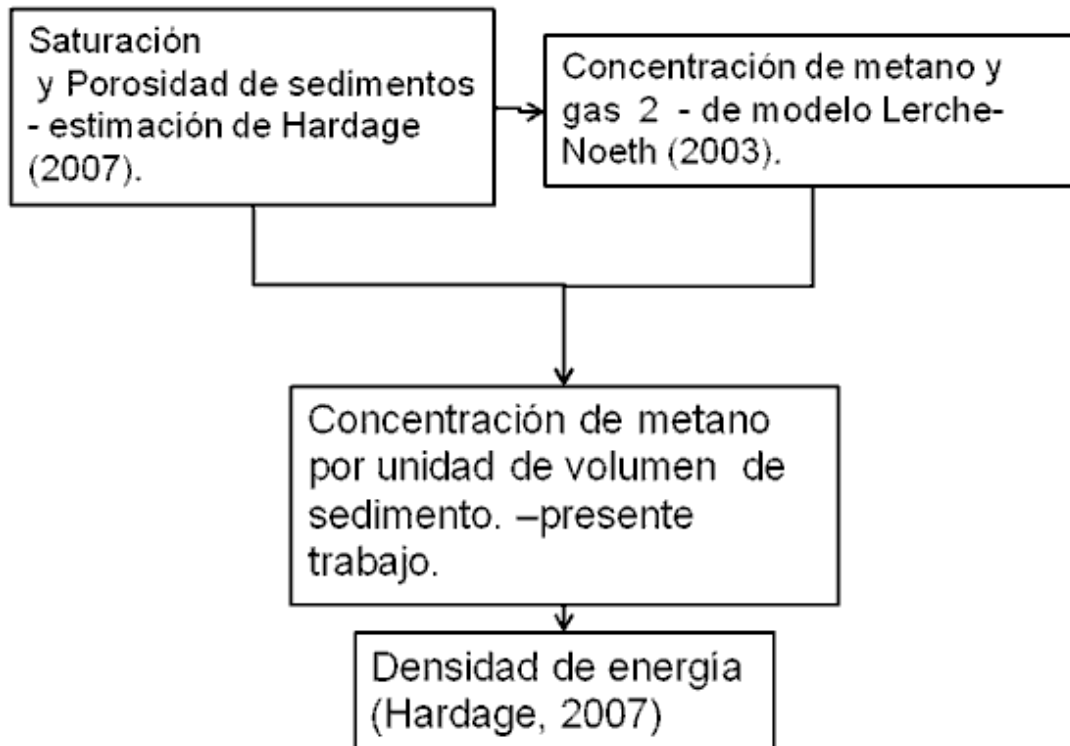


Figura 13. Modelo de estimación de densidad de energía almacenada en una acumulación de hidratos de gas.

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

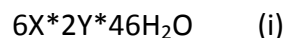


establecer un método de inferencia de la concentración de metano y el potencial energético de cierto volumen de hidratos, a partir de datos sísmicos de reflexión como únicas observaciones directas.

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  $1\text{m}^3$  de hidratos puede contener hasta  $164\text{m}^3$  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  $\phi$  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*<sup>®</sup> 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.

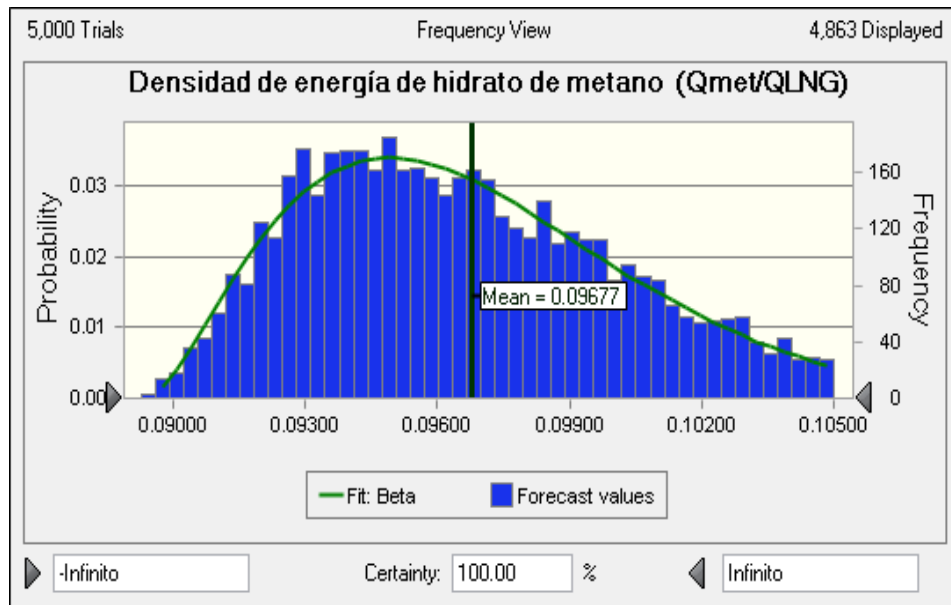


Figura 14. Estimación de la densidad de energía en función de la concentración de metano en un hidrato de gas. Las unidades de energía están normalizadas en función de contenido energético en un volumen equivalente de gas natural licuado.

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  $\mu_m$  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/ m<sup>3</sup>); la del sedimento sobre la ZAHG  $\rho_1=1750$  (Kg/ m<sup>3</sup>) 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.



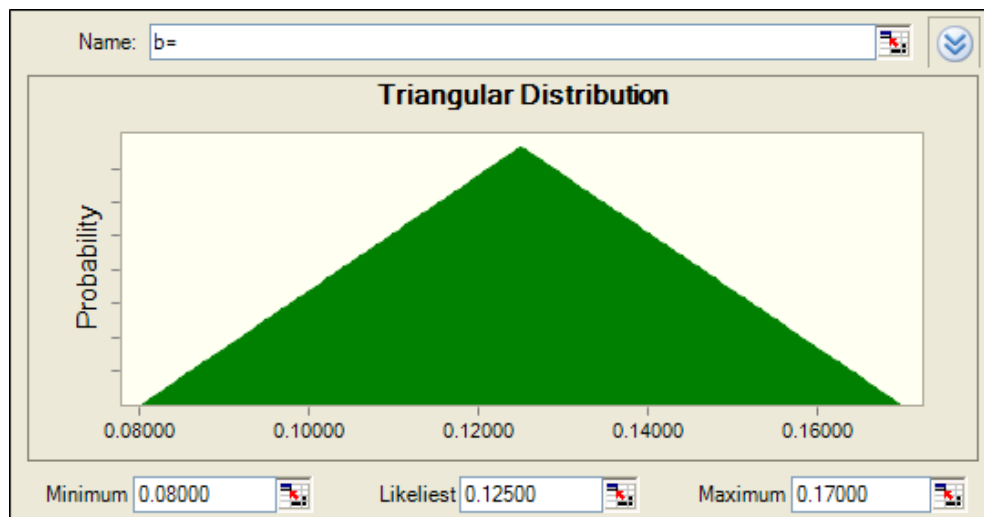


Figura 15. El parámetro  $b$  de la ecuación para la curva de equilibrio tiene una distribución triangular insesgada. En la pantalla aparecen el valor mínimo *–minimum–*, 0.08, la moda (*likeliest*), 0.125 y el máximo (*maximum*), 0.17.

En la definición de los rangos que empleo en este trabajo, se presenta la media ( $\mu$ ) 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.**

### III.-Aplicación a una sección sísmica en profundidad

Para probar la efectividad del modelo de **estimación de la composición de hidratos de gas con sismología de exploración** utilicé tanto ejemplos ficticios como ejemplos reales de acumulaciones de hidratos. Los dos primeros ejemplos son ficticios y fueron tomados de Lerche y Noeth (2003). Los otros seis ejemplos son objetivos reales seleccionados en la sección sísmica que presenté en el capítulo anterior.

Para determinar la concentración de metano y la densidad energética, el primer paso fue analizar el comportamiento de los valores de gradiente geotérmico en función de los parámetros de la curva de equilibrio ( $b$  y  $c$ ) en los primeros dos ejemplos -mediante la rutina de MATLAB. El objetivo fue tener una idea de los rangos preferentes en los que el modelo acepta los valores aleatorios de dichos parámetros. Después realicé la estimación de la fracción de metano y etano, para todos los ejemplos con la rutina elaborada en MATLAB y con el software de simulación de sistemas Crystal Ball. Finalmente, calculé la densidad energética por unidad de volumen, en términos de su equivalente en *Gas Natural Licuado* mediante Crystal Ball.

Los ejemplos hipotéticos que presento, se diferencian esencialmente por el tirante de agua y en consecuencia, por la presión hidrostática sobre la zona de acumulación. El primer ejemplo ya fue presentado brevemente en la sección anterior –tabla 1- y en sentido estricto, representa una acumulación “somera” de hidratos, pues tiene un tirante de agua de 250 (m). No obstante, este ejemplo fue tratado como “profundo” dado que la presión sobre la acumulación de hidratos ronda el límite superior de presiones de formación, para cualquier mezcla metano-etano. El segundo ejemplo representa un caso “profundo”, donde el tirante de agua es de 600 (m). Posteriormente, presentaré los resultados para los seis ejemplos reales.

### III.1- Ejemplo 1 (Ejemplo hipotético)

#### III.1.1.- Datos

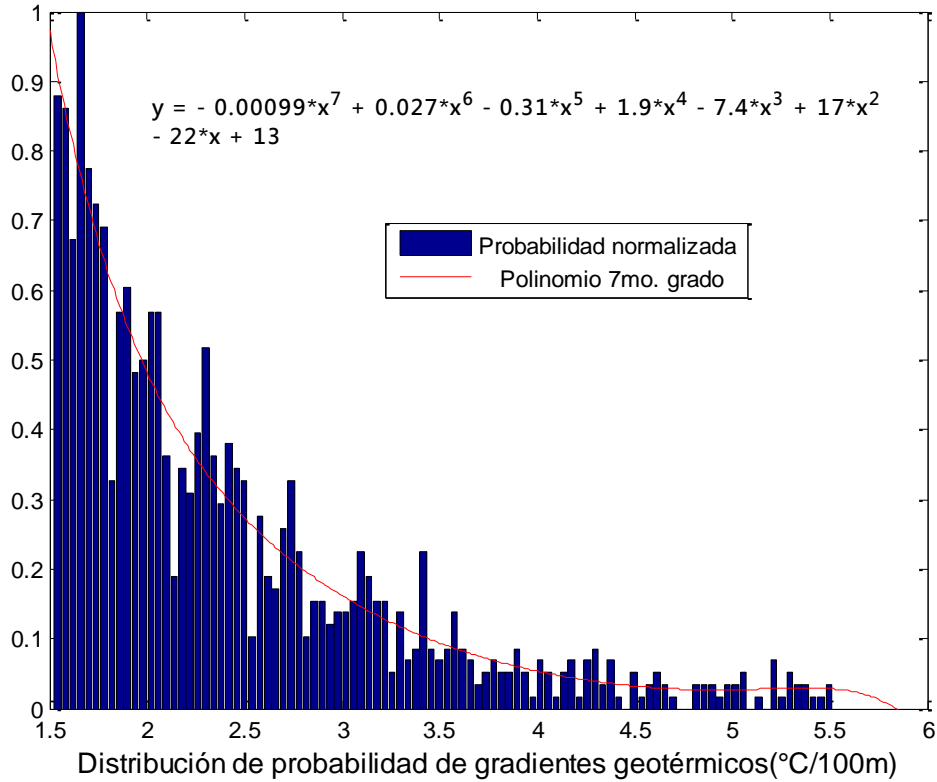
Nuevamente comienzo por presentar la tabla de valores de entrada del ejemplo 1:

Datos de entrada	Unidades	
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)	(m)	250.00000
Profundidad a BSR	(m)	350
Densidad del agua	(Kg/m <sup>3</sup> )	1.03000
Densidad promedio de sedimentos sobre hidratos (adimensional)	(Kg/m <sup>3</sup> )	1.75000
Densidad promedio de sedimentos en hidratos (adimensional)	(Kg/m <sup>3</sup> )	1.50000

#### III.1.3.-Resultados

Los primeros resultados que expongo son los generados en MATLAB<sup>®</sup>. La figura 16, muestra el histograma de frecuencias relativas del gradiente geotérmico obtenido para el ejemplo 1. Un polinomio de ajuste de séptimo grado aparece graficado junto con su ecuación. La desviación estándar fue  $\sigma=0.6367$ . El valor medio del gradiente geotérmico fue de 2.417 (°C/100m). De acuerdo al histograma, la probabilidad de ocurrencia de los valores de gradiente geotérmico, decrece asintóticamente a medida que los valores se alejan del límite inferior de 1.5 [°C/100m].

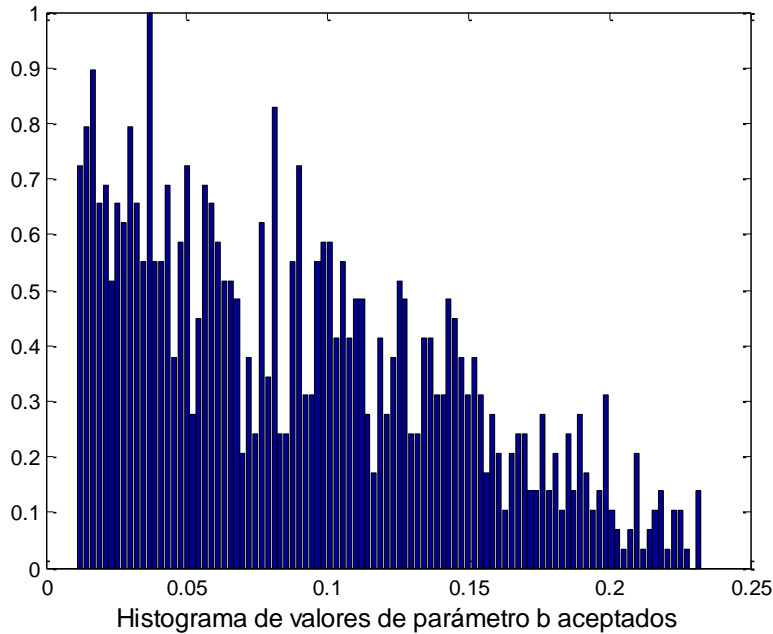
En las figuras 17 y 18 aparecen los histogramas de frecuencias de valores de  $b$  y  $c$  que producen valores de gradiente geotérmico dentro del rango de valores aceptados. Los valores aceptados con mayor frecuencia tienden a ser los más cercanos al límite inferior de las distribuciones. En consecuencia, los valores más grandes de  $b$  y  $c$ , suelen producir valores de gradiente geotérmico que no pertenecen al rango de valores permitidos.



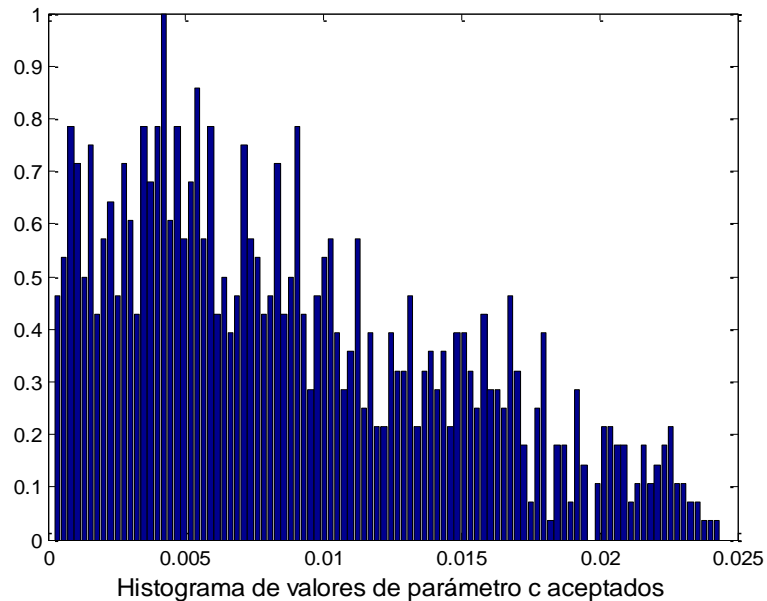
**Figura 16. Histograma de gradientes geotérmicos probables, para una mezcla de 90% metano y 10% etano con un tirante de agua de 250 m (ejemplo 1). Los valores de probabilidad fueron normalizados respecto a la moda absoluta. La curva morada representa un polinomio (décimo grado) de aproximación a la distribución de probabilidad real. La ecuación del polinomio aparece en la gráfica.**

Dada la gran dependencia del modelo en los rangos, los histogramas de valores aceptados de las constantes de la curva de equilibrio  $-b$  y  $c$ , son útiles para la elección de valores.

En el histograma del parámetro  $b$  –figura 17- existe una primera tendencia modal en el límite inferior del rango de valores desde  $b=0.01$  hasta  $0.05$ . Existe además una segunda moda visible que abarca los valores en el rango  $b=(0.06,0.08)[1/°C]$ .



**Figura 17. Histograma de frecuencias de los valores aceptados del parámetro  $b$  de la curva de equilibrio para el ejemplo 1.**



**Figura 18. Histograma de frecuencias del parámetro  $c$  para el ejemplo 1. Los valores de mayor frecuencia de  $c$ , pertenecen al intervalo de 0.001 a 0.005.**

En el caso del parámetro  $c$  –figura 18-, la distribución de valores aceptados es semejante a la de  $b$ , pues posee una tendencia multimodal.

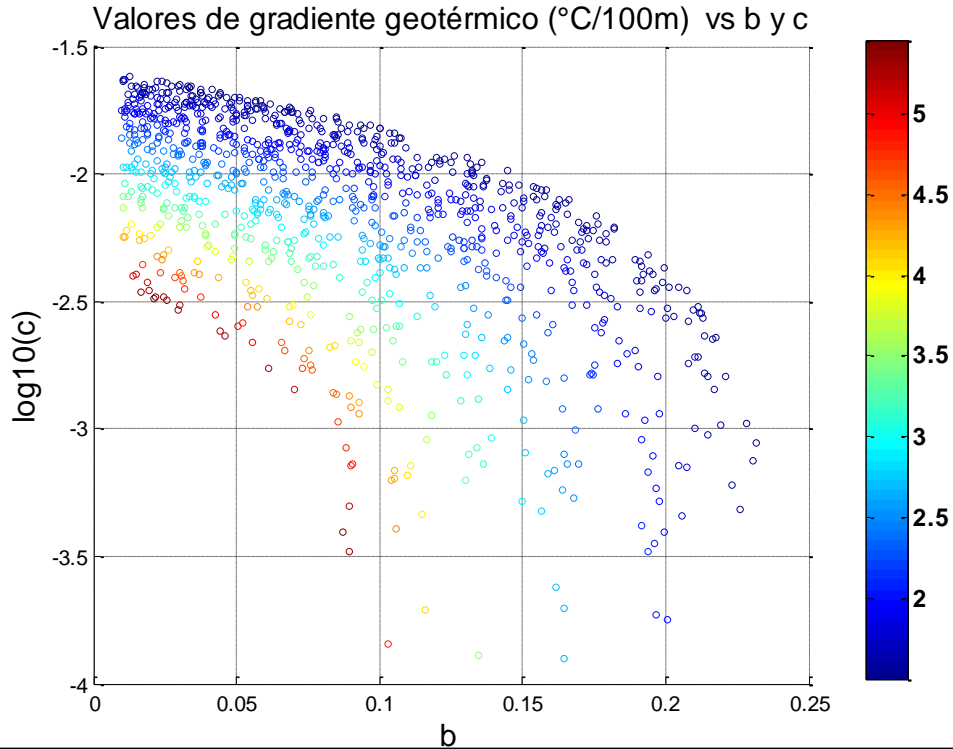
Nuevamente presento la gráfica de dispersión de valores de gradiente en la figura 19. Los valores de gradiente más grandes corresponden a los valores más pequeños de  $b$  y  $c$ . La dependencia del gradiente respecto de  $c$  es grande cuando los valores de  $b$  son pequeños. A medida que los valores de  $b$  aumentan la tendencia se modifica hasta que el gradiente se vuelve prácticamente independiente de  $c$  y fuertemente dependiente

de  $b$ .

A continuación, presento los histogramas correspondientes para este ejemplo generados en *Crystal Ball*®. El número de ensayos fue de 5000. La distribución de probabilidad que utilicé para generar valores de gradiente geotérmico, se muestra en la figura 20.

En las figuras 21 y 22 se presentan respectivamente los histogramas de frecuencias relativas para la presión de escalamiento y la fracción de metano esperada. Dado que la presión

hidrostática dentro de la zona de estabilidad es semejante a la presión crítica de formación del hidrato de metano puro, como era de esperar, la fracción de metano fue considerablemente alta.



**Figura 19. Gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra los parámetros  $b$  y  $c$ , de la ecuación de equilibrio para el ejemplo 1.**

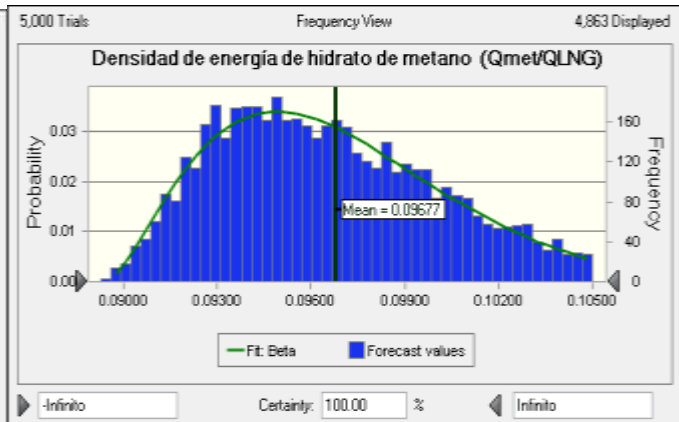
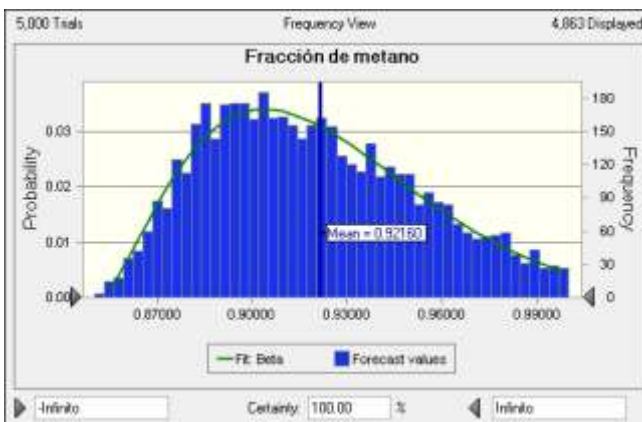
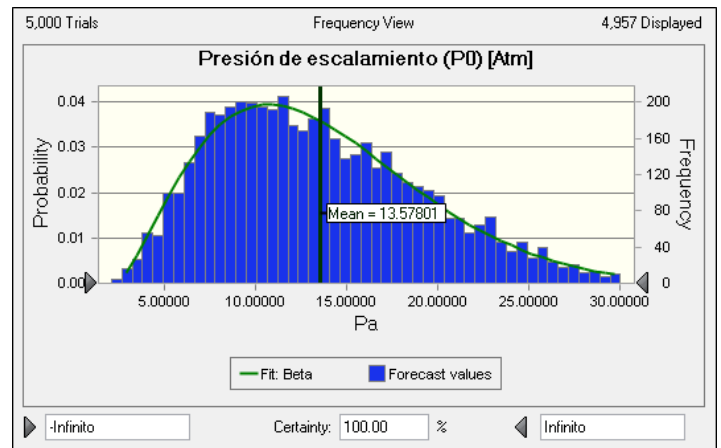
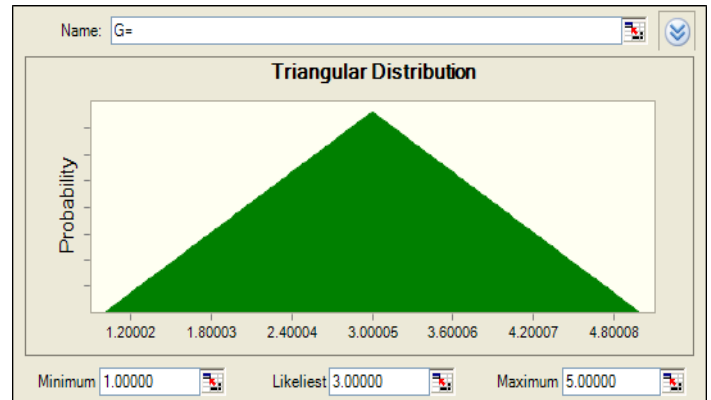
En la figura 23 se presenta, por último, la densidad energética en función de la concentración de metano. La densidad de energía por unidad de volumen de hidratos aparece normalizada en términos de su equivalente en gas natural licuado. Las distribuciones teóricas, con mejor aproximación para los valores de fracción de metano y de la densidad de energía, aparecen con la línea verde en las gráficas; el tipo de distribución aparece en la parte inferior de la gráfica.

Arriba: Figura 20. Distribución de probabilidad para los valores de entrada de gradiente geotérmico para el cálculo de la fracción de metano.

En medio: Figura 21. Histograma de la presión de escalamiento para una profundidad de agua de 250 metros – ejemplo 1. Con la leyenda “Mean” aparece la media de la distribución de probabilidad.

Inferior izquierda: Figura 22. Histograma de frecuencias para la fracción de metano – ejemplo 1. La fracción tiene un valor decimal de 0 a 1. La media de la fracción de metano resultó 92%.

Inferior derecha: Figura 23. Histograma de frecuencia de valores de densidad de energía normalizados respecto de un volumen equivalente de Gas Natural Licuado –ejemplo 1. La densidad de energía tuvo una media de 9.6%.



La fracción media de metano en el ejemplo 1 fue de 92% y la densidad energética fue ~9.6% del equivalente de volumen en Gas Natural Licuado. El resto de los detalles estadísticos para este caso se presentan en el apéndice.

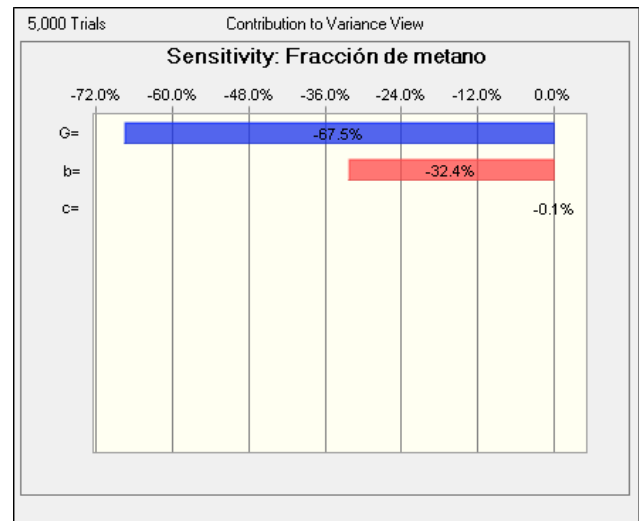
En un intento por mejorar el desempeño del modelo, realicé los cálculos de la fracción de metano en todos los ejemplos con un cambio de rango en  $b$ . El nuevo rango fue  $b=(0.1,0.2; \mu=0.15)[1/^\circ\text{C}]$ . La modificación en algunos casos, permitió realizar los cálculos sin mayor problema. En otros, afectó de manera considerable los resultados de la fracción de metano produciendo valores erróneos.

Por lo tanto pude concluir que en algunos casos (cuando los valores de salida del modelo son aceptables) es posible modificar el rango de  $b$ , sin producir resultados con errores importantes. No obstante, decidí utilizar el rango original  $-b=(0.08,0.17;\mu=0.125)[1/^\circ\text{C}]$ -, porque el nuevo rango de  $b$  no permitió obtener valores correctos de la fracción de metano para todos los ejemplos.

Existen, sin embargo, recursos para determinar cómo modificar los rangos de cada parámetro aleatorio, de manera que los cambios no alteren considerablemente los resultados. La función de los histogramas de valores de entrada aceptados en las simulaciones, es vital para este proceso.

En la figura 24 aparece la gráfica de la sensibilidad del modelo respecto de  $b$ ,  $c$  y el gradiente geotérmico. El signo negativo en los porcentajes de sensibilidad se debe a que las distribuciones de las variables de salida tienen sesgo a la izquierda.

El sesgo a la izquierda significa que en los histogramas la moda se encuentra a la izquierda de la media. Si el sesgo fuera hacia la derecha el signo sería opuesto.



**Figura 24. Gráfica de sensibilidad de la concentración de metano respecto del gradiente geotérmico (G) y los parámetros de la ecuación de equilibrio (b y c).**



El gradiente geotérmico fue el valor al que el modelo presentó mayor sensibilidad, dado que el rango [ $4(^{\circ}\text{C}/100\text{m})$ ] y el coeficiente de variación ( $4/3$ ) son los más grandes de todas las variables de entrada. El coeficiente de variación que obtuve representa la magnitud del rango dividido entre la media.

El coeficiente de variación de  $b$  ( $0.09/0.125$ ) es notablemente menor al de  $c$  ( $0.0003/0.00015=2$ ). Sin embargo dado que los valores de  $c$  son muy pequeños, la sensibilidad del modelo respecto de este parámetro es mucho menor a la de  $b$ . Cuando se ensayaron rangos de este parámetro con un ligero incremento, en los valores de salida fue inmediato, conduciendo a una alta sensibilidad y problemas para el cálculo de la fracción de metano.

### **III.2-Ejemplo 2 (Ejemplo hipotético)**

#### **III.2.1.-Datos**

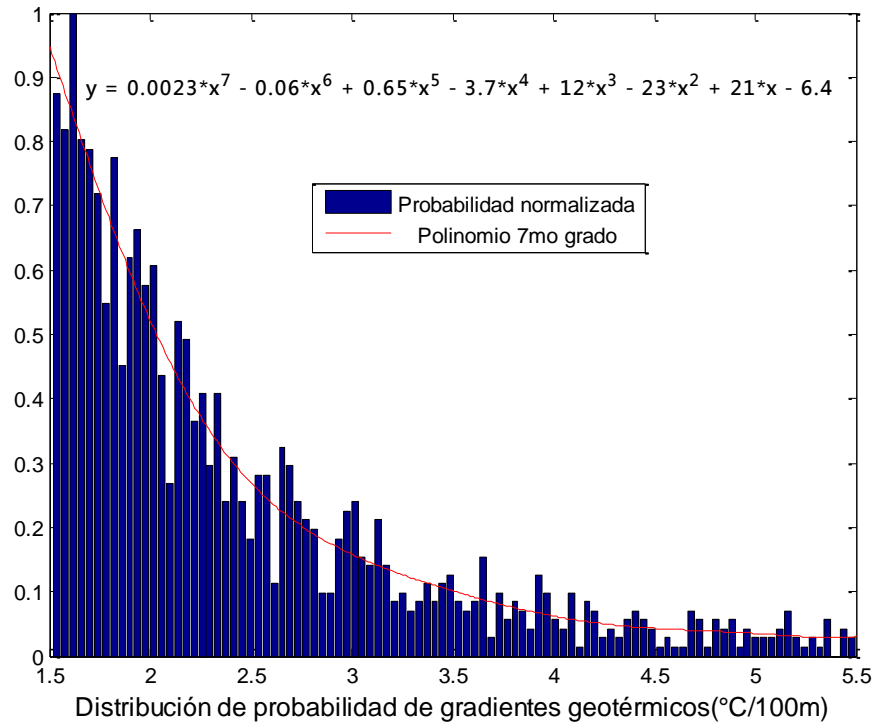
En este ejemplo los datos de entrada y criterios de resolución fueron los mismos que los aplicados al ejemplo 1, excepto el valor de la profundidad del agua, que cambió de 250 a 600 metros.

#### **III.2.3.-Resultados**

Para el ejemplo 2, en la media y desviación estándar del histograma de valores de gradiente geotérmico posibles – figura 25.

Los valores de gradiente geotérmico en el ejemplo 2, tuvieron un cambio en la dispersión, puesto que la desviación estándar ( $\sigma=0.6881$ ), sufrió un incremento pequeño (1.18%). Este comportamiento indica que el límite superior del rango de los valores de gradiente geotérmico que el modelo acepta, aumenta cuanto mayor es el tirante de agua. La media de los valores aceptados de gradiente geotérmico [ $2.387(^{\circ}\text{C}/100\text{m})$ ] tuvo un incremento casi imperceptible [ $0.0309(^{\circ}\text{C}/100\text{m})$ ] respecto del ejemplo 1. Este comportamiento concuerda con el marco termodinámico y geológico que hemos propuesto para la zona de estabilidad, puesto que un incremento en los valores de presión hidrostática sobre la acumulación de hidratos conducirá una mayor tolerancia a los incrementos de temperatura, sin alterar la zona de estabilidad. Por esta causa, durante la simulación el programa aceptó valores de gradiente más elevados de los que aceptó para el ejemplo con menor profundidad.

Así mismo, las distribuciones de frecuencias de los valores aceptados para los parámetros aceptados  $b$  y  $c$ , sufrieron variaciones menores. En la figura 26, se presenta el histograma del parámetro  $b$ . Tanto en el ejemplo 1 como en el 2, todos los parámetros presentan un intervalo modal cerca del límite inferior de sus rangos. Sin embargo para el ejemplo 2, alrededor de  $b=(0.05,0.13)[1/^\circ\text{C}]$  se presenta un segundo intervalo modal.



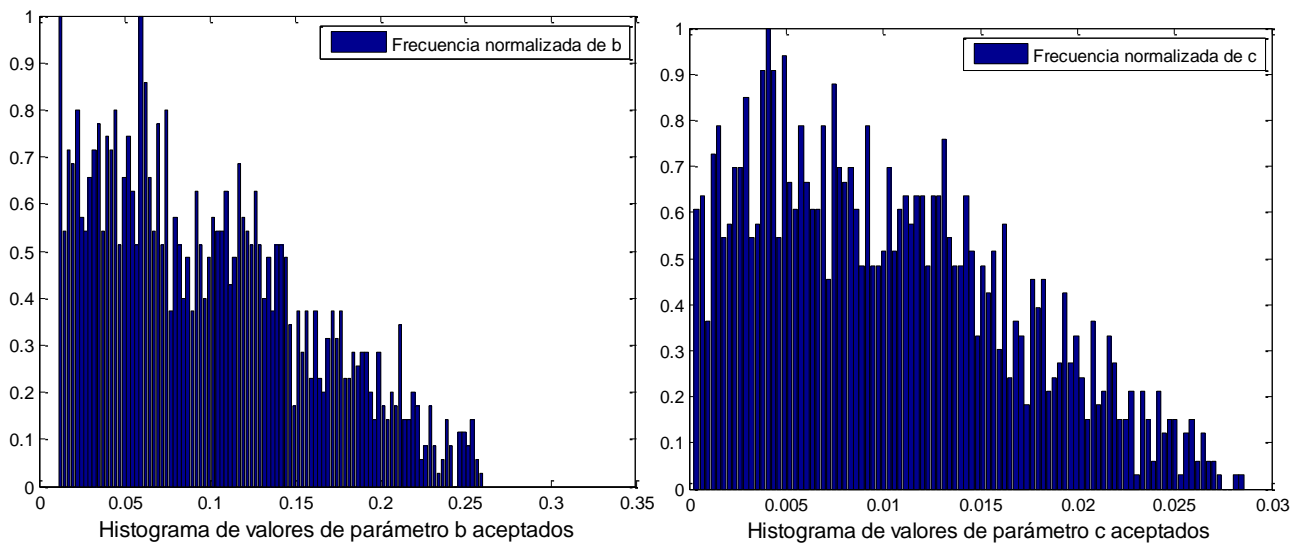
**Figura 25. Histograma de gradientes geotérmicos probables para el ejemplo 2, con una mezcla de 90% metano y 10% etano como huésped. Los valores de probabilidad fueron normalizados respecto al máximo. La línea morada representa un polinomio (séptimo grado) de aproximación a la distribución de probabilidad real. La ecuación del polinomio aparece en la gráfica.**

En la figura 27 presento los valores generados del parámetro  $c$ . El histograma muestra que los valores aceptados del parámetro tienen una moda bien definida en  $c=(0.002,0.007)$ . Por tanto los valores de  $c$ , que permiten fracciones de metano entre 0 y 100%, suelen ser pequeños.

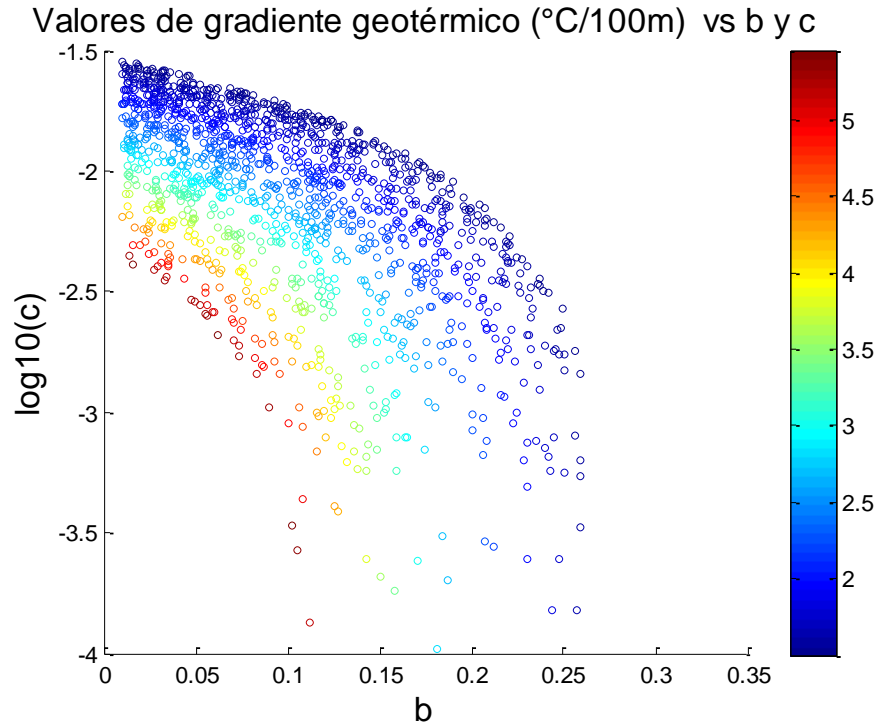
Finalmente la figura 28 presenta los valores de gradiente en dispersión respecto de  $b$  y  $c$ , para el ejemplo 2. Con el aumento en el tirante de agua, la distribución de valores de gradiente es más compacta y con una relación funcional respecto de  $b$  y  $c$ , mejor definida. Nuevamente, debido al aumento en la presión hidrostática, existe un mayor

número de valores de gradiente aceptados –representados por una mayor cantidad de puntos- que permiten la existencia de la mezcla metano-etano como huésped. La apariencia de esta gráfica permite además, suponer que la dependencia del gradiente geotérmico en  $b$ , se reduce con el aumento en el tirante de agua.

A pesar de las diferencias en las gráficas de dispersión, el gradiente geotérmico muestra mucha mayor sensibilidad respecto de los parámetros  $b$  y  $c$ , que respecto de la variación en el tirante de agua. La ventaja de la poca sensibilidad del gradiente geotérmico respecto de la profundidad, radica en que los valores escogidos reflejarán más el comportamiento de los parámetros  $b$  y  $c$ . Esto significa que el modelo depende más de las propiedades termodinámicas expresadas en la ecuación de equilibrio, que de las particularidades de ubicación y profundidad del punto que se desea estudiar. Dicho comportamiento concuerda con lo que es lógico esperar en una cuenca oceánica real donde **el valor del gradiente geotérmico es independiente de la profundidad del agua.**



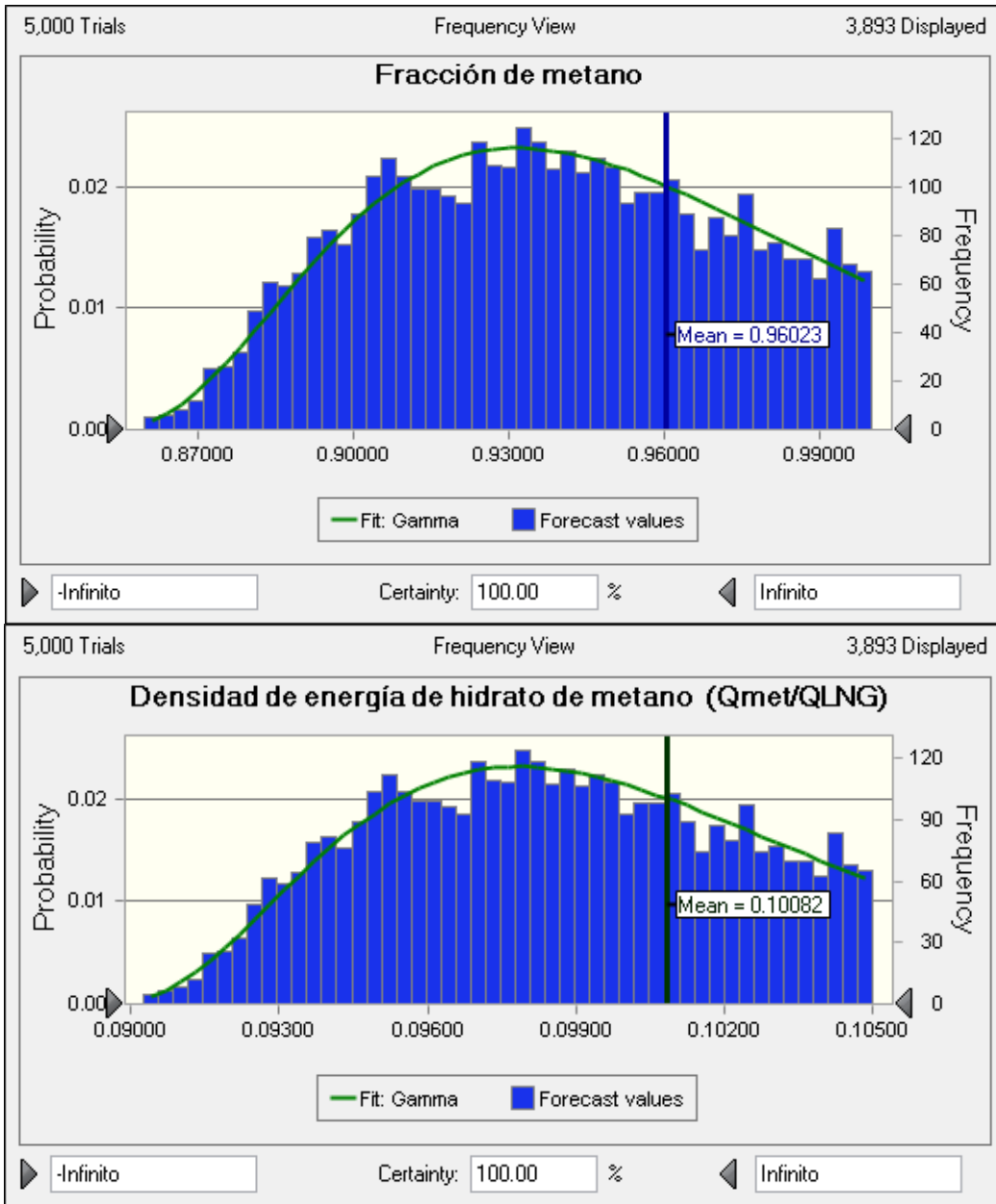
Izquierda: **Figura 26. Histograma de frecuencias de los valores aceptados del parámetro  $b$  para la curva de equilibrio del ejemplo 2.** Derecha: **Figura 27. Valores aceptados del parámetro  $c$ .** En el histograma todos los valores están normalizados respecto del valor de máxima frecuencia.  $c$  presenta un intervalo de valores de alta recurrencia entre 0.002 y 0.007.



**Figura 28. Gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra los parámetros  $b$  y  $c$ , de la ecuación de equilibrio para el ejemplo 2.**

La etapa siguiente para el ejemplo 2, fue el cálculo de la fracción de metano y la densidad energética mediante simulaciones de Monte Carlo realizadas con el software *Crystal Ball*<sup>®</sup> -figuras 29 y 30. Por cuestiones de brevedad, omitiré a partir de este ejemplo las gráficas de sensibilidad y de la presión de escalamiento.

El aumento en la presión hidrostática, produjo que la presión de escalamiento y por tanto la fracción de metano, aumentasen considerablemente. La densidad de energía, en consecuencia, presenta valores que también son más altos que los que se presentan en el ejemplo 1. **La media de la fracción de metano fue de 96% y la densidad de energía tuvo una media de 10%.**



**Figura 29. Arriba: Histograma de frecuencia de la fracción de metano del ejemplo 2 (Zw=600m).**

**Figura 30. Abajo: Histograma de frecuencia de valores de densidad energética por unidad de volumen normalizada con respecto a un volumen equivalente de gas**

### III.3- Ejemplos reales de estimación de concentraciones de metano y densidades de energía.

En este apartado ilustraré la aplicación del modelo de estimación de la composición de hidratos de gas a una imagen sísmica real.

La información directa que utilizo, consiste en la imagen sísmica en profundidad -figura 31-, donde identifiqué la presencia de una acumulación de hidratos de gas. La imagen ha sido presentada previamente en las figuras 2 y 6, del presente trabajo. Fue proporcionada por el Instituto Mexicano del Petróleo y Petróleos Mexicanos. Por cuestiones de confidencialidad se omite la ubicación exacta del sitio.

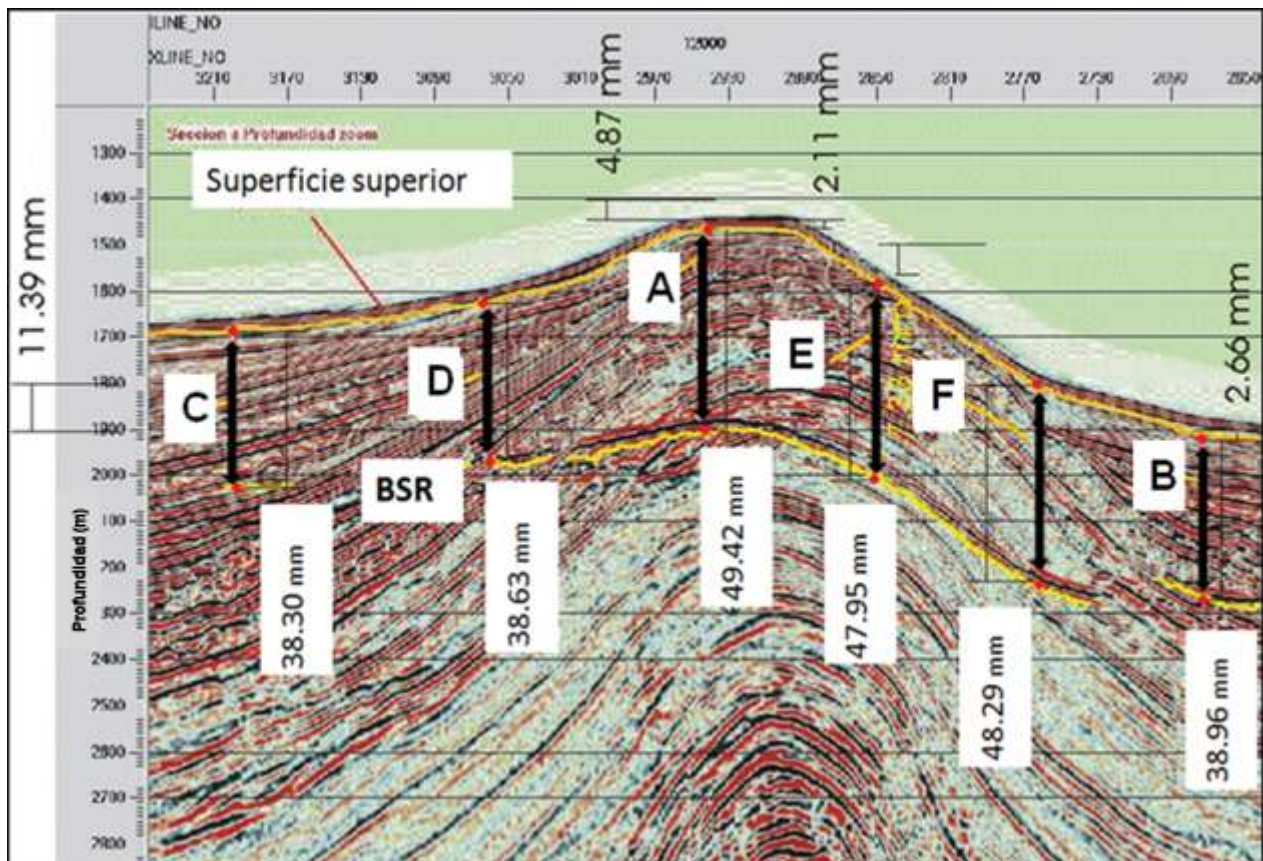


Figura 31. Sección sísmica en profundidad con cotas y marcas para cada uno de los ejemplos de aplicación del modelo (etiquetados con letras de la A a la F). Las unidades corresponden a la escala empleada en Corel Draw para medir las profundidades y espesores en la imagen. Imagen proporcionada por el Instituto Mexicano del Petróleo y Petróleos Mexicanos. Imagen del Golfo de México. Proporcionada por Petróleos Mexicanos a través del Instituto Mexicano del Petróleo.

Dado que las condiciones físicas, geológicas y químicas en una acumulación real de hidratos varían en función de la posición, la certidumbre en los resultados que se obtengan dependerá de la cantidad de puntos de análisis dentro de la acumulación de hidratos. Para poder estimar la fracción media de metano a lo largo del perfil sísmico seleccioné seis puntos. A continuación, presento la imagen con los puntos seleccionados y las escalas marcadas en *Corel Draw*<sup>®</sup>.

En la sección sísmica (figura 31) seleccioné seis puntos que denominé objetivos -identificados con las letras **A** a la **F**. Para el análisis de los seis objetivos, procuré elegir sitios con la mayor dispersión posible en términos de la profundidad del agua.

El objetivo A pertenece a la cúspide de la estructura antiforme - que aparece en la sección-, y es en consecuencia el más somero de todos. El objetivo B se encuentra dentro de la zona más profunda. Los puntos C al F, poseen profundidades intermedias entre 1500 y 1800 metros.

En la tabla se presentan los seis objetivos y sus profundidades con la escala de *Corel Draw*<sup>®</sup> y las cantidades en metros.

**Tabla 3. Profundidades observadas en la sección sísmica –figura 40- para cada objetivo, en unidades medidas en *Corel Draw*<sup>®</sup> y su equivalente en metros. La escala se presenta en el extremo derecho de la tabla.**

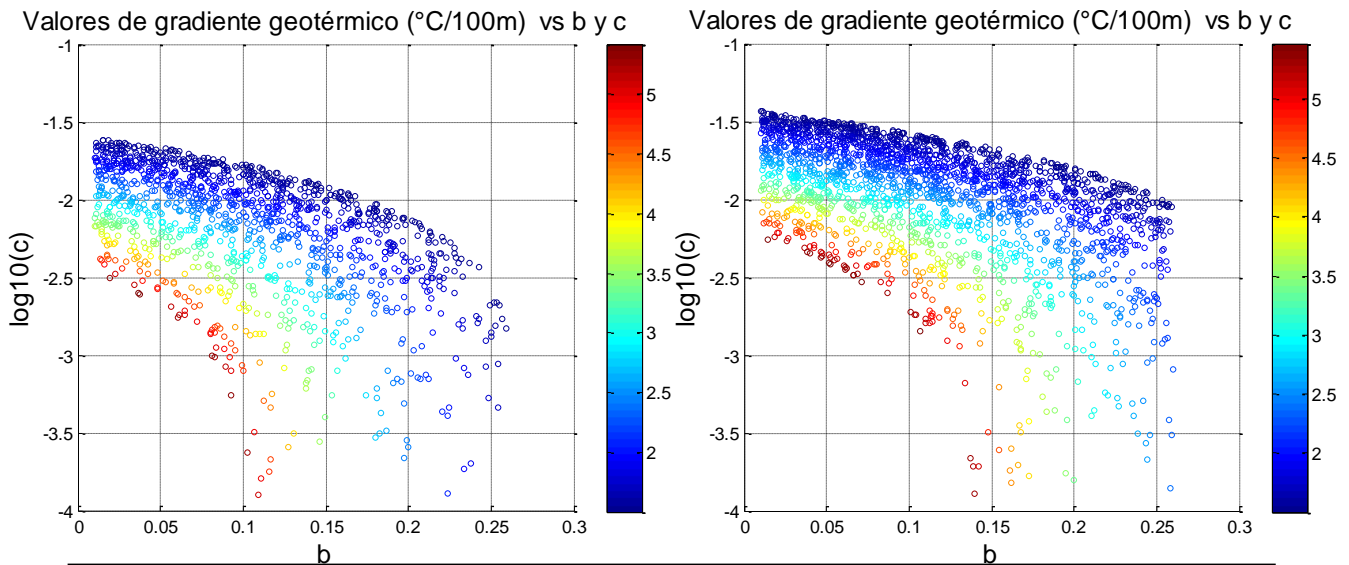
Objetivo	Profundidad a fondo marino (m)	Profundidad a superficie superior de hidratos	Profundidad a superficie superior de hidratos (m)	Prof. a BSR	Prof. a BSR (m)	Espesor	Espesor (m)	Escala	
A	1442.7568	2.11	18.5250219	51.53	452.414399	49.42	433.889377	Unidades en metros	Unidades en Corel Draw (mm)
B	1823.35382	2.11	18.5250219	38.96	342.054434	36.85	323.529412		
C	1681.47498	2.11	18.5250219	33.3	292.361721	31.19	273.836699	100m=	11.39
D	1600	2.11	18.5250219	38.63	339.157155	36.52	320.632133	1m=	0.1139
E	1781.47498	2.11	18.5250219	48.29	423.968393	46.18	405.443371		
F	1564.3547	2.11	18.5250219	47.95	420.983319	45.84	402.458297		

Por las profundidades a las que se encuentra, la sección sísmica en su totalidad y en consecuencia cada uno de los seis objetivos, representan una acumulación de hidratos “profunda”. Las fracciones de metano, resultaron

sumamente altas y notablemente mayores a las del ejemplo 2. Este comportamiento es *-a priori-* congruente con las premisas del modelo.

### III.3.1.- Objetivos A y B

Los primeros resultados que presento corresponden a los cálculos realizados en MATLAB<sup>®</sup>. Para comenzar, incluyo a continuación las gráficas de dispersión de gradientes geotérmicos, respecto de  $b$  y  $c$ , para los objetivos A y B – Figuras 32a y 32b. Posteriormente presento los histogramas de los valores de gradiente geotérmico, los parámetros  $b$  y  $c$ , las presiones de escalamiento de la mezcla y las fracciones de metano para ambos puntos.



**Figura 32a. Izquierda. Gráfica de dispersión del objetivo A ( $Z_w \approx 1442\text{m}$ ), de gradiente geotérmico contra parámetros  $b$  y  $c$ . Figura 32b. Derecha. Gráfica de dispersión del objetivo B ( $Z_w \approx 1823\text{m}$ ).**

Los histogramas de la fracción de metano fueron generados al dejar variar, tanto los parámetros  $b$  y  $c$  como el gradiente geotérmico. Todas las gráficas están ordenadas en pares de acuerdo a la variable analizada para ambos objetivos – es decir A y B. Esto permite comparar los resultados de ambos casos.

La presentación de estas gráficas, resulta útil para poder apreciar la sensibilidad del modelo al cambio en la presión lito e hidrostática, dada la gran diferencia de profundidad al fondo marino ( $\sim 400\text{m}$ ) entre el punto A y el B.

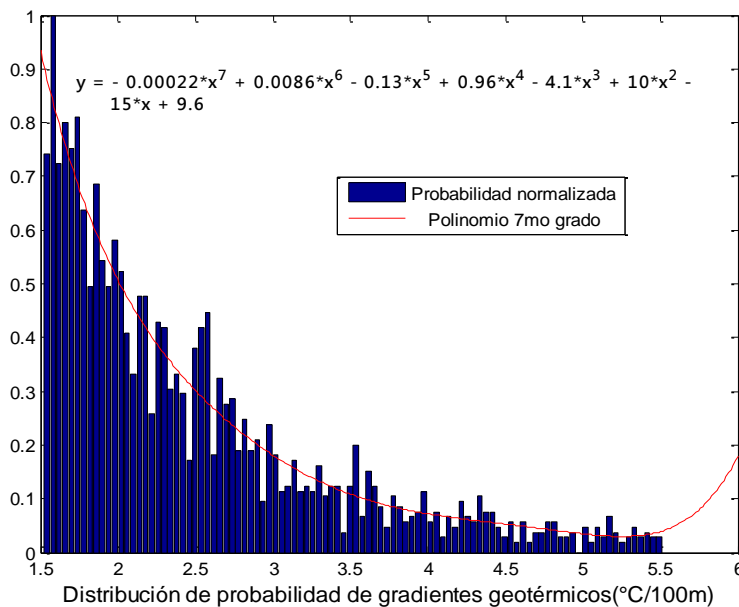
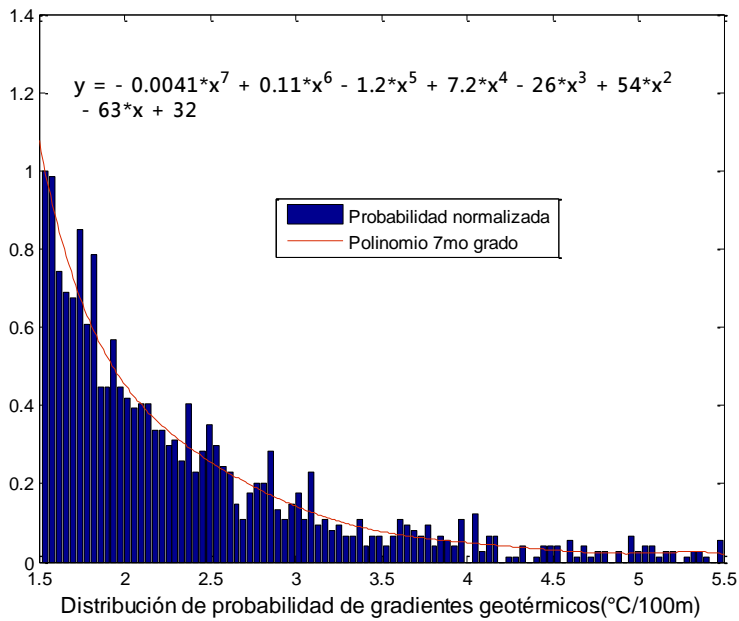


El cambio en la presión lito e hidrostática para A y B, es de gran importancia. El tirante de agua sobre B es aproximadamente 400 metros mayor que sobre A. Por otro lado el espesor de la zona de acumulación en A, es alrededor de 100 metros mayor que en B. El efecto neto, es un aumento de presión total que afecta las condiciones termodinámicas de manera importante, las distribuciones de gradientes geotérmicos esperados y fracciones de metano calculadas por el modelo. Estos cambios se reflejan claramente en las gráficas de dispersión de valores de gradiente geotérmico en función de  $b$  y  $c$ .

El aumento en la presión hidrostática respecto de A en el objetivo B, modifica la relación de dependencia del gradiente respecto de los parámetros  $b$  y  $c$  - ver figuras 32, a y b. En la gráfica del objetivo A, existe una dependencia importante de los valores de gradiente, respecto de  $b$ , para valores pequeños de  $c$  –figura 32a. Con el aumento de presión en el objetivo B, la dependencia del gradiente respecto del parámetro  $b$ , se torna casi nula para todos los valores de gradiente geotérmico presentados – figura 32b.

Aunque el patrón de dispersión de valores de gradiente geotérmico, y la relación funcional respecto de  $b$  y  $c$  cambió del ejemplo A al B, los histogramas de frecuencias de del gradiente geotérmico sufrieron cambios mínimos de un objetivo a otro -figuras 33a y 33b. Entre ambos existe una diferencia en la media estadística de gradientes geotérmicos de 0.1496 [°C/100m]. La desviación estándar de las distribuciones varía entre ambos puntos  $\sim 9 \times 10^{-3}$  [°C/100m].

A partir de las figuras 32 y 33, a y b, podemos claramente establecer, que: i) **los cambios de presión hidrostática y litostática, sobre la zona de acumulación, provocan un cambio en la relación funcional del gradiente geotérmico respecto de  $b$  y  $c$ .** ii) **No obstante, la distribución de valores de gradiente geotérmico se afectada mínimamente por las condiciones batimétricas particulares de la acumulación. Esto significa que, aunque la relación del gradiente geotérmico con  $b$  y  $c$  se modifica con el cambio en el tirante de agua, los valores de gradiente geotérmico que satisfacen las condiciones para la existencia de hidratos (con una mezcla metano-etano como huésped) son esencialmente los mismos.**



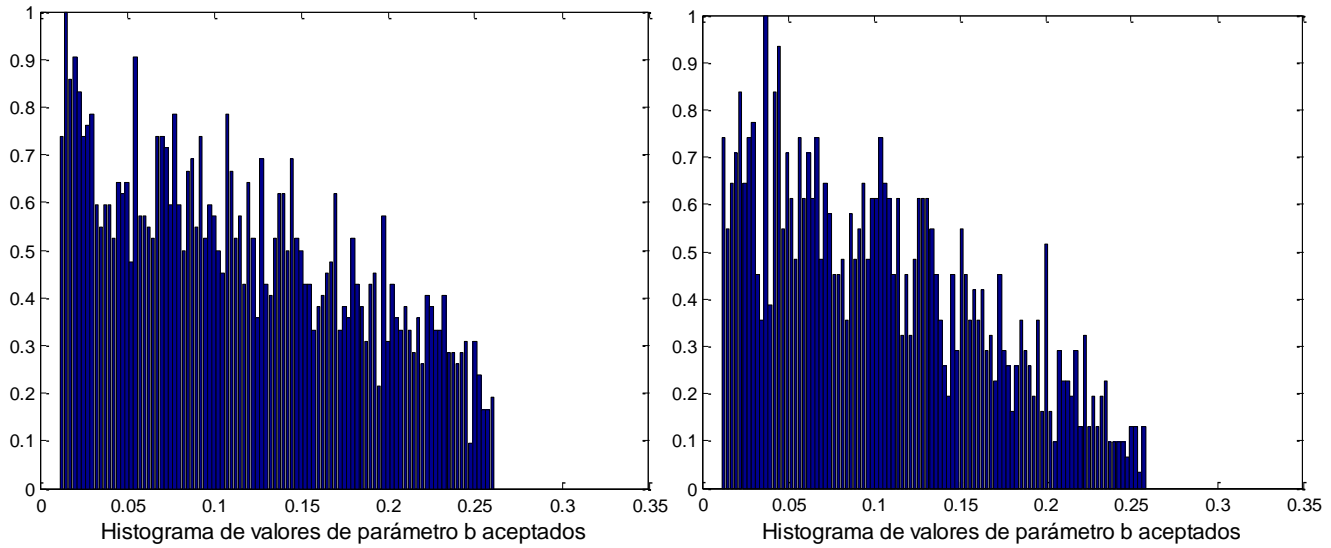
**Figura 33a.** Arriba. Gradientes geotérmicos calculados dentro del rango  $G=(1.5,5.5)[^{\circ}\text{C}/100\text{m}]$  para el objetivo A.

**Figura 33b.** Abajo. Gradientes geotérmicos calculados dentro del rango  $G=(1.5,5.5)[^{\circ}\text{C}/100\text{m}]$  para el objetivo B. En las gráficas se muestran las ecuaciones de los polinomios de ajuste (líneas continuas rojas).

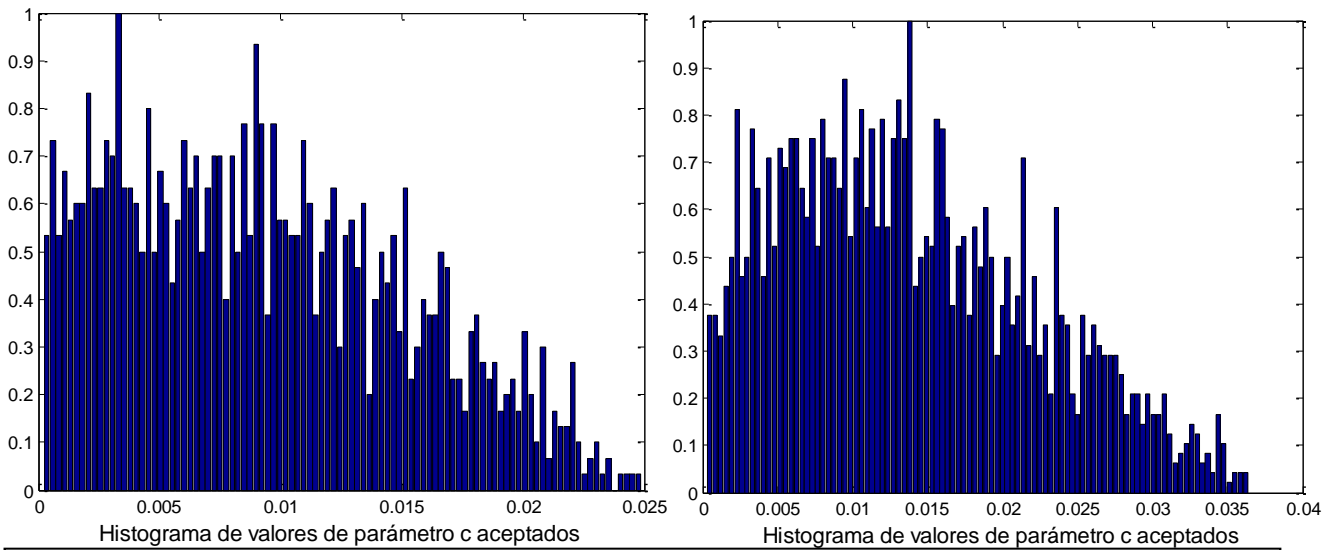
En las figuras 34a, 34b, 35a y 35b, presento los histogramas de frecuencias de los valores  $b$  y  $c$ , para los objetivos A y B. Cada histograma describe la frecuencia de ocurrencia de valores para las constantes de las curvas de equilibrio, que permiten la existencia de una mezcla binaria etano-metano como huésped en una acumulación de hidratos de gas. Tanto en el caso del objetivo A, como en el de B, los valores más frecuentes, son cercanos al límite inferior de los rangos respectivos de  $b$  y  $c$ .

Nuevamente se confirman los resultados obtenidos para los ejemplos 1 y 2.

La información que aportan las gráficas de las figuras 34 y 35 (a y b), junto con las gráficas de dispersión de gradientes geotérmicos (figuras 33 a y b) indican que **es posible definir rangos mucho más estrechos para las variables aleatorias de entrada, sin afectar de manera sustantiva la fracción de metano y las tendencias de comportamiento del modelo siempre y cuando los nuevos rangos se centren en un intervalo modal.**



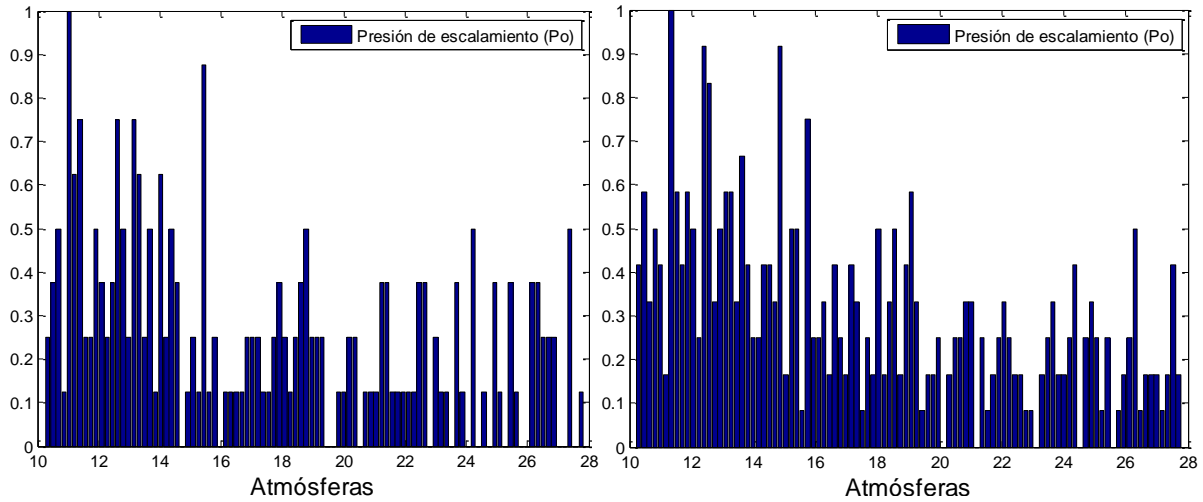
**Figura 34a.** Izquierda. Valores del parámetro  $b$  para el objetivo A, calculados dentro del rango  $b = (0.01, 0.25)$  [ $1/^\circ\text{C}$ ]. **Figura 34b.** Derecha. Valores del parámetro  $b$  para el objetivo B, calculados dentro del rango  $b = (0.01, 0.25)$  [ $1/^\circ\text{C}$ ]. Para ambos objetivos, la distribución de frecuencias de  $b$ , es prácticamente idéntica.



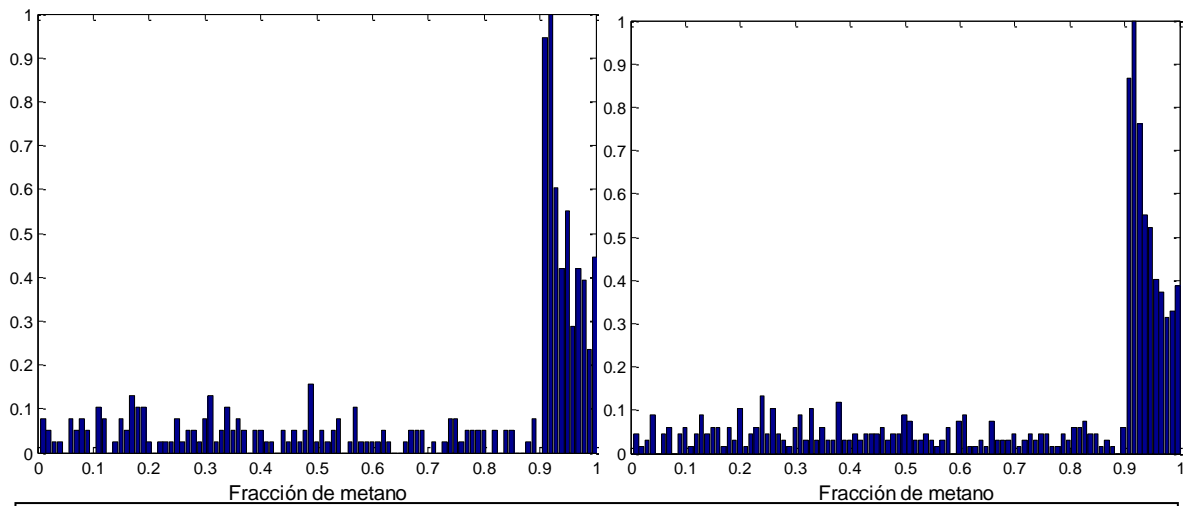
**Figura 35a.** Izquierda. Valores del parámetro  $c$  para el objetivo A, calculados dentro del rango  $c = (0.0001, 0.1)$  [ $1/^\circ\text{C}$ ]<sup>2</sup>. **Figura 35b.** Derecha. Valores del parámetro  $c$  para el objetivo A, calculados dentro del rango  $c = (0.0001, 0.1)$  [ $1/^\circ\text{C}$ ]<sup>2</sup>. Tanto la dispersión como la variabilidad de las distribuciones de frecuencias en función de los cambios en la presión son elevadas para este parámetro.

Con fines comparativos, y como información adicional, presento los histogramas equivalentes para las presiones de escalamiento y las fracciones de metano producidos en MATLAB®. La distribución de probabilidad de los valores de presión de escalamiento, de acuerdo a los histogramas de las figuras 36 a y b, no sufren modificaciones mayores al

cambiar la profundidad desde 1442 (m) – objetivo A-, a 1823 (m) –objetivo B. Por esta causa las fracciones de metano estimadas con este código, tampoco tuvieron una variación significativa y ambas resultaron cercanas a uno – figuras 37 a y b.



**Figura 36a.** Izquierda. Histograma de valores de presión de escalamiento ( $P_o$ ) para el objetivo A, calculados dentro del rango de la presión del metano  $P_m$  (~26.2 Atm) y el etano  $P_e$  (~5.2 Atm). **Figura 36b.** Derecha. Histograma de valores de presión de escalamiento ( $P_o$ ) para el objetivo B.



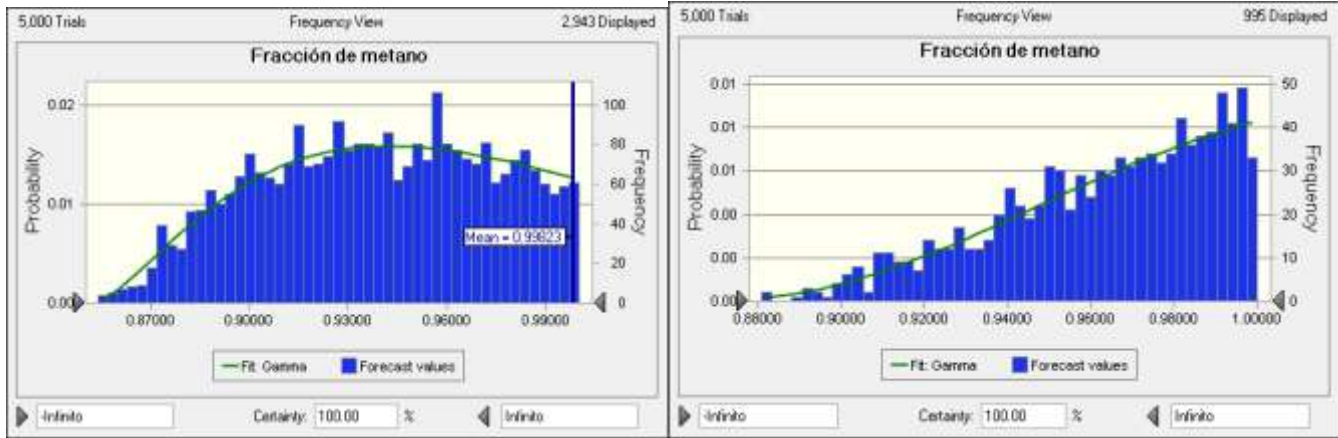
**Figura 37a.** Izquierda. Histograma de valores de fracción de metano ( $f_m$ ), para el objetivo A, calculado en MATLAB®, dentro del rango de la presión del metano  $P_m$  (~26.2 Atm) y el etano  $P_e$  (~5.2 Atm). **Figura 37b.** Derecha. Histograma de frecuencias para los valores de la fracción de metano ( $f_m$ ) para el objetivo B.

Algunas discrepancias menores en los valores de salida del modelo, al cambiar de plataformas (de *Crystal Ball*<sup>®</sup> a MATLAB<sup>®</sup>), se deben al cambio en los rangos para generar los valores de  $b$  y  $c$  – que fueron mucho más grandes que los empleados en *Crystal Ball*<sup>®</sup>-, los algoritmos y la precisión intrínseca de cálculo de cada herramienta. Además, aunque el efecto del tipo de distribución utilizada es mínimo, es posible que al cambiar a distribuciones de probabilidad -las empleadas en MATLAB<sup>®</sup> fueron uniformes, no triangulares- existan cambios en los valores de salida.

La importancia de poder comparar entre los resultados generados por medio de *Crystal Ball*<sup>®</sup> y MATLAB<sup>®</sup> reside en comprobar la estabilidad y confiabilidad del modelo. Este ejercicio permite evaluar la precisión con la cual las hipótesis, premisas y condiciones que constituyen el modelo de estimación de composición de hidratos, describen la realidad física expresada en la información sísmica, y no efectos numéricos ficticios que sean provocados por la herramienta de cálculo que se usa.

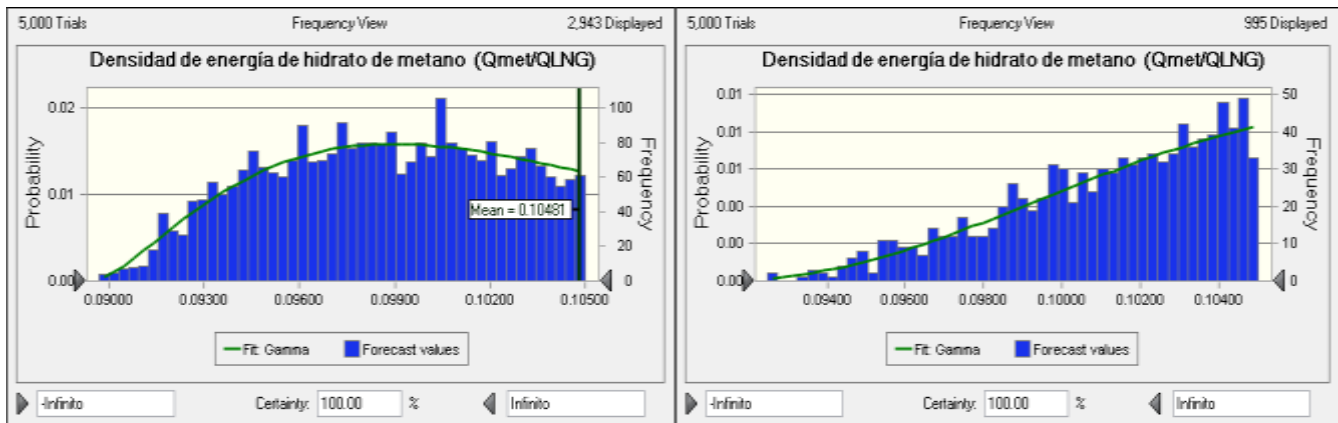
A continuación, presento los resultados obtenidos mediante *Crystal Ball*<sup>®</sup> para la fracción de metano y la densidad de energía para los objetivos A y B. El resto de la información, como son los detalles estadísticos de los histogramas y los valores de entrada para los objetivos A y B, se ubican en los apéndices.

Primero, en las figuras 38 a y b presento los histogramas de frecuencias que corresponden a las fracciones de metano para los objetivos A y B. Los valores estimados para la fracción media de metano se ubicaron sobre el 90% (~99% para A y 90 % para B). Las densidades volumétricas de energía promedio, en unidades de gas natural licuado se ubican, por tanto, alrededor del 10% (figuras 39a y 39b).



**Figura 38a.** Izquierda. Histograma de frecuencias para la fracción de metano ( $f_m$ ), para el objetivo A, calculados en *Crystal Ball*® dentro del rango de la presión del metano  $P_m$  (~26.2 Atm) y el etano  $P_e$  (~5.2 Atm).

**Figura 38b.** Derecha. Histograma de frecuencias para los valores de la fracción de metano ( $f_m$ ) del objetivo B. La media no aparece en el objetivo B por que la fracción de metano media estimada es 100%, que es la máxima posible.



**Figura 39a.** Izquierda. Histograma de valores de densidad energética  $E_{hg}$ , para el objetivo A, calculados en *Crystal Ball*®. **Figura 39b.** Derecha. Histograma de valores de densidad energética  $E_{hg}$ , para el objetivo B. Nuevamente como en el caso de la fracción de metano, la densidad de energía

En los histogramas producidos en *Crystal Ball*®, existen dos diferencias importantes, respecto de las contrapartes realizadas en *MATLAB*®:

- i) Las distribuciones empleadas en *Crystal Ball*®, son triangulares y por tanto, las variables aleatorias tienen una menor accesibilidad a los valores extremos de los rangos (Lerche y Noeth., 2003).
- ii) Los valores de la fracción de metano calculados, en los puntos seleccionados en la sección sísmica mostrada, presentan una mayor sensibilidad al cambio en el tirante de agua y por tanto, a la presión hidrostática que predomina en el ambiente de acumulación. En consecuencia, el valor de la media de la fracción de metano es directamente proporcional a la profundidad.

### III.3.2.- Objetivos C al F

Los objetivos C al F, fueron puntos de profundidad intermedia entre A y B. Los parámetros fueron calculados exclusivamente en la rutina elaborada en *Crystal Ball*®. En la tabla 4, reporto la fracción de metano y la densidad energética para cada objetivo. Con la leyenda “*Promedios totales*” aparecen los promedios generales de las medias de los seis objetivos, para las fracciones de metano y densidades de energía esperadas.

**Tabla 4. Resultados de concentración de metano y densidad de energía para los objetivos señalados la sección sísmica –figura 40.**

Objetivo	Profundidad a fondo marino (m)	Profundidad a superficie superior (m)	Prof. a BSR (m)	Espesor (m)	Fracción de metano (esperanza)	Densidad de energía (esperanza)
A	1442.7568	18.5250219	452.41439 9	433.889377	0.99823	0.10481
B	1823.35382	18.5250219	342.05443 4	323.529412	1.0000	0.10500
C	1681.47498	18.5250219	292.36172 1	273.836699	1.0000	0.10500
D	1600	18.5250219	339.15715 5	320.632133	1.0000	0.10500
E	1781.47498	18.5250219	423.96839 3	405.443371	1.0000	0.10500
F	1564.3547	18.5250219	420.98331 9	402.458297	0.99998	0.10500
				<b>Promedio =</b>	<b>0.99970</b>	<b>0.10497</b>

Los resultados reportados en la tabla 4, para las fracciones de metano y densidades de energía son valores que considero aceptables, dado que son muy próximos a los valores esperados de acuerdo al análisis previo (expuesto en esta sección) para los puntos A y B. Las fracciones de metano (que dependen en gran medida de las profundidades y los rangos de  $b$  y  $c$ ), tienen valores para los puntos C al F, muy próximos a los de A y B.

Dado que los rangos de  $b$  y  $c$ , son constantes para los seis puntos, es de esperar que el factor que afecte las fracciones de metano en mayor medida, sea el cambio en las profundidades. La importancia de escoger A y B, como objetivos primarios de análisis es que permiten restringir los resultados que podemos esperar para el resto de los puntos, pues sus profundidades representan los valores extremos del rango de todos los objetivos.



#### IV.- Discusión

A lo largo del presente trabajo, he presentado un modelo que permite estimar la concentración de metano en una acumulación de hidratos y su densidad energética asociada. He presentado una herramienta para poder responder estas interrogantes (con cierta aproximación a la realidad física), contando con evidencias visibles de acumulaciones de hidratos en secciones sísmicas como únicas observaciones directas.

Los valores medios de la concentración de metano, en los puntos seleccionados dentro de la acumulación de hidratos identificada en la sección sísmica, superaron el 90%, como fue sugerido por Francisco Rocha (Comunicación Personal, 2009).

La variabilidad de la fracción de metano, es resultado de varios factores, entre los cuales destacan la profundidad a la acumulación de hidratos, su espesor, la temperatura en el fondo del cuerpo de agua, el número de ensayos realizados en la simulación de Monte Carlo, el rango para los valores de entrada y en menor medida, el tipo de distribución.

La ventaja de aplicar y construir el mismo modelo en dos ambientes o entornos de cómputo distintos, radica en poder cotejar la confiabilidad de los resultados obtenidos. El modelo fue elaborado en *Crystal Ball*<sup>®</sup> originalmente y reportado en Lerche y Noeth (2003). El realizar una versión análoga en MATLAB<sup>®</sup>, posibilita corroborar que los resultados dependen principalmente de la eficacia y precisión en el análisis del problema de estimación de composición de hidratos (ecuaciones, variables involucradas en el problema, entorno físico y geológico, etcétera), y no en el funcionamiento particular de la herramienta de cálculo que se decida usar.

Aunque el modelo de *estimación de la composición de hidratos de gas con sismología de exploración*, restringe el problema a unas cuantas variables físicas y numéricas, su flexibilidad permite aplicarlo a distintos ejemplos con resultados convincentes y confiables (semejantes entre distintas plataformas de cálculo), con un mínimo de recursos necesarios.

El etano fue elegido como segundo gas en la mezcla, en aras de aprovechar el desarrollo previo de Lerche y Noeth (2003). La escasez de documentación detallada, sobre distintos gases de interés, como huéspedes en hidratos, alentó aún más a preservar la elección de la mezcla metano – etano como huésped.

Por otro lado, la abundancia del gas metano y de otros hidrocarburos ligeros como el etano, en el ambiente de formación de hidratos y por tanto como potencial gas huésped (Lerche y Noeth, 2003), junto con extensos estudios de exploración en zonas de acumulación de hidratos, da mayor soporte a la elección de los dos gases.

#### IV.1.- Análisis de los valores calculados

El ajuste de las funciones de distribución teóricas sobre los histogramas de la fracción de metano es aceptable (figura 40). Para el presente trabajo se realizaron solo 5000 ensayos de Monte Carlo en *Crystal Ball*<sup>®</sup> y 10000 en *MATLAB*<sup>®</sup>.

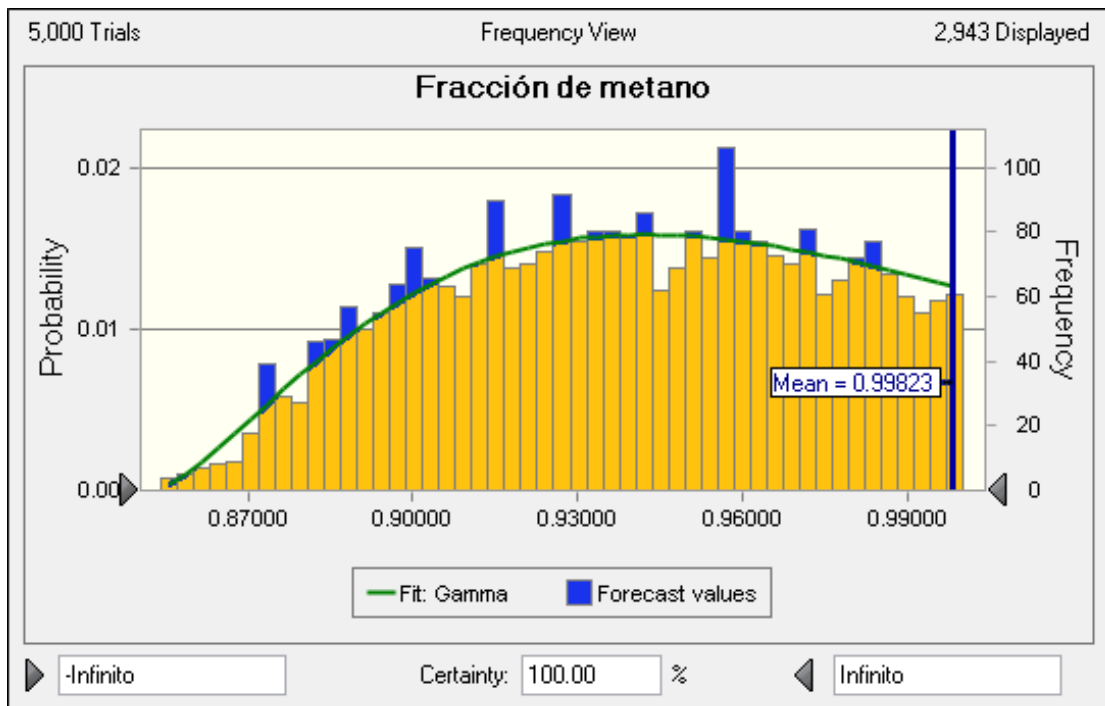


Figura 40. Histograma de la fracción de metano para el objetivo A. La curva verde representa la distribución de probabilidad que mejor ajustó al espacio de los datos en el histograma. El área bajo la curva aparece en amarillo.

Los histogramas de la fracción de metano y la densidad energética, junto con los otros valores de salida, contienen un número de muestras menor (o iguales en el mejor de los casos) al número de ensayos, puesto que hay combinaciones de valores de entrada que no cumplen. El aumento del número de ensayos produjo mejoras incipientes en la precisión de los resultados, a cambio de un costo computacional excesivo.

Además, es importante aclarar que el aumento en el número de los ensayos mejora el ajuste de los datos a la curva teórica de probabilidad y la precisión, pero no su representatividad o verosimilitud. Los resultados que aquí se reportan en los ejemplos 1 y 2, fueron comparados y cotejados con información previa, reportada en Lerche y Noeth (2003).

Los valores de densidad energética resultaron altos, pues rondan el 10% del equivalente de gas natural licuado con fracciones de metano superiores al 90%. Del capítulo II y de acuerdo a Hardage (2007), la densidad de energía es una función de la porosidad  $\Phi$  y de la saturación de hidratos en el espacio poroso. Si consideramos una porosidad  $\Phi = 0.5$ , en sedimentos poco consolidados, una saturación de hidratos  $C_{hg} = 0.5$  y una fracción de metano  $f_m$  como huésped, la ecuación es:

$$E_{hg} = f_m * (0.42 * 0.5 * 0.5) * E_{GNL} \quad (25)$$

Para evaluar la acumulación de hidratos presentada en este trabajo tomemos el objetivo con la menor fracción de metano, que es el A. La media de la fracción de metano, es de 0.99 aproximadamente (99%) para el objetivo A, cuyo tirante de agua es  $Z_w \approx 1442$  (m). La ecuación (25) queda:

$$E_{hg} = (0.99) * (0.42 * 0.5 * 0.5) * E_{GNL} \quad (26a)$$

$$E_{hg} = (0.104) E_{GNL} \quad (26b)$$

Dado que  $E_{hg}$  y  $E_{GNL}$  son cantidades que representan la densidad de energía por unidad de volumen. El volumen de hidratos que produciría igual cantidad de energía (proveniente solo del metano) que un volumen de gas natural licuado es:

$$E_{hg}/0.104 = E_{GNL} \quad (27)$$

$$9.62 E_{hg} \approx E_{GNL} \quad (28)$$

Por lo tanto 9.62 volúmenes de hidratos tienen el mismo potencial energético que un volumen igual de gas natural licuado, con una fracción de metano del 99%, 50% de porosidad en el sedimento de la zona de estabilidad y una saturación de hidratos del 50%.

#### **IV.2.- Análisis de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra parámetros de curvas de equilibrio**

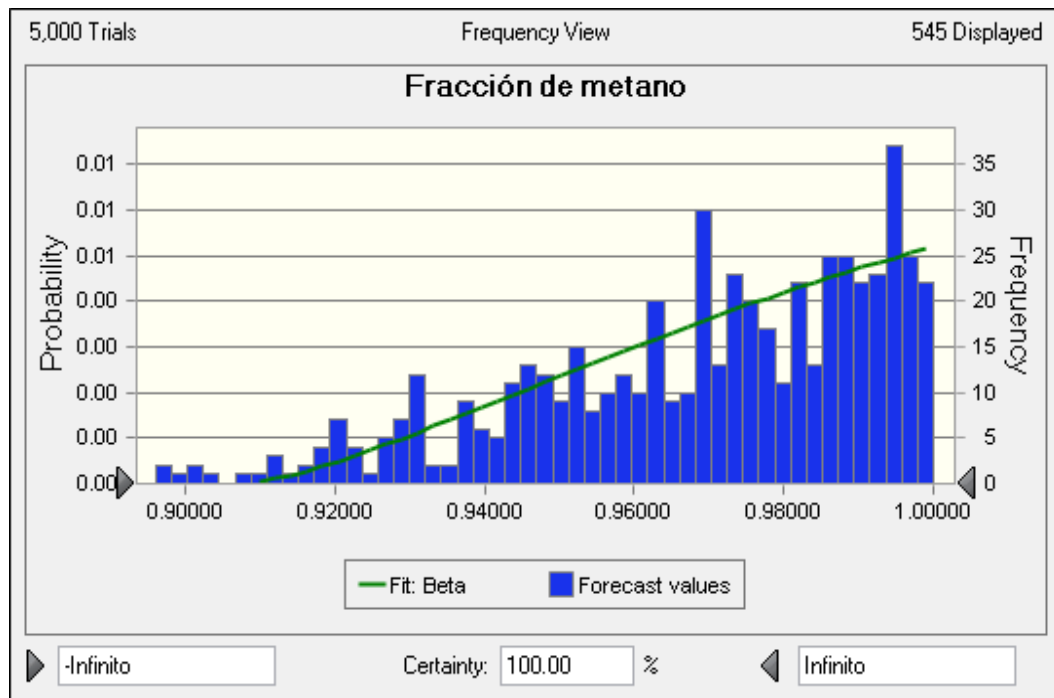
Si conocemos con suficiente detalle la curva de equilibrio de fases hidrato-agua+gas, la acumulación de hidratos en sí misma puede sugerir el campo valores de temperatura dentro de sí misma y el espacio de valores de gradiente geotérmico factibles. La media de los histogramas de gradiente geotérmico se aproximó considerablemente, a los valores reportados por algunos trabajos (Dai et al., 2004) para el caso del Golfo de México [ $\sim 2-3(^{\circ}\text{C}/100\text{m})$ ].

Por el contrario si carecemos de datos de la composición de los hidratos, los papeles se invierten. El conjunto de valores del gradiente geotérmico se convierten en una pieza clave para calcular un conjunto de curvas de equilibrio posibles. El rango de los gradientes puede ser restringido junto (y como consecuencia, los parámetros de las curvas de equilibrio), basándose en los valores reportados en la literatura.

Existen además otros medios para la restricción de los rangos de los valores de entrada y salida del modelo. Cada histograma expresa la frecuencia de ocurrencia de valores solución que cumplen las condiciones del modelo para un número finito de ensayos. Por esta razón, aunque los ensayos de Monte Carlo son aleatorios

(teóricamente), el espacio de valores solución posible para cada variable, tiene una tendencia central que puede ser aprovechada para restringir su rango.

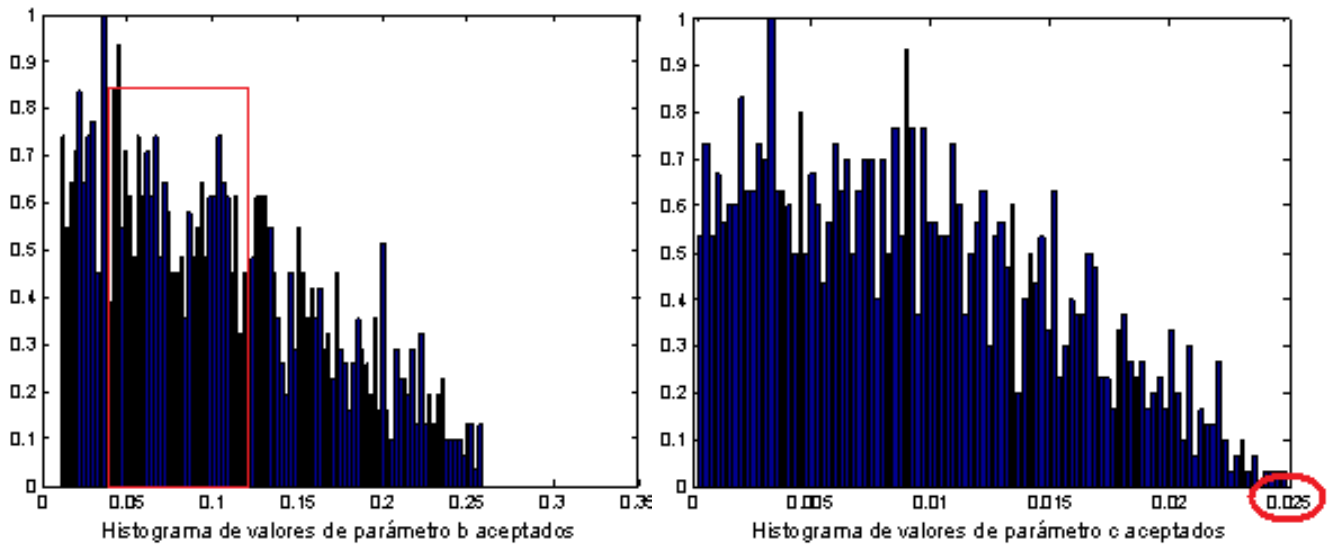
Para muestra, en la figura 41, presento el histograma de la fracción de metano para el objetivo A, después de restringir los rangos de valores de entrada para  $b$  -de acuerdo al histograma de frecuencias elaborado en MATLAB.



**Figura 46. Histograma de frecuencias de valores de fracción de metano para el objetivo A, con un rango modificado para  $b$ . El nuevo rango  $b=(0.05,0.12; \mu=0.085)$ , fue elegido seleccionando los dos intervalos de valores modales que se presentan en el histograma de frecuencias del parámetro  $b$ . Comparando con la simulación con el rango convencional de  $b$ , existe un aumento de 1 a 4%, en la media de la fracción de metano estimada, que no aparece marcada pues su valor es de aproximadamente 103% de metano. Aunque el valor es totalmente erróneo, la validez de la gráfica radica en que el cambio de la media fue mínimo respecto del valor estimado con el rango inicial de  $b$ .**

Aunque la fracción de metano difiere de la calculada con los rangos iniciales de  $b$ , está dentro del rango de valores aceptables. Por esta razón comprobé que es posible modificar el rango de los valores de entrada basándose en sus histogramas. Pese a que durante los cálculos en los objetivos A y B, los rangos de variación de

$b$  y  $c$  son arbitrarios -y pueden ser tan grandes como el usuario quiera-, existe una tendencia dictada por las ecuaciones que constituyen el modelo que limitan el rango a un intervalo de valores posibles –figuras 42a y b.



**Figura 42a. Izquierda.** Dos intervalos modales (valores encerrados en el rectángulo rojo) del parámetro  $b$  para el objetivo A fueron utilizados para poder modificar el rango de valores de entrada por las simulaciones en Crystal Ball. **Figura 42b. Derecha.** El óvalo rojo en la esquina inferior derecha del histograma de valores del parámetro  $c$ , señala el valor máximo registrado como aceptable para la simulación de Monte Carlo en MATLAB. Este valor es 0.025 y es mucho menor al límite superior de los valores generados ( $c=0.1$ ).

Un modelo es por definición, un sistema, y los cambios, a cualquiera de sus partes, afectarán el resto de ellas. Dado que  $b$  y  $c$  están interconectados con el resto de las variables a través de las ecuaciones, sus rangos son afectados a su vez por los cambios en el resto de las variables. La solución para conocer el efecto de cada cambio es realizar un análisis de sensibilidad.

En el caso de los objetivos A y B, al generar las gráficas de dispersión de valores de gradiente geotérmico, los rangos de muestreo que propuse para  $b$  y  $c$  fueron  $b = (0.01, 0.25)$  y  $c = (0.0001, 0.1)$ . No obstante, los valores de entrada aceptados para  $c$  durante la simulación en MATLAB®, fueron  $c = (0.0001, 0.025)$  para el objetivo A y  $c = (0.0001, 0.04)$  en el caso de B. Los rangos de valores aceptados para  $b$  y  $c$  en la rutina elaborada en *Crystal Ball*® no son presentados ni discutidos puesto que el programa no los presenta.

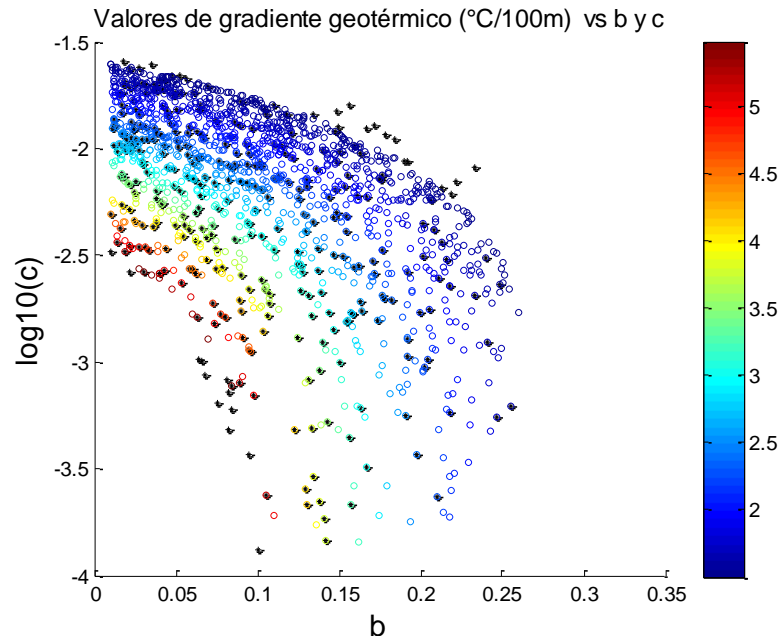
### IV.3.- Sensibilidad del modelo a la profundidad

La sensibilidad de los valores de concentración de metano a la profundidad, en la rutina elaborada en MATLAB® y en la hecha en *Crystal Ball*® es distinta. Sin embargo, en ambos existe una tendencia al aumento en las fracciones de metano respecto de la profundidad, en concordancia con los fundamentos teóricos que dan soporte al modelo.

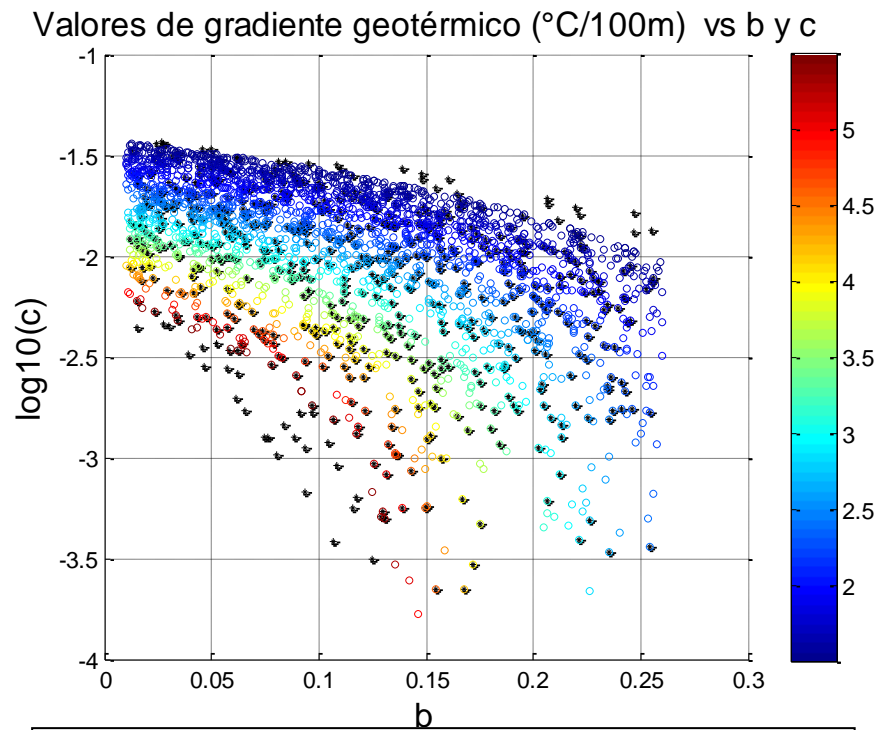
En las figuras 43 y 44, presento las gráficas de dispersión del gradiente geotérmico, junto con puntos negros que representan la región de la gráfica donde es posible encontrar una mezcla de etano y metano como huéspedes. Dichos puntos, indican los rangos de valores de gradiente geotérmico (de acuerdo a la paleta de colores en la gráfica) y de los parámetros  $b$  y  $c$ , donde es posible la existencia de metano y etano en una concentración que va desde 0% de metano hasta 100%. Sin embargo, **esta gráfica no describe la relación funcional de la fracción de metano con el gradiente geotérmico y los valores de  $b$  y  $c$ , puesto que no presenta los valores de concentración de los gases en cada punto.**

En las figuras 45a y 45b presento dos gráficas más de dispersión de valores de gradiente geotérmico para A y B. A diferencia de todas las gráficas de dispersión anteriores, donde la fracción de metano se mantuvo fija en 90%, para estas gráficas tanto los valores de  $b$  y  $c$  como los del gradiente geotérmico varían aleatoriamente, permitiendo realizar gráficas que corresponden a cualquier fracción de metano.

Las tendencias de distribución de los valores de gradiente geotérmico en función de  $b$  y  $c$  para concentraciones de metano variables, fueron semejantes a las de las gráficas de la mezcla 90% metano-10% etano. Nuevamente, la dispersión de los valores de gradiente en la gráfica del objetivo A, es mayor que en la del objetivo B.



**Figura 43.** Gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra *b* y *c* para el objetivo A. Superpuestos aparecen en dispersión puntos de ocurrencia de la mezcla de metano y etano como huésped (puntos negros).



**Figura 44.** Gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico y ocurrencia de mezcla metano- etano, contra *b* y *c* para el objetivo B.



Valores de gradiente geotérmico vs b y c (°C/100m)

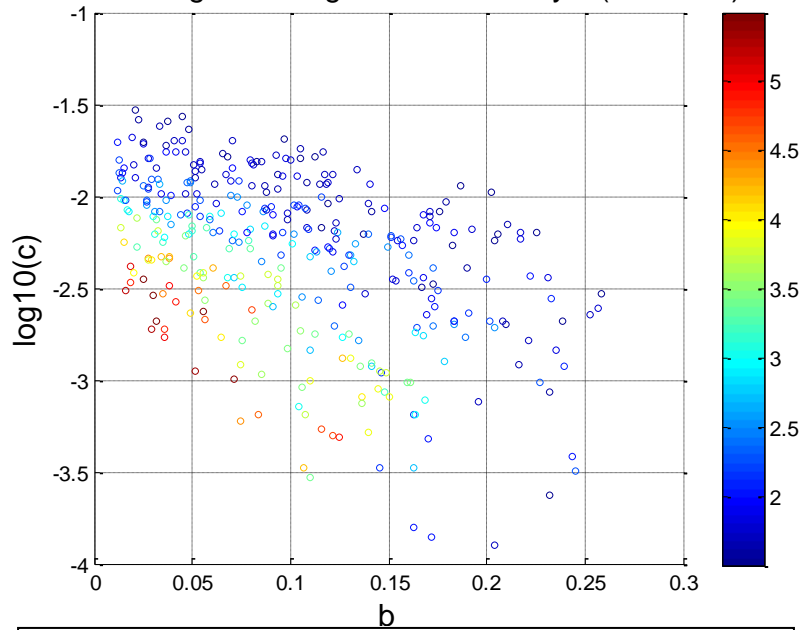


Figura 45a. Gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra b y c, para el objetivo A.

Valores de gradiente geotérmico vs b y c (°C/100m)

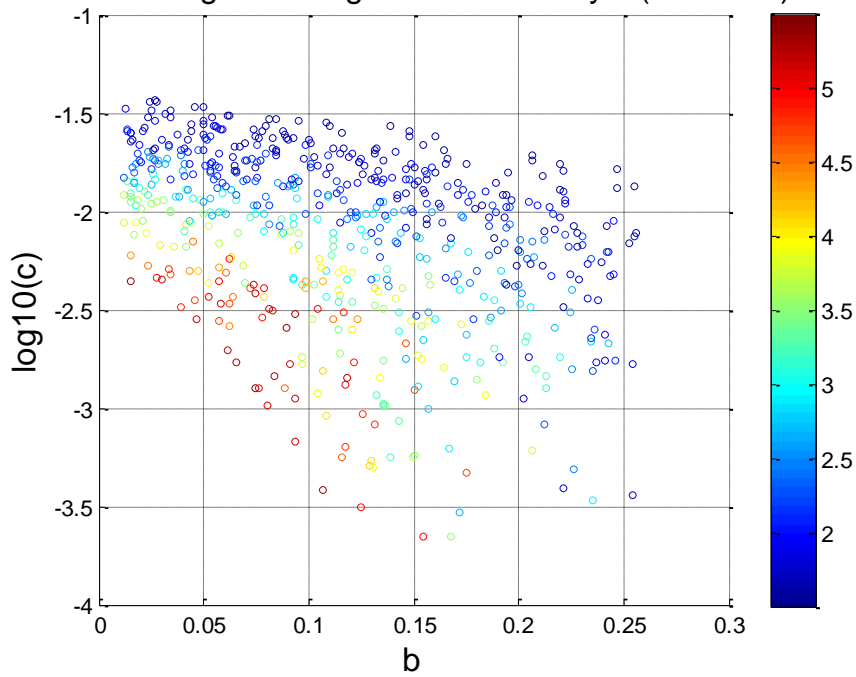
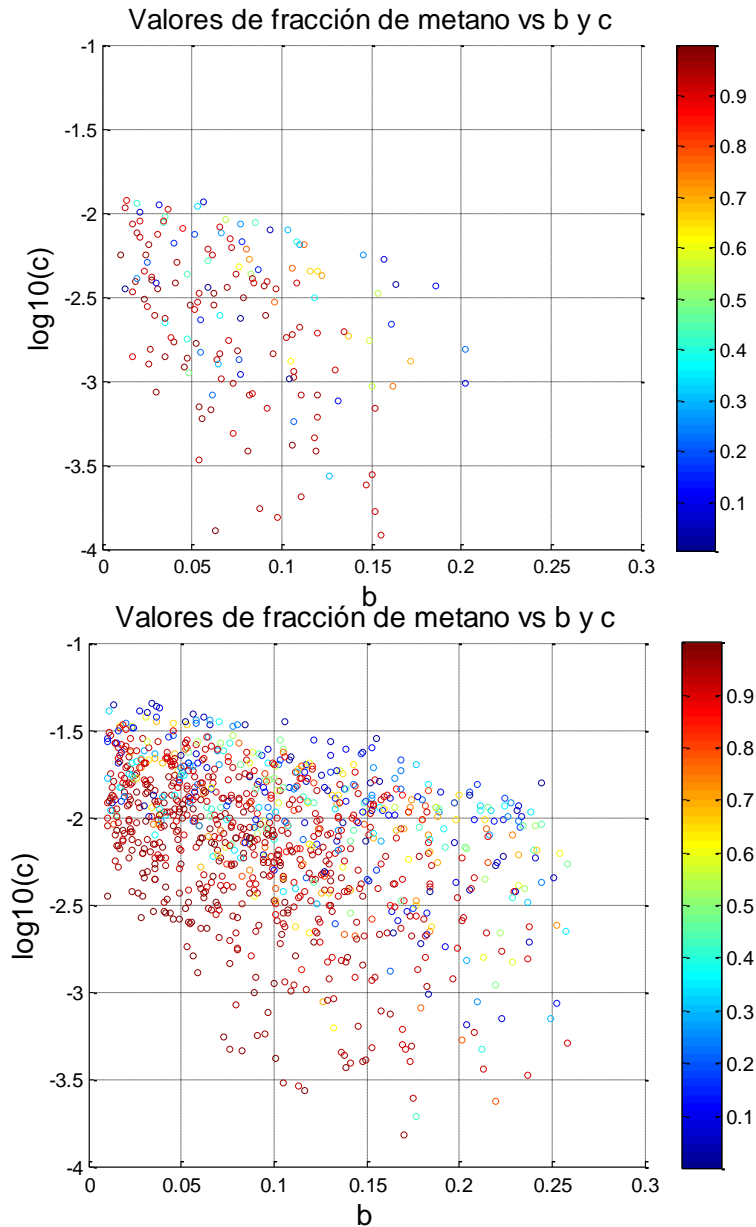


Figura 45b. Gráfica de dispersión de valores de gradiente geotérmico contra b y c, para el objetivo B. Ambas gráficas representan ternas de valores, gradiente geotérmico, parámetro b y c, aceptados durante la simulación, para cualquier mezcla posible de metano y etano.



**Figura 46.** Arriba. Gráfica de dispersión de valores de la fracción de metano en función de  $b$  y  $c$ . El espesor hipotético de la acumulación en este ejemplo fue de 100 metros. **Figura 47.** Abajo. Gráfica de dispersión de valores de la fracción de metano en función de  $b$  y  $c$ , ahora con espesor hipotético de 500 metros. El espesor reducido en la figura 46, implica menores temperaturas a profundidad de BSR, y el número de soluciones posibles es grande. Existe además una ligera dependencia de la fracción de metano en los valores de  $b$  y  $c$ . Este comportamiento da lugar a artefactos numéricos indeseables e independientes de las observaciones. Cuando el espesor aumenta a 500 metros los valores elevados de temperatura a profundidad del BSR -dado el gran espesor-, limitan grandemente el número de ensayos exitosos. El valor modal de la fracción de metano aparenta ser inversamente proporcional al espesor.

Para poder estimar la dependencia de la fracción de metano en  $b$  y  $c$ , en las gráficas de las figuras 46 y 47 presento gráficas de dispersión de valores de fracción de metano en función de  $b$  y  $c$ , suponiendo constante el gradiente geotérmico. Ambas gráficas se produjeron con los mismos valores de entrada que en el ejemplo 1, excepto por el espesor de la acumulación de hidratos. Los espesores de la acumulación de hidratos en las figuras 46 y 47 fueron de 100 y 500 metros respectivamente.

Mientras más delgada es la zona de acumulación de hidratos de gas, parece presentarse y acentuarse una dependencia sutil de la fracción de metano estimada en los parámetros  $b$  y  $c$ . Comparando las figuras 46 y 47, se observa que el valor de la fracción de metano tiende a ser inversamente proporcional a los valores de  $b$  y  $c$ . La dispersión aumenta considerablemente en los valores de fracción de metano, a medida que el espesor y el número de valores posibles de  $b$  y  $c$ , disminuyen. Conforme se incrementa el espesor aumenta la temperatura media a profundidad del BSR, reduciendo el número de valores posibles de concentración de metano que permiten la formación y estabilidad termodinámica de una fase de hidratos.

La fracción de metano tiene una relación incipiente con los valores de los parámetros de la ecuación de equilibrio, por lo cual los resultados parecen corresponder a las inferencias y observaciones sobre los objetivos y no a efectos numéricos producto de los valores asignados a las variables de entrada.

De acuerdo a los resultados de concentración de metano para los objetivos seleccionados en la sección sísmica - ver tabla 4-, se observa que la fracción de metano es inversamente proporcional al espesor de la acumulación y directamente proporcional a la profundidad.

De acuerdo al modelo, para una misma presión, una mayor concentración de metano produce que la temperatura a la que se disocian los hidratos sea menor. El gradiente geotérmico en condiciones normales y a escalas locales, es una función creciente de la profundidad. Como resultado, a mayores fracciones de metano en la mezcla de gases huésped, la profundidad a la cual los hidratos se disocian es menor y por tanto, el espesor es menor. De manera semejante, la presión hidrostática (y por tanto la profundidad) en el ambiente de

acumulación deberá ser mayor para permitir mayores concentraciones de metano. Por tanto, las tendencias de comportamiento de la fracción de metano que he descrito en este apartado son congruentes con las premisas de operación del modelo.

## V.- Conclusiones

La exploración de hidratos de gas es un gran campo de oportunidad para las ciencias de la tierra, la industria, y en general para la humanidad, por representar una alternativa ante la creciente escasez de otras fuentes de energía viables y por su impacto en la explotación de hidrocarburos convencionales. México cuenta con numerosas acumulaciones marinas de hidratos de gas (Makogon et al., 2007).

Las alternativas para el estudio de las acumulaciones de hidratos de gas van desde la simulación computacional -con un mínimo de observaciones *in situ*- hasta campañas de exploración que incluyen la recuperación de núcleos presurizados y los registros geofísicos de pozos.

En México existe un grave desconocimiento de la extensión, volumetría y características particulares de las acumulaciones de hidratos de gas en aguas territoriales. Los estudios más frecuentes y de mayor cobertura corresponden a campañas de exploración con sismología de reflexión.

La disposición limitada de recursos e información obliga al desarrollo de técnicas para la investigación de acumulaciones de hidratos, que maximicen la utilidad y valor agregado de cualquier recurso disponible - como son los datos de sismología de reflexión-, proveyendo la mayor cantidad de observaciones útiles a un costo mínimo.

Los modelos de simulación y análisis de acumulaciones de hidratos, como el que es presentado y explicado en este trabajo, permiten extraer gran cantidad de información de una sección sísmica en profundidad donde es identificable una acumulación de hidratos de gas y un reflector simulador de fondo (BSR).

Mediante el modelo de estimación de la composición de hidratos de gas con sismología de exploración, pude estimar la concentración de metano y la densidad energética de una acumulación de hidratos con un número limitado de herramientas, como una computadora personal y paquetería básica para la simulación numérica de ecuaciones sencillas. Los resultados que obtuve en el presente trabajo concuerdan con los fundamentos teóricos en los que se basa el modelo (Lerche y Noeth, 2003).

La poca dependencia de las ecuaciones del modelo respecto de las condiciones geológicas de una acumulación de hidratos específica, provee de la flexibilidad requerida para aplicarlo en diversos sitios de interés.

La relativa semejanza de los resultados que obtuve en *Crystal Ball*, para los dos ejemplos hipotéticos con respecto a los que presenta Lerche y Noeth (2003), proporciona sustento a los resultados de estimación de fracciones de metano y densidad energética en los seis objetivos reales.

Dada la gran profundidad de los seis objetivos identificados en la sección sísmica, las fracciones de metano estimadas superan el 90% de concentración. Las densidades volumétricas de energía, a su vez, son cercanas al 10% de un volumen equivalente de gas natural licuado.

Los valores medios de gradiente geotérmico estimados mediante la rutina en MATLAB, son semejantes a valores propuestos para el Golfo de México (Dai et al., 2004), por lo cual es posible pensar que la aplicación del modelo para analizar acumulaciones de hidratos que se encuentren en esta área podría ser de utilidad. De acuerdo a las gráficas de dispersión del gradiente geotérmico, este parámetro presenta una relación con los valores de  $b$  y  $c$ , que se modifica la profundidad de los objetivos analizados.

## Apéndices

- i Rutina de MATLAB
  - ii Pantalla de Valores de entrada para el ejemplo 1 en la rutina de MATLAB
  - iii Hoja de cálculo de Crystal Ball para el ejemplo 1
  - iv Cuadros estadísticos de objetivos A yB
- 

### I Rutina de Cómputo en MATLAB

---

```
clc
close all
clear all
display(';;; TODAS LAS UNIDADES DE LAS CANTIDADES ALIMENTADAS DEBERÁN SER EXPRESADAS
EN UNIDADES DEL SISTEMA INTERNACIONAL!!!');
% ;;;TODAS LAS UNIDADES EN EL PROGRAMA, SALVO EXCEPCIÓN EXPLÍCITA, ESTÁN
% EXPRESADAS EN EL SISTEMA INTERNACIONAL!!!
%Bloque de datos de entrada de modelo
%H=input('Proporciona el espesor de la zona de estabilidad en metros: ');
Tb=input('Proporcione la temperatura del fondo marino en °C: ');
hw=input('Proporcione la profundidad desde el fondo marino en metros: ');
z1=input('Proporcione la profundidad desde el fondo marino a la superficie superior
de la zona de estabilidad en metros: ');
z2=input('Proporcione la profundidad al BSR desde el fondo marino en metros: ');
rhoW=input('Proporcione la densidad del agua: ');
rho1=input('Proporcione la densidad del sedimento sobre la zona de estabilidad:
');
rho2=input('Proporcione la densidad del medio dentro de la zona de estabilidad:
');
f1=input('Proporcione la fracción de metano esperada en la mezcla (valor de 0 a 1):
');
f2=1-f1;
P01=input('Proporcione la presión crítica del metano: ');
P02=input('Proporcione la presión crítica del gas 2: ');
Pmix=input('Proporcione la presión crítica de mezcla: ');

%Bloque de declaración de criterios de simulación
n=input('Proporcione el número de iteraciones que desea: ');
ranb1=input('valor mínimo de b: ');
ranb2=input('valor máximo de b: ');
ranc1=input('valor mínimo de c: ');
ranc2=input('valor máximo de c: ');
g1=input('valor mínimo de gradiente geotérmico (°C/100m): ');
g2=input('valor máximo de gradiente geotérmico (°C/100m): ');
```

```

%Bloque de cálculo de variables escalares
g=9.81;%(m/s^2)
P1=g*(hw*rhow+z1*rho1+z2*rho2);
P2=g*(hw*rhow+z1*rho1+z2*rho2);
P2ln=log(P2);
H=z2-z1;
%Pmix=1/((f1/P01)+(f2/P02));
Pmixln=log(Pmix);

%Bloque de Monte Carlo
Y=rand(3,n);
randn('state',0);
G=(g2-g1).*rand(1,n)+g1;
b=ranb2*Y(2,:)+ranb1;
c=ranc2*Y(3,:)+ranc1;
pt=zeros(1,n);
T2a=zeros(1,n);
T2=zeros(1,n);
G2=zeros(1,n);
Po=zeros(1,n);
fmix=zeros(1,n);
out=zeros(5,n);
gn=zeros(1,100);
bn=zeros(1,100);
cn=zeros(1,100);
fmy=zeros(1,100);
Pn=zeros(1,100);
v=[.1,.3,.5,.7,.9];
q=1;
%Bloque de modelo
for i = 1:n
    if ((b(i))^2 >= 4*(log(Pmix/P2).*c(i)))
        pt(i)=sqrt((b(i))^2-4.*(log(Pmix/P2).*c(i)));
        T2a(i)=(-b(i)+pt(i))/(2*c(i));
        G2(i)=(T2a(i)-Tb)*100./z2;
        T2(i)=z2.*(G(i)./100)+Tb;
        Po(i)=P2.*exp(-(b(i).*T2(i))-(c(i).(T2(i))^2));

        if (G2(i) >= g1) && (G2(i) <= g2)
            out(1,i)=G2(i);
            out(2,i)=b(i);
            out(3,i)=c(i);
        end
        if (Po(i) >= Pmix) && (Po(i) <= P01)
            out(4,i)=Po(i);
            out(5,i)=1.+f2.*(Po(i)-P01)/(P01-Pmix);
            b1(q)=b(i);
            c1(q)=c(i);
            gt1(q)=G(i);
            q=q+1;
        elseif (Po(i) >= P02) && (Po(i) < Pmix)
            out(5,i)=f1.*(Po(i)-P02)/(Pmix-P02);
            b1(q)=b(i);
            c1(q)=c(i);
        end
    end
end

```



```

        gt1(q)=G(i);
        q=q+1;

    end

else
    G2(i)=0;

end

end

gt=find (out(1,:) > g1);
for l=1:length(gt)
    gg(l)=out(1,gt(l));
end
bt=find (out(2,:) > ranb1);
for k=1:length(bt)
    bb(k)=out(2,bt(k));
end
ct=find (out(3,:) > ranc1);
for h=1:length(ct)
    cc(h)=out(3,ct(h));
end
pf=find (out(4,:) > 0);
for r=1:length(pf)
    pp(r)=out(4,pf(r));
end
ft=find (out(5,:) > 0);
for m=1:length(ft)
    fm(m)=out(5,ft(m));
end

%Bloque de histogramas
for j=1:100
    gn(j)=min(gg)+(j/100).* (max(gg)-min(gg));
    bn(j)=ranb1+(j/100).* (max(bb)-min(bb));
    cn(j)=ranc1+(j/100).* (max(cc)-min(cc));
    Pn(j)=min(pp)+(j/100).* (max(pp)-min(pp));
    fmy(j)=(j/100).* (max(fm)-min(fm));
end
prob1=hist(gg(:),100)/length(gg);
prob2=hist(bb(:),100)/length(bb);
prob3=hist(cc(:),100)/length(cc);
prob4=hist(pp(:),100)/length(pp);
prob5=hist(fm,100)/length(fm);

[X,Y] = meshgrid(min(b1):(max(b1)-min(b1))/(100):max(b1),min(c1):(max(c1)-
min(c1))/(100):max(c1));
Z = 1.+f2.* ((P2.*exp(-X.*T2(i))-(Y.*(T2(i))^2))-P01)/(P01-Pmix);
Z1=f1.* ((P2.*exp(-X.*T2(i))-(Y.*(T2(i))^2))-P02)/(Pmix-P02);
%Bloque de Graficación
figure

```

```

axis([g1 g2 0 max(probl)])
bar(gn,probl/max(probl))
legend('Probabilidad normalizada de gradientes calculados')
xlabel('\fontsize{12}Distribución de probabilidad de gradientes
geotérmicos (°C/100m)')
figure
axis([ranb1 ranb2 0 1])
bar(bn,prob2/max(prob2))
legend('Frecuencia normalizada de b')
xlabel('\fontsize{12}Histograma de valores de parámetro b aceptados')
figure
axis([ranc1 ranc2 0 1])
bar(cn,prob3/max(prob3))
legend('Frecuencia normalizada de c')
xlabel('\fontsize{12}Histograma de valores de parámetro c aceptados')
figure
bar(Pn/101100,prob4/max(prob4))
legend('Presión de escalamiento (Po)')
xlabel('\fontsize{14}Atmósferas')
figure
bar(fmy,prob5/max(prob5)),title('\fontsize{14}Fracción de metano')
legend('Fracción de metano (fm)')
xlabel('\fontsize{12} Fracción de metano')
figure
scatter(b1,log10(c1),10,fm,'*k');
hold on
scatter(bb,log10(cc),3,gg,'o'),title('\fontsize{12}Valores de gradiente geotérmico
(°C/100m) vs b y c')
colorbar;
xlabel('\fontsize{14}b')
ylabel('\fontsize{14}log10(c)')
hold off
figure
scatter(b1,log10(c1),3,gt1,'o');
title('\fontsize{12}Valores de gradiente geotérmico y fracción de metano vs b y c');
colorbar;
xlabel('\fontsize{14}b'),ylabel('\fontsize{14}log10(c)');
figure
scatter(bb,log10(cc),3,gg,'o');
colorbar;
title('\fontsize{14}Valores de gradiente geotérmico (°C/100m) vs b y c');
xlabel('\fontsize{14}b'),ylabel('\fontsize{14}log10(c)');

```

## II Pantalla de Valores de entrada para el ejemplo 1 en la rutina de MATLAB

---

Temperatura del fondo marino en °C: 4

Profundidad desde el fondo marino en metros: 250

Profundidad desde el fondo marino a la superficie superior de la zona de estabilidad en metros: 100

Profundidad al BSR desde el fondo marino en metros: 350

Densidad del agua: 1030

Densidad del sedimento sobre la zona de estabilidad: 1750  
Densidad del medio dentro de la zona de estabilidad: 1500  
Fracción de metano esperada en la mezcla (valor de 0 a 1): 0.9  
Presión crítica del metano: 2806020  
Presión crítica del gas 2: 558920  
Presión crítica de mezcla: 1020100  
Número de iteraciones que desea: 10000  
Valor mínimo de b: .01  
Valor máximo de b: .25  
Valor mínimo de c: .0001  
Valor máximo de c: .1  
Valor mínimo de gradiente geotérmico ( $^{\circ}\text{C}/100\text{m}$ ): 1.5  
Valor máximo de gradiente geotérmico ( $^{\circ}\text{C}/100\text{m}$ ): 5.5

### III Hoja de cálculo de Crystal Ball para el ejemplo 1

En el código en realidad ambos módulos operan en la misma hoja y al mismo tiempo pero por cuestiones de estructura la densidad de energía y la fracción de metano aparecen en apartados separados.

#### a) Módulo de estimación de cálculo de fracción de metano.

Datos de entrada		
Profundidad del agua (m)		250
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
Densidad del agua (adimensional)		1.03000
Densidad promedio de sedimentos sobre hidratos (adimensional)		1.75000
Densidad promedio de sedimentos en hidratos (adimensional)		1.50000
Procedimiento de cálculo		
Constantes de escalamiento en ecuación de curva de estabilidad		
$\ln P - \ln P_0 = bT + cT^2$		
	b=	0.12500
	c=	0.00015
Gravedad (m/s <sup>2</sup> )	g=	9.81000
Presión en superficie superior de hidratos (P1) [Pa]		4242825.00000
Presión en la base de hidratos (P2) [Pa]		7921575.00000
Gradiente geotérmico (1ra estimación) [°C/100m]	G=	3.00000
Gradiente geotérmico (2da estimación) [°C/100m]		1.61492
Gradiente geotérmico (3ra estimación) [°C/100m]		1.56707
Temperatura en superficie superior (°C)		7.00000
Temperatura en base de hidratos (°C)		14.50000
Presión de escalamiento (P0) [Atm]		12.40609
Determinación de Composición		
P(metano @ 0°C) [KPa]		26.20000
P(etano @ 0°C) [KPa]		5.20000
P(90%met,10%et @ 0°C) [KPa]		10.10000
fraccion de metano inicial f0		0.90000
Fracción estimada de metano		
f1		0.91432

### III Hoja de cálculo de Crystal Ball para el ejemplo 1

#### b) Cálculo de densidad de energía de hidrato de metano

Porosidad		0.50000
Saturación		0.50000
Densidad de energía de metano		0.09600
Relación de poder calorífico etano/metano		0.88800
Densidad de energía de etano		0.01902
Densidad total de energía		0.11502

#### Cuadro estadístico de objetivo A

Punto A	Punto A	Punto A	Punto A	Punto A	Punto A
<b>Estimación: Fracción de metano</b>			<b>Estimación: Densidad de energía de hidrato de metano (Qmet/QLNG)</b>		
Estadístico	Aproximación de Dist.: Gamma	Valores Estimados	Estadístico	Aproximación de Dist.: Gamma	Valores Estimados
Ensayos	'---	5,000	Ensayos	'---	5,000
Media	0.99823	0.99823	Media	0.10481	0.10481
Mediana	0.98004	0.97947	Mediana	0.1029	0.10284
Moda	0.9422	'---	Moda	0.09893	'---
Desviación Estándar	0.09049	0.08966	Desviación Estándar	0.0095	0.00941
Varianza	0.00819	0.00804	Varianza	0.00009	0.00009
Asimetría	1.24	1.05	Asimetría	1.24	1.05
Curtosis	5.3	4.04	Curtosis	5.3	4.04
Coef. de Variación	0.0907	0.0898	Coef. de Variación	0.0907	0.0898
Mínimo	0.8521	0.85421	Mínimo	0.08947	0.08969
Máximo	Infinito	1.41195	Máximo	Infinito	0.14826
Error Estándar Medio	'---	0.00127	Error Estándar Medio	'---	0.00013

**Cuadro estadístico de objetivo B**

<b>Punto B</b>	<b>Punto B</b>	<b>Punto B</b>	<b>Punto B</b>	<b>Punto B</b>	<b>Punto B</b>
Estimación: Fracción de metano			Estimación: Densidad de energía de hidrato de metano (Qmet/QLNG)		
Estadístico	Aproximación de Dist.: Gamma	Valores Estimados	Estadístico	Aproximación de Dist.:Gamma	Valores Estimados
Ensayos	'---	5,000	Ensayos	'---	5,000
Media	1.09938	1.09938	Media	0.11544	0.11544
Mediana	1.08194	1.08319	Mediana	0.1136	0.11374
Moda	1.04633	'---	Moda	0.10986	'---
Desviación Estándar	0.11389	0.11153	Desviación Estándar	0.01196	0.01171
Varianza	0.01297	0.01244	Varianza	0.00014	0.00014
Asimetría	0.9317	0.6325	Asimetría	0.9317	0.6325
Curtosis	4.3	2.96	Curtosis	4.3	2.96
Coef. de Variación	0.1036	0.1014	Coef. de Variación	0.1036	0.1014
Mínimo	0.85491	0.88084	Mínimo	0.08977	0.09249
Máximo	Infinito	1.55852	Máximo	Infinito	0.16364
Error Estándar Medio	'---	0.00158		'---	0.00017

## Referencias

1. Bhatnagar, G., Chapman, W. G., Dickens G. R., Dugan B., y Hirasaki, G. J., 2007, Generalization of Gas Hydrate Distribution and Saturation in Marine Sediments by Scaling of Thermodynamic and Transport Processes: American Journal of Science, **307**, 861-900
2. Carcione, J. M., y Gei, D., 2004, Gas-hydrate concentration estimated from P- and S-wave velocities at the Mallik 2L-38 research well, Mackenzie Delta, Canada: Journal of Applied Geophysics, **56**, 73-78.
3. Chand, S., 2008, Gas Hydrate Anomalies in Seismic Velocities, Amplitudes and Attenuation: What do they imply?: Proceedings of the 6th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2008). <https://circle.ubc.ca/bitstream/2429/1393/1/5346.pdf>. Consultado en Noviembre de 2008
4. Collett, T. S., Lewis, R., y Uchida, T. 2000, Growing Interest in Gas Hydrates: Oilfield Review, **2**, 43-57.
5. Dai, J., Xu, H., Snyder, F., y Dutta, N., 2004, Detection and estimation of gas hydrates using rock physics and seismic inversion: Examples from the northern deepwater Gulf of Mexico: The Leading Edge, **23**, 60- 66.
6. Englezos, P., 1993, Clathrate Hydrates: Industrial & Engineering Chemistry Research, **32**, 1251-1274.
7. Hardage, B. A., Murray, P., Sava, D., Backus, M. M., Remington, R., y Graebner, R., 2006, Evaluation of deepwater gas-hydrate systems: The Leading Edge, **25**, 572- 576.
8. Hardage, B. A., y Roberts, H. H., 2006, Gas hydrate in the Gulf of Mexico: What and where is the seismic target?: The Leading Edge, **25**, 566-571.
9. Hardage, B., 2007, Energy Density of Deepwater Gas Hydrate: DOE, NETL, Search and Discovery Article, **40241**. [http://www.searchanddiscovery.net/documents/2007/07039gc0507\\_hardage/images/hardage\\_0507.pdf](http://www.searchanddiscovery.net/documents/2007/07039gc0507_hardage/images/hardage_0507.pdf). Consultado en Marzo de 2009.
10. Hogg, R. V., y Craig, A. T., 1978, Introduction to Mathematical Statistics, 4a edición: Collier Macmillan International Editions, 176-177.
11. Kusalik, P. G., y Vatamanu, J. A., 2008, Microscopic View of the Crystal Growth of Gas Hydrates: Proceedings of the 6th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2008), 1-7. <https://circle.ubc.ca/bitstream/2429/1164/1/5716.pdf>. Consultado en Julio 2009.
12. Lee, M.W., 2007, Velocities and Attenuations of Gas Hydrate-Bearing Sediments: USGS, Scientific Investigations Report, **5264**. [http://pubs.usgs.gov/sir/2007/5264/pdf/SIR07-5264\\_508.pdf](http://pubs.usgs.gov/sir/2007/5264/pdf/SIR07-5264_508.pdf). Consultado en Noviembre de 2008
13. Lerche, I., y Noeth, S., 2003, Hydrate Composition from Seismic Data – An Inverse Procedure: The Oil & Gas Review, **2**, 1-20.
14. Lu, S. y McMechan, G. A., 2002, Estimation of gas hydrate and free gas saturation, concentration, and distribution from seismic data: Geophysics, **67**, 582-593.
15. Maekawa, T., Itoh, S., Sakata, S., Igari S., y Imai, N. 1995, Pressure and temperature conditions for methane hydrate dissociation in sodium chloride solutions: Geochemical Journal, **29**, 325-329.

16. Mahajan, D., Taylor, C. E., y Mansoori, G. A., 2007, An introduction to natural gas hydrate/clathrate: The major organic carbon reserve of the Earth: *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **56**, 1-8.
17. Makogon, Y.F., Holditch, S.A., y Makogon, T.Y., 2007, Natural gas-hydrates — A potential energy source for the 21st Century: *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **56**, 14–31.
18. Reston, T. J., Bialas, J., Breitzke, M., Flüh, E., Kläschen, D., Klein, G., Talukder, A., y Zillmer, M., 2006, High resolution imaging and physical properties of hydrate and gas-bearing sediments within the INGGAS project: *Gas Hydrates in the Geosystem, Geotechnologien Science Report*, **7**, 86-96.
19. Rocha-Legorreta, F., 2009, Seismic evidence and geological distinctiveness related to gas hydrates in Mexico: *The Leading Edge*, **28**, 714-717.
20. Smelik, E. A., y King Jr. H.E., 1997, Crystal-growth studies of natural gas clathrate hydrates using a pressurized optical cell: *American Mineralogist*, **82**, 88-98.
21. Snyder, F., Dutta, N., Hutchinson, D., Hart, P., Lee, M. W. Dugan, B., Ruppel, C., Wood, W., Coffin, R., Evans, R., y Jones, E. 2004, Seismic Analysis and Characterization of Gas Hydrates in the Northern Deepwater Gulf of Mexico: DOE, NETL, Search and Discovery Article, **40137**. <http://www.searchanddiscovery.net/documents/2004/snyder/images/snyder.pdf>. Consultado en Octubre, 2008.
22. Tréhu, A. M., Ruppel, C., Holland, M., Dickens, G. R., Torres, M. E., Collett, T. S., Goldberg, D., Riedel, M., y Schultheiss, P., 2006, Gas Hydrates in Marine Sediments: Lessons from Scientific Ocean Drilling: *Oceanography*, **19**, 124-142.
23. Uchida, T., Hondoh, T., Mae, S., y Kawabata J. 1995, Physical Data of CO<sub>2</sub> Hydrate: *Direct Ocean Disposal of Carbon Dioxide*, 45-61.