

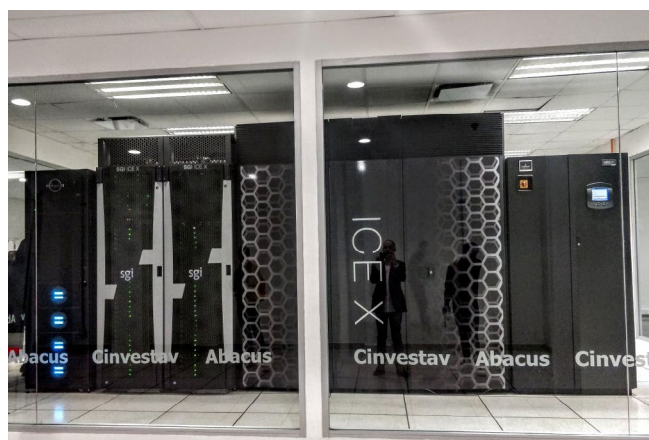
# ENERXICO: LAS TÉCNICAS DE SUPERCOMPUTACIÓN AL SERVICIO DEL SECTOR ENERGÉTICO MEXICANO

JAIME KLAPP, ENRIQUE GUZMÁN, LEONARDO SIGALOTTI, OSCAR CRUZ CASTRO, ISIDORO GITLER, JOSÉ MANUEL MARTÍNEZ MAGADAN

La aplicación de las técnicas de supercomputación de alto rendimiento (o HPC por sus siglas en inglés) en el sector energético impactan profundamente los paradigmas de diseño y operación industriales. Por este motivo los gobiernos de México y la Unión Europea (UE) dispusieron las bases para que los grupos nacionales de investigación desarrollaran dichas técnicas, en colaboración con sus contrapartes europeos. Estas bases se materializaron en 2019 a través del proyecto ENERXICO, cuyo objetivo es proveer soluciones técnica y económicamente viables para la industria relacionada con las energías renovables y convencionales (petróleo y gas). Entre otros beneficios, las nuevas capacidades de cómputo masivo permitirán mejorar los diseños, técnicas y metodologías operativas orientadas a incrementar la eficiencia de diversos procesos críticos.

Actualmente el proyecto ENERXICO reúne a quince instituciones académicas e industriales coordinadas por el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) en México, y por el Centro Nacional de Supercomputación (Barcelona Supercomputing Center, o BSC) en España. Integran el consorcio el Barcelona Supercomputing Center, la Technische Universität München, la Université Grenoble Alpes, el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnologías, la Universitat Politècnica de Valencia, Repsol, Iberdrola, Bull Atos, PEMEX, el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, la Universidad Autónoma Metropolitana, el Instituto de Ingeniería de la UNAM, el Instituto Politécnico Nacional, el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (CINVESTAV), y el Instituto Mexicano del Petróleo.

Con el objeto de satisfacer las metas propuestas, se estudian problemas relacionados con los sistemas de generación eólicos, la modelación de yacimientos, la simulación de procesos de recuperación de hidrocarburos, el desarrollo de biocombustibles, y el diseño de técnicas de combustión eficiente, entre otros. Esto implica desarrollar técnicas de simulación para sistemas con arquitecturas exaescala, capaces de realizar  $10^{18}$  operaciones de punto flotante por segundo, es decir, 1 exaflop (Fig. 1).



a)



b)

Figura 1. Supercomputadora ICE X del Centro ABACUS-CINVESTAV-IPN (a) y Marenostrom 4 del BSC (b)

En particular, los colaboradores de ENERXICO crean simuladores basados en diversas técnicas numéricas. Una de las que se desarrollan con mayor interés en México es la denominada Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (o SPH por sus siglas en inglés), que ha evolucionado a partir del código DualSPHysics (<https://dual.sphysics.org/>). El código fundamental hace uso de una serie de módulos diseñados específicamente para simular los procesos multifísicos que tienen lugar en los sistemas físicos de interés.

Un producto importante de las investigaciones llevadas a cabo es el código "Black Hole". Este código ha sido aplicado para simular flujos de hidrocarburos en yacimientos naturalmente fracturados y ha permitido evaluar, muy eficazmente,

los beneficios y riesgos potenciales asociados a la inyección de gases (como CO<sub>2</sub>, nitrógeno, metano, etc.) en los yacimientos. Los métodos implementados aprovechan la integración del análisis sísmico en dominios estratificados con geometrías de alta complejidad (Figs. 2 a y b). Además, se diseñan herramientas de inteligencia artificial (AI) con las que se realizan cálculos de procesos específicos con resultados notables (Figura 2 c).

Otras las técnicas de aprendizaje profundo (DL) y de aprendizaje automático (ML) se emplean para reducir las incertidumbres de las simulaciones numéricas, así como durante el proceso de validación con datos de campo y de laboratorio. Éstas también se utilizan para evaluar previamente los parámetros de entrada en las simulaciones, a fin de reducir los tiempos de operación de las supercomputadoras y los costos correspondientes.

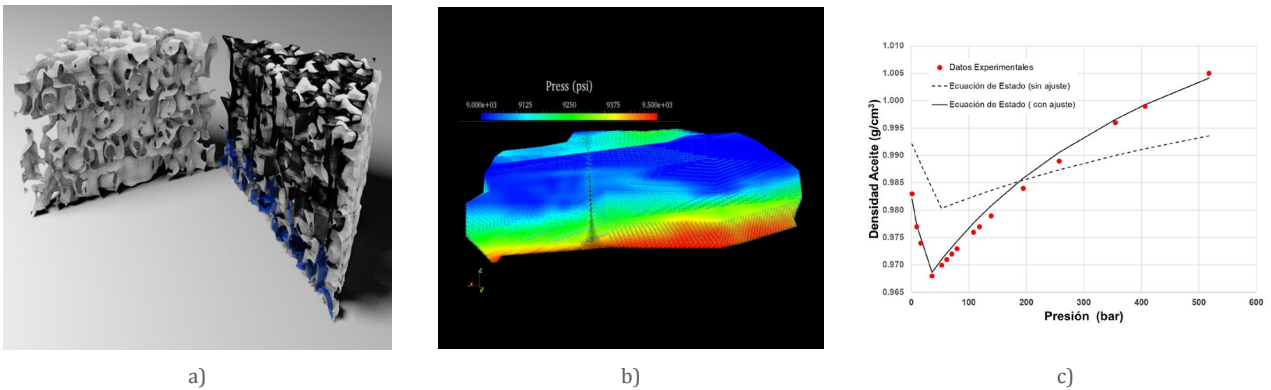


Figura 2. Simulación de un medio poroso con SPH, con propiedades calculadas con inteligencia artificial (EOS)

Por otra parte, la realización de experimentos con geometrías de calibración bien caracterizadas permite calibrar y validar los códigos con un alto grado de confiabilidad (Fig. 3).

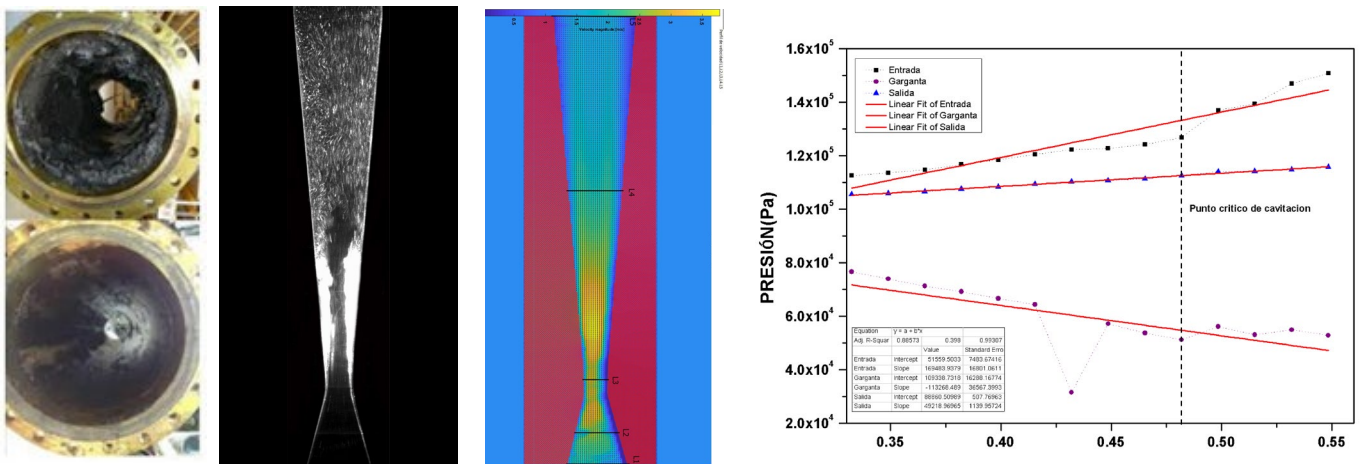


Figura 3. Proceso de obstrucción de tuberías de producción causada por crecimiento de depósitos. La secuencia de imágenes ilustra el problema observado en campo y el modelo experimental con una geometría de calibración

Las pruebas experimentales se llevan a cabo en laboratorios con condiciones estrictamente controladas. A su vez, las simulaciones (validadas) de los procesos fundamentales sirven como patrones de calibración para las simulaciones avanzadas. Entre los casos de mayor interés, están aquellos que involucran los fenómenos de transferencia de calor conjugada en sistemas de transporte. Aunque la naturaleza de los

fluidos considerados da lugar a una fenomenología compleja, los resultados preliminares son prometedores (Fig. 4).

Para el ejemplo mostrado, la correspondencia entre las mediciones experimentales y los resultados numéricos establece que el código es capaz de reproducir adecuadamente los efectos globales en los campos (Figs. 4 a y b), y los valores locales de la velocidad en los puntos de interés (Fig. 4c).

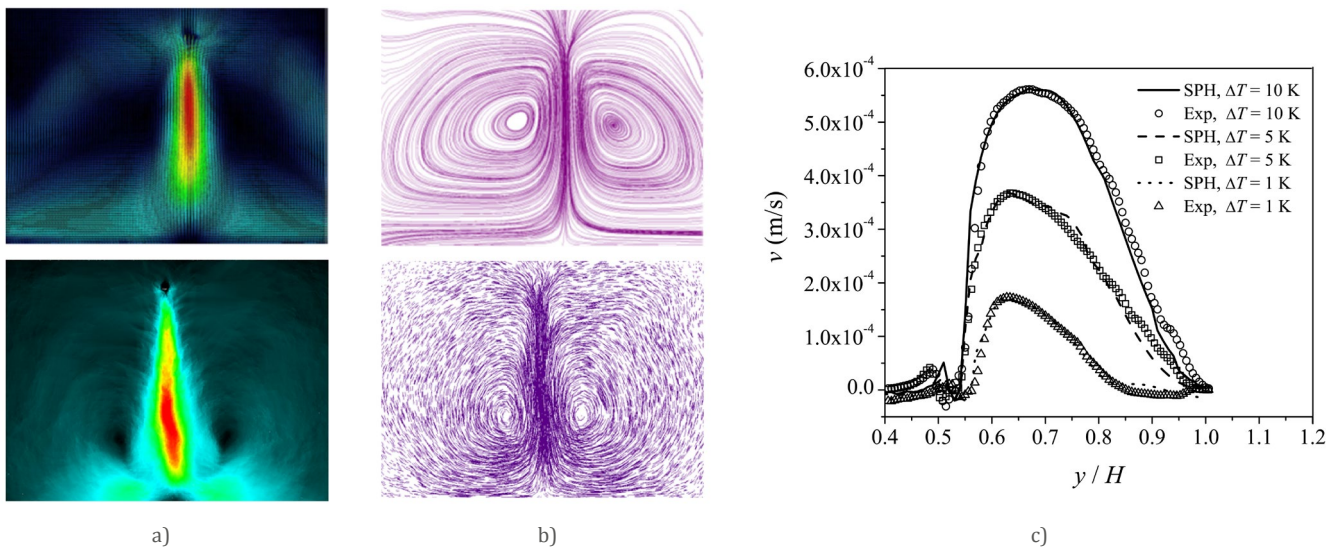


Figura 4. Proceso de transferencia de calor conjugada en un conducto con flujos de alta viscosidad expuestos a ambientes con gradientes térmicos. En las imágenes de las columnas a) y b) se ve la comparación de los gradientes térmicos y las líneas de flujo experimentales (arriba) y numéricas con SPH (abajo). Las curvas de la figura c) claramente muestran un acuerdo aceptable entre las mediciones y la predicción numérica de las velocidades en puntos relevantes del dispositivo

Mayor información del proyecto ENERXICO en:

<https://enerxico-project.eu/>

Twitter: @ENERXICOproject

LinkedIn: @ENERXICO project

Video informativo en inglés: <https://youtu.be/Yq04rJdr82Q>

Video informativo en español: <https://youtu.be/zhFKy1HcUdc>