

GUÍA PARA EL USO DEL SIMULADOR DFT SIMULATOR MODULO
DFT-UPGRADING TOOL PARA ARCHIVOS DE ENTRADA CON
FORMATO JSON

SIMULADOR DE YACIMIENTOS TOTALMENTE IMPLÍCITO

PROYECTO

“PROGRAMA NACIONAL DE DESARROLLO PARA LA
OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS DE RECOBRO MEJORADO
TÉRMICO
CON INYECCIÓN DE VAPOR MEDIANTE EL USO DE
NANOFLUIDOS”.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN

Grupo de Investigación en Dinámicas de Flujo y Transporte
(DFTmp)

Medellín 13 de septiembre de 2019



Tabla de Contenido

1. Introducción.....	3
2. Descripción general	3
2.1. Descripción técnica	3
2.2. Funciones	4
2.3. Ventajas.....	4
2.4. Impacto o solución	5
3. Estructura general del archivo JSON.....	5
4. Descripción específica de cada sección.....	6
4.1. Configuración inicial, "initialset"	8
4.2. Configuración del yacimiento, "reservoir"	11
4.3. Modelo PVT, "pvtmodel"	20
4.4. Información de interacción roca-fluido, "rockfluid"	26
4.5. Sección térmica	28
4.6. Condiciones iniciales, "initcond"	30
4.6.1. Condiciones Iniciales para el modelo composicional	30
4.7. Control numérico, "numcont"	35
4.8. Información de los pozos, "wellcons"	38
4.9. Propiedades relacionadas a componentes adicionales, "species"	42
4.9.1. Subsección configuración "config"	43
4.9.2. Subsección propiedades "properties"	45
4.9.3. Subsección parámetros de salida "output"	46
4.9.4. Subsección transferencia "transfer"	47
4.9.5. Subsección modificadores "modifiers"	50
4.9.6. Subsección control numérico "numcont"	54
4.9.7. Subsección "wellcons"	55

1. Introducción

DFT-UPGRADING TOOL es un módulo implementado en la herramienta de simulación de yacimientos **DFTmp SIMULATOR**, creada por el grupo de investigación en Dinámicas de Flujo y Transporte en medios porosos de la Universidad Nacional de Colombia. Este módulo tiene la capacidad de predecir el comportamiento de yacimientos de hidrocarburos cuando se realizan inyecciones de nanocatalizadores en procesos térmicos con vapor.

El formato de texto JSON (JavaScript Object Notation) es un formato de texto ligero que sigue la notación literal de objetos de JavaScript. Debido a su versatilidad y estructura es de gran utilidad para el ingreso de datos al **DFTmp SIMULATOR**. El objetivo de este manual es capacitar al usuario en el uso de dicho formato haciendo especial énfasis en el módulo **DFT-UPGRADING TOOL**.

2. Descripción general

Teniendo en cuenta todas las funciones y capacidades disponibles en DFTmp SIMULATOR, es posible incorporar al transporte de componentes hidrocarburos y especies químicas, la fenomenología asociada al flujo másico y las dinámicas de transferencia que surgen de la interacción de fases y componentes en medios porosos.

2.1. Descripción técnica

DFT-UPGRADING TOOL es un módulo de simulación implementado en la herramienta de simulación de yacimientos del grupo en Dinámicas de Flujo y Transporte en medios porosos de la Universidad Nacional de Colombia (DFTmp SIMULATOR). Este simulador involucra cambios composicionales, de presión y temperatura, y cuantifica los impactos que éstos tienen sobre las variables de flujo que repercuten en la producción de hidrocarburos de yacimientos convencionales. DFT-UPGRADING TOOL consiste en el núcleo de los cálculos que estiman las velocidades de reacción y cuantifica el cambio en las permeabilidades relativas de las fases predominantes (petróleo, gas y agua) de acuerdo con la cantidad de nanocatalizador que ha sido retenido por el medio poroso y otras variables de interés del modelo.

2.2. Funciones

DFT-UPGRADING TOOL se divide en tres submódulos principales:

Mejoramiento in-situ: El módulo integra las entradas: presión, temperatura, concentración de nanocatalizador en el petróleo y composición del petróleo. Por medio de isotermas de adsorción y cinéticas de Arrhenius, calcula las velocidades a las que se consumen o generan componentes según algunas relaciones estequiométricas definidas por el usuario desde el inicio de la simulación.

Cambios de permeabilidad relativa por retención de nanocatalizador: Dado que la retención de nanocatalizador puede tener fuertes impactos sobre las permeabilidades efectivas de las fases, se interpolan las permeabilidades relativas base calculadas por el modelo termo-composicional, con aquellas que son ingresadas por el usuario, en función de la cantidad máxima retenida posible de acuerdo con los modelos de retención de doble sitio.

Cambios de permeabilidad relativa por temperatura y/o tensión interfacial: Durante procesos térmicos, es posible tener cambios sobre las saturaciones residuales y las formas de las curvas de permeabilidad relativa. Así, mediante datos de entrada, es posible asignar las permeabilidades relativas de entrada a un parámetro base – temperatura de referencia base o tensión interfacial base-. También se pueden ingresar unas curvas de permeabilidad relativa a otro valor arbitrario del parámetro de interpolación (temperatura modificada o tensión interfacial modificada). Durante tiempo de ejecución, el parámetro de interpolación es calculado y las permeabilidades relativas consideran ambos conjuntos de curvas. El parámetro de interpolación para las curvas aceite-agua está limitado a la temperatura del sistema.

2.3. Ventajas

La herramienta computacional DFT-UPGRADING TOOL tiene la capacidad de modelar procesos de recobro químico térmico tradicional – como lo son la inyección cíclica y continua de vapor-, combinándolos con los beneficios de la inyección de nanocatalizadores para mejoramiento in-situ. De esta forma, es posible evaluar el mejoramiento del desempeño de la tecnología como tal y el impacto favorable sobre la producción de hidrocarburos. Además, esta herramienta de simulación numérica tiene un enfoque fenomenológico, lo cual garantiza que los principales mecanismos que tienen lugar en el proceso físico real se están teniendo en cuenta.

2.4. Impacto o solución

Hasta el momento no existe una herramienta de simulación comercial que modele procesos de mejoramiento in situ con nanocatalizadores. DFT-UPGRADING TOOL permite simular técnicas de inyección vapor con nanocatalizadores, de tal forma que es posible predecir, con un grado de precisión aceptable, el mejoramiento de la producción y condiciones operacionales del desempeño de la tecnología en yacimientos de hidrocarburos. El software desarrollado tiene un alto impacto para la industria petrolera de Colombia y el mundo, pues actualmente se buscan estrategias que permitan mejorar/optimizar los procesos y garantizar el suministro energético requerido.

3. Estructura general del archivo JSON

El archivo JSON para el ingreso de datos al simulador está compuesto por 8 secciones que recogen toda la información necesaria para llevar a cabo la simulación: "initialset", "reservoir", "pvtmodel", "rockfluid", "initcond", "numcont", "wellcons" y "species". A continuación, se explica brevemente el contenido de cada una:

- "initialset": Se especifican las variables de salida y otros parámetros generales de la simulación.
- "reservoir": Se especifica la forma y dimensiones de la malla de simulación y las propiedades petrofísicas del yacimiento.
- "pvtmodel": Se añaden las propiedades PVT de los fluidos del yacimiento.
- "rockfluid": Se añaden las propiedades de interacción roca-fluido del yacimiento.
- "initcond": Se especifican las condiciones iniciales de la simulación.
- "numcont": Se especifican las variables de control numérico de la simulación.
- "wellcons": Se especifica el comportamiento en el tiempo y características de los pozos del yacimiento.
- "species": Aquí se elige cuales componentes van a interactuar con el yacimiento y todas las propiedades relacionadas a los mismos incluyendo su comportamiento de flujo en los pozos. Para hacer uso del módulo DFT-UPGRADING TOOL se deben elegir las siguientes:

- Sfoamer (surfactante para generación de espumas).
- Nanopartículas.

El formato de entrada JSON usa llaves, { }, para definir objetos o clases (lugares donde se almacena la información de manera estructurada), todo el conjunto de secciones son una clase y cada sección por separado es un objeto. Todo arreglo, matriz o vector debe especificarse usando corchetes, [], y separando cada valor con comas; los parámetros escalares y lógicos (true, false) **no** deben utilizar []. Para indicar un cambio de objeto, variable, arreglo, matriz o vector se deben usar comas al final de su declaración como se ejemplifica más adelante. Toda cadena de caracteres debe escribirse entre comillas dobles, “ ”.

4. Descripción específica de cada sección

En este punto se va a explicar de manera explícita cada sección del archivo de entrada, en cada caso se va a indicar el tipo de unidad utilizada (distancia, tiempo, temperatura, etc.) de manera genérica, puesto que el simulador **DFTmp SIMULATOR** puede utilizar 4 sistemas de unidades los cuales se muestran en la Tabla 1.

Siguiendo este orden de ideas, al realizar el ingreso de datos el usuario debe remplazar el símbolo de cada tipo de unidad por el valor que corresponda en la tabla mencionada.

Por ejemplo: si en algún punto del manual se explica que existe una entrada de la siguiente manera "Pressure" [p] y el usuario ha decidido que va a utilizar el sistema de unidades de campo, esta se ingresa en psia.

Propiedad	Símbolo	Sistema de Unidades			
		Campo (FIELD)	Sistema Internacional (SI)	Laboratorio (LAB)	Laboratorio UNAL (LABUN)
Longitud	<i>L</i>	<i>ft</i>	<i>m</i>	<i>cm</i>	<i>cm</i>
Permeabilidad	<i>k</i>	<i>md</i>	<i>md</i>	<i>md</i>	<i>md</i>
Viscosidad	<i>μ</i>	<i>cp</i>	<i>cp</i>	<i>cp</i>	<i>cp</i>
Temperatura	<i>T</i>	<i>R</i>	<i>K</i>	<i>K</i>	<i>K</i>
Peso molecular	<i>MW</i>	<i>g/mol</i>	<i>Kg/mol</i>	<i>g/mol</i>	<i>g/mol</i>

Presión	p	$psia$	KPa	atm	$psia$
Compresibilidad	C	psi^{-1}	kPa^{-1}	atm^{-1}	psi^{-1}
FVF de Gas	B_g	$RB/Mscf$	$m^3/stdm^3$	$cm^3/stdcm^3$	$cm^3/stdcm^3$
FVF de Líquido	B_L	RB/STB	$m^3/stdm^3$	$cm^3/stdcm^3$	$cm^3/stdcm^3$
GOR	R_s	$MMscf/STB$	$stdm^3/stdm^3$	$stdcm^3/stdcm^3$	$stdcm^3/stdcm^3$
OGR	R_v	$STB/Mscf$	$stdm^3/stdm^3$	$stdcm^3/stdcm^3$	$stdcm^3/stdcm^3$
Tasa de Flujo	Gas	q_g	scf/d	$stdcm^3/s$	$stdcm^3/s$
	Líquido	q_L	STB/d	$stdcm^3/s$	$stdcm^3/s$
Densidad	ρ	lbm/ft^3	kg/m^3	g/cm^3	g/cm^3
Tiempo	t	d	d	s	min
Angulo	θ	$^{\circ}$	$^{\circ}$	rad	rad
Energía	E	BTU	J	J	J
Masa	M	lbm	Kg	g	Kg
Moles	Mol	$lbmol$	mol	mol	mol

Tabla 1. Sistemas de unidades que pueden utilizarse en el simulador DFTmp SIMULATOR.

Debe tenerse en cuenta que en ocasiones pueden utilizarse prefijos y sufijos en alguna propiedad, por ejemplo, retomando el ejemplo anterior si hubiese definido la propiedad de la siguiente manera "Pressure" [mp], quiere decir que la propiedad debería ingresarse en mpsia.

Además, pueden aparecer propiedades definidas con alguna potencia. Por ejemplo, si aparece una propiedad definida así "Volume" [L³], y se utiliza el sistema internacional, quiere decir que la propiedad se debe ingresar en m, pero multiplicada por si misma 3 veces, es decir en realidad se debe ingresar en m³.

También existen parámetros adimensionales los cuales no necesitan ser ingresados en algún sistema de unidades, esto se simboliza con un [-]. En caso de que el parámetro a ingresar sea una cadena de texto, no se indica ningún corchete de tipo [].

4.1. Configuración inicial, "initialset"

En esta sección se especifica el sistema de unidades con el que desea trabajar, las variables de salida y otras opciones generales relacionadas a la simulación. La manera en la que se encuentra estructurada esta sección se ejemplifica en la Figura 1.

```
"initialset": {  
  "flowmodel": "CMP",  
  "simulation": "SINGLE",  
  "workunits": "FIELD",  
  "restart": "NOT",  
  "matprint": "NOT",  
  "consoleprint": "YES",  
  "fluid_phases": [ "OIL", "GAS", "WAT" ],  
  "no_fluid_phases": [ "ROCK" ],  
  "outres": [ "PRES", "SAT", "SATPRES", "VISC"],  
  "outwell": [ "BHFP", "QWSC", "QWAC", "PHSCRATE", "PHSCAC"]  
},
```

Figura 1. Ejemplo de la configuración inicial del yacimiento.

Los valores que deben ser ingresados se explican a continuación:

- "flowmodel": Es el modelo de fluido con el que se desea trabajar:
 - "CMP": Modelo Composicional. El comportamiento del fluido está descrito por una ecuación de estado cubica.
- "simulation": El tipo de simulación, se puede elegir entre dos opciones:
 - "SINGLE": Una sola simulación.
 - "HISTORYMATCHING": Varias simulaciones con el fin de realizar un history matching.
- "workunits": Sistema de unidades que determina el tipo de unidades con las que deben ingresarse **todos** los valores numéricos de entrada del archivo y en el cual se van a encontrar **todos** los resultados de la simulación. Existen 3 opciones disponibles:
 - "FIELD": Unidades de campo.
 - "SI": Unidades del sistema internacional.

- **"LAB"**: Unidades de laboratorio.
- **"LABUN"**: Unidades de laboratorio Universidad Nacional.
 - **"restart"**: Es una opción que permite usar los datos de presión y saturación para un tiempo dado de una simulación anterior como condición inicial de una nueva simulación a un tiempo posterior. Tener en cuenta que se debe contar con el archivo .rst que contiene los datos mencionados. Existen dos opciones disponibles:
- **"YES"**: Para activar dicha característica.
- **"NOT"**: Para no activar dicha característica e iniciar la simulación con las condiciones iniciales que se especifican en la sección **"initcond"**.
 - **"matprint"**: Permite obtener los índices de la matriz del jacobiano usado en el programa. Dicha matriz se puede usar para el análisis numérico del jacobiano. Existen dos opciones disponibles:
- **"YES"**: Para activar dicha característica.
- **"NOT"**: Para desactivar dicha característica.
 - **"consoleprint"**: Es una opción que permite elegir entre mostrar o no el progreso de la simulación conforme avanza mediante la consola del IDE (integrated development environment), incluyendo todos los parámetros posibles. Al encontrarse desactivada solo se muestran mensajes de error críticos. Existen dos opciones disponibles:
- **"YES"**: Para activar dicha característica.
- **"NOT"**: Para desactivar dicha característica.
 - **"fluid_phases"**: Un vector que incluye todas las fases fluidas en el yacimiento. Puede contener los siguientes elementos:
- **"OIL"**: Fase oleica.
- **"GAS"**: Fase gaseosa.
- **"WAT"**: Fase acuosa.

- **"no_fluid_phases"**: Un vector que incluye todas las fases no fluidas en el yacimiento. Para el módulo DFT-UPGRADING TOOL deben incluirse los siguientes parámetros:
 - **"ROCK"**: Fase rocosa.
 - **"SITE1"**: Fase rocosa de retención irreversible.
 - **"SITE2"**: Fase rocosa de retención reversible.
- **"outres"**: Un vector que contiene todas las variables de salida relacionadas con las características del yacimiento. Las opciones disponibles son:
 - **"PRES"**: Presión de cada bloque.
 - **"SAT"**: Saturaciones de todas las fases fluidas en cada bloque.
 - **"SATPRES"**: Presión de saturación. Punto de burbuja o de rocío dependiendo de las condiciones fluido de yacimiento.
 - **"MOLARFRAC"**: Fracción molar de todos los componentes en cada bloque.
 - **"MOLES"**: Moles de cada componente en cada bloque.
 - **"VISC"**: Viscosidad de cada fase en cada bloque.
- **"outwell"**: Un vector que contiene todas las variables de salida relacionadas con las características del/los pozos del yacimiento. Las opciones disponibles son:
 - **"BHFP"**: Presión de fondo de pozo.
 - **"QWSC"**: Caudal de la fase acuosa a condiciones estándar.
 - **"QWAC"**: Volumen acumulado de la fase acuosa a condiciones estándar.
 - **"QGSC"**: Caudal de la fase gaseosa a condiciones estándar.
 - **"QGAC"**: Volumen acumulado de la fase gaseosa a condiciones estándar.
 - **"QOSC"**: Caudal de la fase oleica a condiciones estándar.
 - **"QOAC"**: Volumen acumulado de la fase oleica a condiciones estándar.

- **"PHSCRATE"**: Caudal a condiciones estándar de todas las fases fluidas.
- **"PHSCAC"**: Volumen acumulado de cada fase fluida a condiciones estándar.
- **"CMRATE"**: Caudal de cada componente.
- **"CMAC"**: Volumen acumulado de cada componente.
- **"CMPHRATE"**: Caudal de cada componente por fase.

4.2. Configuración del yacimiento, "reservoir"

En esta sección, se especifica el tipo, las dimensiones, la posición y los bloques activos de la malla de simulación, las propiedades petrofísicas del yacimiento y sus unidades de flujo. La manera en la que se encuentra estructurada esta sección se ejemplifica en la Figura 2 y la Figura 3. A continuación, se explica cada una de las entradas:

- **"mesh"**: Contiene todas las características relacionadas a la malla, incluyendo ciertas propiedades petrofísicas:
 - **"type"**: Tipo de malla a usar en la simulación. Dependiendo del valor elegido, la entrada de datos de la dimensión en dirección "i" puede tomar una forma diferente. Para la malla de tipo radial aparecen los parámetros **"radialmodel"**, **"ri"** y **"re"**. Para la malla de tipo cartesiano y radial aparece el parámetro **"di"**. Las palabras clave que identifica a cada una deben ingresarse de la siguiente manera:
 - **"RADIAL"**: Malla en coordenadas cilíndricas.
 - **"CART"**: Malla en coordenadas cartesianas para simular yacimientos completos.
 - **"CORE"**: Malla en coordenadas cartesianas para simular núcleos de roca.

```

"reservoir": {
  "mesh": {
    "type": "CART",
    "i": 25,
    "j": 25,
    "k": 3,
    "print_location": "./Data/Results/VTKOutput/",
    "vtkfile": "ResultadosVTK",
    "di": { "type": "CONS", "value": [ 10.81529 ] },
    "dj": { "type": "CONS", "value": [ 10.81529 ] },
    "dk": { "type": "CONS", "value": [ 10 ] },
    "dtop": { "type": "CONS", "value": [ 0 ] },
    "permi": { "type": "CONS", "value": [ 300 ] },
    "permj": { "type": "CONS", "value": [ 300 ] },
    "permk": { "type": "KVAR", "value": [ 10, 20, 30 ] },
    "por": { "type": "CONS", "value": [ 0.15 ] },
    "actblocks": { "type": "CONS", "value": [ 1 ] },
    "flowunits": { "type": "CONS", "value": [ 1 ] }
  },
  "cpor": 0.000003,
  "prpor": 14.7,
  "denmat": 164.68496,
  "mwrock": 60.08
},

```

Figura 2. Ejemplo de configuración de malla cartesiana.

- **"i" [-]**: Número de bloques en la dirección "r" (caso radial) o "x" (caso cartesiano).
- **"j" [-]**: Número de bloques en la dirección "θ" (caso radial) o "y" (caso cartesiano).
- **"k" [-]**: Número de bloques en la dirección "z" (caso radial y cartesiano).
- **"print_location"**: Ubicación de los archivos de salida tipo VTK (archivos para visualización 3D de los resultados).
- **"vtkfile"**: Nombre de los archivos de salida tipo vtk. Cada archivo tiene el mismo nombre, pero son enumerados. Cada uno corresponde a un tiempo de impresión asignado en la sección **"wellcons"** (para mayor información ver el numeral 4.8).

```

"reservoir": {
  "mesh": {
    "type": "RADIAL",
    "i": 5,
    "j": 3,
    "k": 10,
    "print_location": "./Data/Results/VTKOutput/",
    "vtkfile": "ReultadosVTK",
    "radialmodel": "LOG",
    "ri": 0.35,
    "re": 2500,
    "dj": {"type": "JVAR", "value": [ 30, 30, 300 ] },
    "dk": {"type": "CONS", "value": [ 38 ] },
    "dtop": {"type": "CONS", "value": [ 13000 ] },
    "permi": {"type": "KVAR",
      "value": [
        10, 15, 12, 20, 23,
        45, 23, 34, 8, 90 ]
    },
    "permj": {"type": "CONS", "value": [ 10.0 ] },
    "permk": {"type": "CONS", "value": [ 10.0 ] },
    "por": {"type": "KVAR",
      "value": [
        0.1, 0.21, 0.02, 0.23, 0.23,
        0.45, 0.23, 0.34, 0.8, 0.90 ]
    },
    "actblocks": {"type": "CONS", "value": [ 1 ] },
    "flowunits": {"type": "CONS", "value": [ 1 ] }
  },
  "cpor": 1E-6,
  "prpor": 14.7,
  "denmat": 165,
  "mwrock": 60.08
},

```

Figura 3. Ejemplo de configuración de malla radial.

- **"radialmodel"**: (Solo malla radial) Es el modelo radial de la dirección "r" o "i". El modelo radial indica la forma en la que se crean los bloques en esa dirección. Actualmente se puede seleccionar el modelo LOG:
 - **"LOG"**: Modelo tipo logarítmico.
- **"ri" [L]**: (Solo malla radial) Radio interno de la malla (radio del pozo).
- **"re" [L]**: (Solo malla radial) Radio externo de la malla (límite externo del yacimiento).

➤ **"di", "dj" y "dk"**: Espesor de los bloques de la malla en las direcciones **"i"** (solo caso cartesiano), **"j"** y **"k"** respectivamente. Cada uno tiene 2 valores de entrada:

- **"type"**: Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción del\los valor\es en el parámetro **"value"**. Existen 2 opciones disponibles:

- **"CONS"**: Valores constantes. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en **"value"**. En la Figura 2 se nota que se utiliza esta opción para **"di"**, **"dj"** y **"dk"**.

- **"*VAR"**: Valores variables en la dirección *. En el caso cartesiano * debe remplazarse por I, J o K, que representan las direcciones **"x"**, **"y"** o **"z"**. En el caso radial * puede ser J o K, que representan las direcciones **"θ"** y **"z"**. Al elegirlo, se debe especificar en **"value"** el valor para cada bloque añadido en la dirección * separado cada uno con una coma. En la Figura 3, se nota que para el caso radial la longitud de los bloques en dirección **"θ"** usa la opción **"JVAR"**, indicando que difieren los tamaños en dicha dirección y a continuación se especifican los tamaños de los 3 bloques.

Es importante tener en cuenta que deben coincidir las direcciones de variación y del parámetro, es decir puede introducirse **"KVAR"** para **"dk"**, pero no **"JVAR"**.

- **"value" [L] o [θ]**: El\Los datos de entrada de los parámetros. Es un vector, debe ir entre corchetes [].

➤ **"dtop"**: Profundidad de cada bloque de la sección superior (tope) de la malla. Tiene 2 valores de entrada:

- **"type"**: Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción del\los valor\es en el parámetro **"value"**. Existen 2 opciones disponibles:

- **"CONS"**: Valores constantes. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en **"value"**. En los ejemplos de la Figura 2 y Figura 3 se utiliza esta configuración.

- **"VAR"**: Valores variables para cada bloque. Al elegirlo, se debe especificar en **"value"** el valor para cada bloque de la parte superior de la malla, separado cada uno con una coma, donde primero deben especificarse los valores en la dirección **"i"** y posteriormente en la dirección **"j"**. Un esquema de

ordenamiento para el caso de una malla cartesiana 6x7 y radial 4x8 se muestra en la Figura 4.

- **"value" [L]**: El\Los datos de entrada del parámetro. Es un vector, debe ir entre corchetes [].

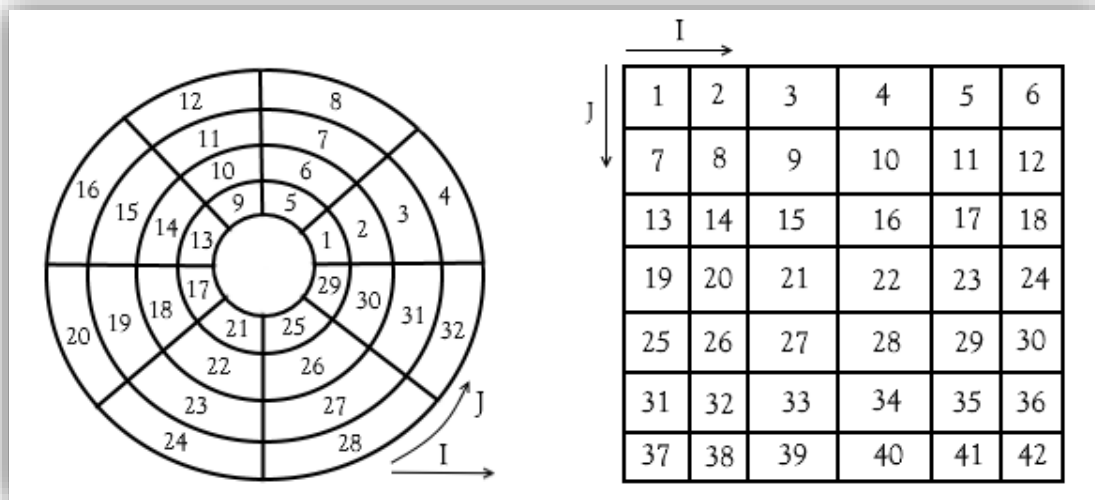


Figura 4. Orden de numeración para el vector **"dtop"** para un caso radial 4x8 y cartesiano 6x7.

- **"permi"**, **"permj"** y **"permk"**: Permeabilidad absoluta de cada bloque en dirección **"i"**, **"j"** y **"k"** respectivamente. Tiene 2 valores de entrada:
 - **"type"**: Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción del\los valor\es en el parámetro **"value"**. Existen 3 opciones disponibles:
 - **"CONS"**: Valores constantes en la dirección que corresponda para toda la malla. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en **"value"**. En los ejemplos de la Figura 2 se utiliza esta configuración.
 - **"*VAR"**: Valores variables en dirección * para la dirección que se desee. En el caso cartesiano o radial * puede ser I, J o K, que representan las direcciones **"x"**, **"y"** o **"z"** y **"r"**, **"θ"** o **"z"** respectivamente en cada caso. Al elegirlo, se debe especificar en **"value"** el valor para cada bloque de la dirección correspondiente y separado cada uno con una coma. En la Figura 3 para **"permi"** se usa esta configuración aplicando **"KVAR"**.

Para este caso no es necesario que las direcciones de variación y del parámetro coincidan ya que la permeabilidad es un tensor, es decir podría introducirse "IVAR" para "permk".

- "ALL": Valores diferentes para todos los bloques de la malla. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor para cada bloque, donde primero deben especificarse los valores en la dirección "i", posteriormente en la dirección "j" y por último en la "k", separado cada uno con una coma. Un esquema de ordenamiento y su ejemplo de introducción para el parámetro "permi" con una malla radial 2x4x3 y cartesiana 3x3x3 se muestra en la Figura 5.
- "value" [k]: El/Los datos de entrada del parámetro. Es un vector, debe ir entre corchetes [].

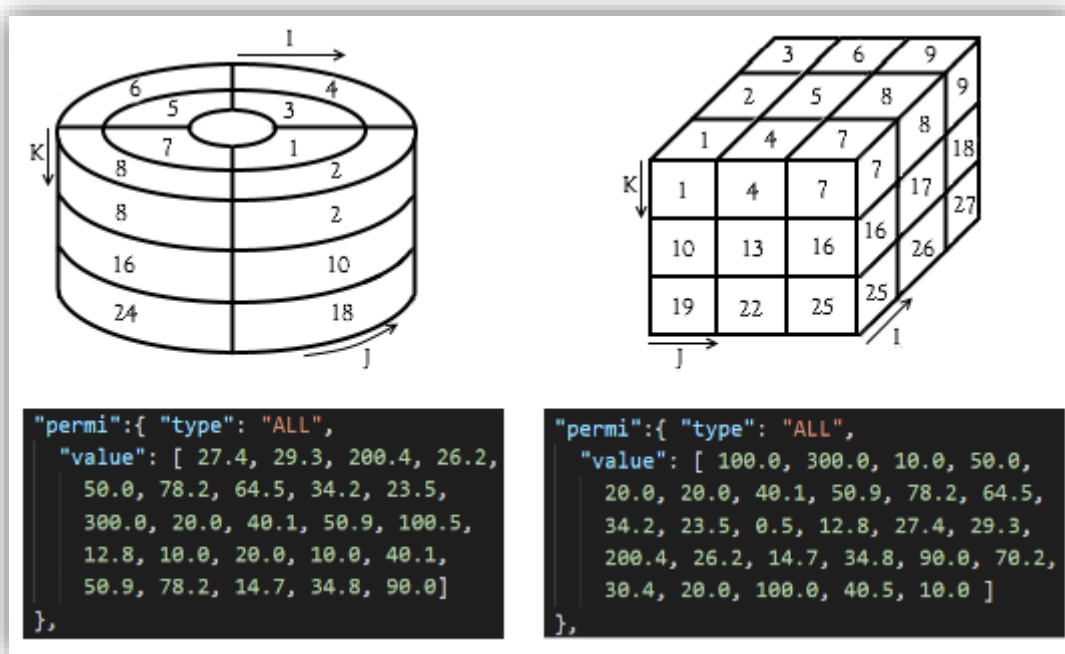


Figura 5. Ejemplo de introducción de permeabilidad usando la opción "ALL".

- "por": Porosidad de cada bloque en la malla. Tiene 2 valores de entrada:
 - "type": Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción de los valores en el parámetro "value". Existen 3 opciones disponibles:
 - "CONS": Valores constantes. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en "value". En la Figura 2 se utiliza esta configuración.

- **"*VAR"**: Valores variables en la dirección *. En el caso cartesiano o radial * puede ser I, J o K, que representan las direcciones "x", "y" o "z" y "r", "θ" o "z" respectivamente en cada caso. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor para cada bloque de la dirección correspondiente y separado cada uno con una coma. En la Figura 3 se usa esta configuración aplicando "KVAR".
- **"ALL"**: Valores diferentes para todos los bloques de la malla. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor para cada bloque, donde primero deben especificarse los valores en la dirección "i", posteriormente en la dirección "j" y por último en la "k", separado cada uno con una coma. Debe tenerse en cuenta el esquema de ordenamiento mostrado en la Figura 5, al igual que en el caso de la permeabilidad.
- **"value" [-]**: El/Los datos de entrada del parámetro. Es un vector, debe ir entre corchetes [].
- **"actblocks"**: Con esta opción se puede definir que bloques de la malla se encuentran activos. Un bloque activo es aquel que representa al yacimiento durante la simulación y uno inactivo hace el papel de barrera. Esto se hace con el fin de ofrecer la posibilidad de obtener formas geométricas más complejas con la malla. Aquel bloque que se le asigne el valor de 1 se encuentra activo y uno con 0 está inactivo. Tiene 2 valores de entrada:
 - **"type"**: Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción del/los valor/es en el parámetro "value". Existen 2 opciones disponibles:
 - **"CONS"**: Valores constantes, se usa cuando no se desea desactivar ningún bloque de la malla. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en "value". En el ejemplo de la Figura 2 y la Figura 3 se utiliza esta opción.
 - **"VAR"**: Se usa para activar cada bloque de manera individual. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor correspondiente, donde primero deben especificarse los valores en la dirección "i", posteriormente en la dirección "j" y por último en la "k", separado cada uno con una coma. En el ejemplo de la Figura 6 se utiliza esta opción en una malla ortogonal 3x3x3, notar que se tiene un total de 27 bloques y solo 7 de ellos están activos.
 - **"value" [-]**: El/Los datos de entrada del parámetro. Es un vector, debe ir entre corchetes [].



Figura 6. Ejemplo de bloques activos con la opción "VAR".

- **"flowunits"**: Contiene las unidades de flujo a las que pertenece cada sección de la malla creada. Una unidad de flujo físicamente se interpreta como un estrato rocoso que posee ciertas características PVT y de interacción roca-fluido específicas. Las unidades de flujo varían en dirección "k" únicamente. Tiene 2 valores de entrada:
 - **"type"**: Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción de los valores en el parámetro "value". Existen 2 opciones disponibles:
 - **"CONS"**: Se usa cuando toda la malla es una sola unidad de flujo. Al elegirlo, se debe escribir 1 en "value". En el ejemplo de la Figura 2 y la Figura 3 se utiliza esta opción ya que toda la malla pertenece a la zona de flujo 1.
 - **"KVAR"**: Se usa cuando la malla va a ser dividida en 2 o más unidades de flujo. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor para cada capa de la malla en dirección "k", separando cada uno con una coma. En la Figura 7 se muestran ejemplos del uso de esta opción en una malla ortogonal, incluyendo formas incorrectas de asignar dichos valores. Notar que los dos casos de la parte superior son válidos, mientras que las inferiores no, ya que la unidad de flujo 3 no puede ir de primera, ni tampoco es permitido introducir la misma unidad de flujo en más de una ocasión.
 - **"value" [-]**: El/Los datos de entrada del parámetro. Este valor es un vector, debe ir entre corchetes [] y además ser un número natural.
 - **"cpor" [C]**: Compresibilidad de poro de todo el yacimiento.
 - **"prpor" [p]**: Presión de referencia de la porosidad.

- "denmat" [ρ]: Densidad de la matriz de todo el yacimiento.
- "mwrock" [MW]: Peso molecular de la roca.

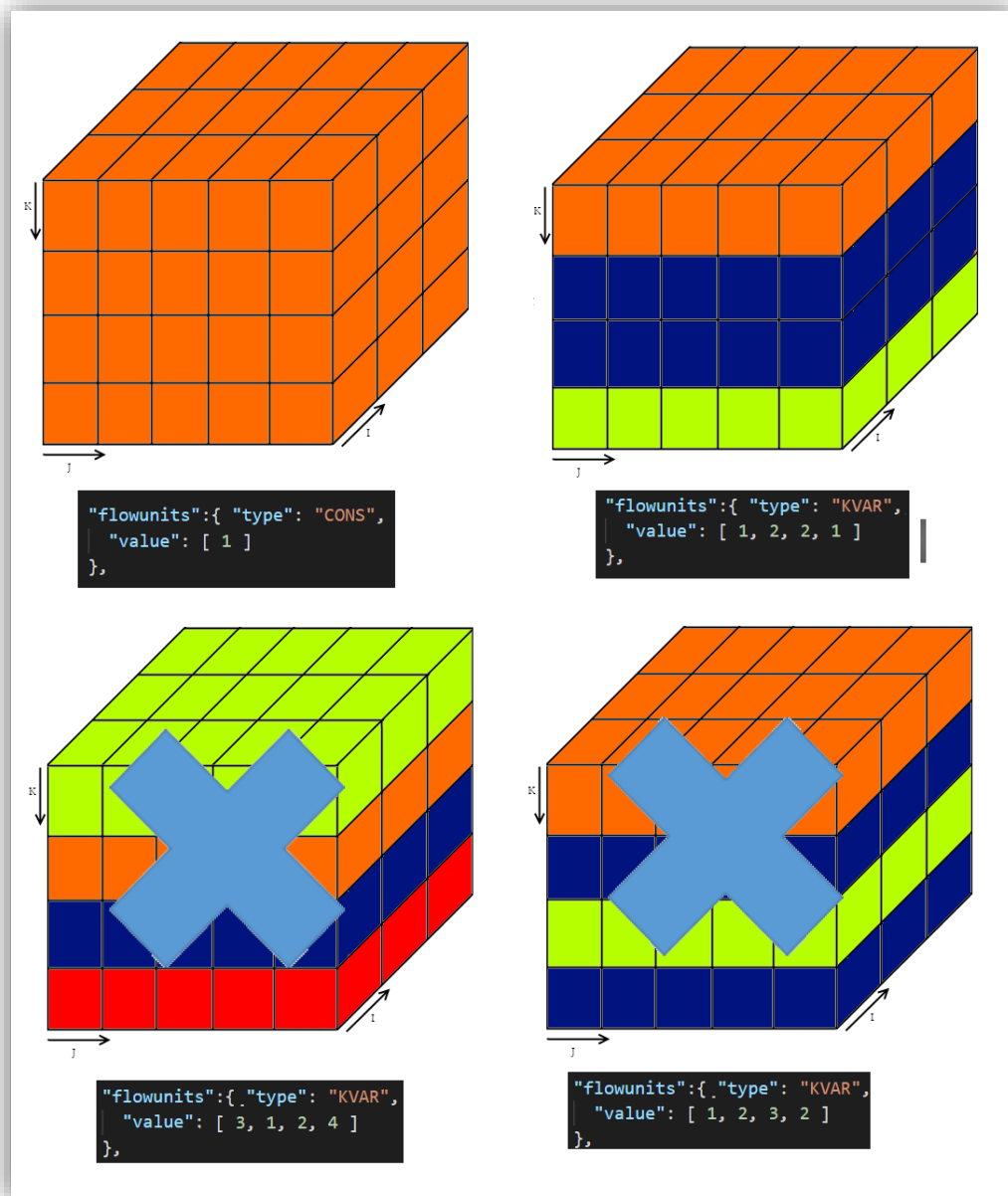


Figura 7. Ejemplo de asignación de unidades de flujo a una malla ortogonal 3x5x4. Notar que la unidad de flujo 1 es la de color naranja, la 2 de color azul, la 3 de color verde y la 4 de color rojo.

4.3. Modelo PVT, "pvtnmodel"

En esta sección se deben ingresar las características PVT de los fluidos contenidos en el yacimiento. El modelo de fluido que involucra es un modelo composicional.

Un ejemplo de la estructura que debe tener el modelo composicional se muestra en la Figura 9. Las entradas de esta sección se explican a continuación:

- **"eosmodel"**: Modelo de ecuación de estado, existe una opción disponible:
 - **"PENGROBINSON"**: Ecuación de estado Peng-Robinson.
- **"eosversion"**: Versión del modelo de ecuación de estado. En estos momentos el sistema soporta dos versiones de ecuación de estado:
 - **"1"**: Permite únicamente equilibrio líquido-gas hidrocarburo y solución mediante el método negative flash.
 - **"2"**: Es una versión más robusta, tiene la posibilidad de solución de tres fases y con diferentes métodos de solución.
- **"includewater"**: Se especifica si se debe incluir el componente agua en la ecuación de estado. Se debe elegir entre dos opciones:
 - **true**: Activa la opción y la EOS manejaría 3 fases (líquido-líquido-gas).
 - **false**: Desactiva la opción y la EOS manejaría 2 fases (líquido-gas).
- **"numerical_control"**: Control numérico de la ecuación de estado, contiene 3 parámetros:
 - **"stability_analysis"** y **"phase_equilibria" [-]**: Tolerancia del cálculo de análisis de estabilidad y el equilibrio de fases. En ambos casos se utilizan dos métodos de aproximación, inicialmente uno de orden lineal y posteriormente uno de orden supra-lineal más preciso. Ambos son vectores de dos entradas, el primer valor del es la tolerancia del método lineal el segundo es la tolerancia del método cuadrático.

```

"pvtmodel": {
  "flowunits": {
    "1": {
      "type": "BLACKOIL",
      "pvttable": {
        "pr": [ 1, 10, 50, 90, 123, 456, 789, 1500, 1800, 2400, 3000 ],
        "rs": [ 10, 15, 16, 40, 50, 250, 500, 1000, 1000, 1000, 1000 ],
        "bo": [ 1, 1.05, 1.09, 1.13, 1.18, 1.31, 1.45, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3 ],
        "bg": [ 0.105, 0.045, 0.025, 0.02, 0.019, 0.018, 0.017, 0.016, 0.015, 0.014, 0.012 ],
        "uo": [ 1.3, 1.01, 0.85, 0.73, 0.6, 0.4, 0.3, 0.2, 0.22, 0.26, 0.3 ],
        "ug": [ 0.13, 0.101, 0.085, 0.073, 0.06, 0.04, 0.03, 0.02, 0.022, 0.026, 0.03 ]
      },
      "watprop": {
        "rpw": 14.7,
        "bwo": 1.00000,
        "vwo": 1,
        "cbw": 0,
        "cvw": 0
      },
      "dengas": 0.075,
      "denoil": 57.4337,
      "denwat": 62.427961,
      "mwwat": 18.023,
      "mwoil": 800,
      "mwgas": 23.0
    },
    "2": {
      "type": "CONDGAS",
      "pvttable": {
        "pr": [ 1, 10, 50, 90, 123, 456, 789, 1500, 1800, 2400, 3000 ],
        "rv": [ 5.030, 4.857, 3.4820, 2.3454, 1.3940, 1.23445, 1.1193, 1.0012, 0.9746, 0.7848 ],
        "rs": [ 10, 15, 16, 40, 50, 250, 500, 1000, 1000, 1000, 1000 ],
        "bo": [ 1, 1.05, 1.09, 1.13, 1.18, 1.31, 1.45, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3 ],
        "bg": [ 0.105, 0.045, 0.025, 0.02, 0.019, 0.018, 0.017, 0.016, 0.015, 0.014, 0.012 ],
        "uo": [ 1.3, 1.01, 0.85, 0.73, 0.6, 0.4, 0.3, 0.2, 0.22, 0.26, 0.3 ],
        "ug": [ 0.13, 0.101, 0.085, 0.073, 0.06, 0.04, 0.03, 0.02, 0.022, 0.026, 0.03 ]
      },
      "watprop": {
        "rpw": 14.7,
        "bwo": 1.00000,
        "vwo": 1,
        "cbw": 0,
        "cvw": 0
      },
      "dengas": 0.075,
      "denoil": 40.4337,
      "denwat": 62.427961,
      "mwwat": 18.023,
      "mwoil": 300,
      "mwgas": 15.0
    }
  }
}

```

Figura 8. Ejemplo de adición de un segundo conjunto de parámetros PVT para otra unidad de flujo "2".

- **"numberOfKvalues" [-]**: indica el número de minimizaciones locales del plano tangente en el análisis de estabilidad, para hallar el mínimo global. Cada valor K representa un valor semilla para iniciar la minimización local:
 - Si se ingresan valores menores o iguales a 2, se usan K_{wilson} y $1/K_{wilson}$.
 - Si se ingresa 3 o 4, se usan K_{wilson} , $1/K_{wilson}$, $(K_{wilson})^{\frac{1}{3}}$ y $(K_{wilson})^{-\frac{1}{3}}$.
 - Si se ingresa un valor mayor o igual a 7, el número de valores K es igual al número de componentes sumado 4.
 - Los valores 5 y 6 son especiales: el 5 se usa especialmente cuando hay agua y se utiliza por defecto cuando **"includewater"** esta activado. El 6 provoca que se utilicen los mismos parámetros obtenidos al utilizar el 4 pero adicionando dos valores especiales.
 - **"flowunits"**: Debe contener toda la información PVT de cada unidad de flujo asignada en la sección **"reservoir"**. Por cada una de ellas debe aparecer un elemento identificado de la forma **"#"**, donde # es el identificador de la unidad de flujo a la cual se le están asignando las propiedades. Dicha información se detalla a continuación:
- **"gasoilcomp"**: Contiene la información de la composición de los componentes hidrocarburos:
 - **"comp"**: Nombre de los componentes del fluido.
 - **"wc" [-]**: Factor Acéntrico.
 - **"pc" [p]**: Presión Crítica.
 - **"tc" [T]**: Temperatura Crítica.
 - **"mw" [MW]**: Peso Molecular.
 - **"vc" [L³]**: Volumen Critico.
 - **"vc2" [L³/mol]**: Volumen crítico para cálculos de viscosidad del modelo LBC.
 - **"ZRA"**: Factor de compresibilidad de Rackett.
 - **"So" [-]**: Factor volume shift.

```

"pvtmodel": {
  "eosmodel": "PENGROBINSON",
  "eosversion": "2",
  "includewater": false,
  "numerical_control": {
    "stability_analysis": [ 1.0e-03, 1.0e-08 ],
    "phase_equilibria": [ 1.0e-05, 1.0e-12 ]
  },
  "flowunits": {
    "1": {
      "gasoilcomp": {
        "comp": [ "LITEOIL", "MEDMOIL", "HEAVYOIL" ],
        "wc": [ 0.010000, 0.030000, 0.080000 ],
        "pc": [ 224.910, 205.800, 161.700 ],
        "tc": [ 1260.000, 1409.400, 1620.000 ],
        "mw": [ 250.000, 450.000, 600.000 ],
        "vc": [ 0.0437076, 0.0238831, 0.0476817 ],
        "vc2": [ 0.05765968, 0.06166299, 0.07898437 ],
        "ZRA": [ 0.256, 0.303, 0.283 ],
        "S0": [ 0.11749457, -0.25015911, -0.09090743 ],
        "S1": [ -0.00068327784, -0.00058105076, -0.0014283087 ],
        "teb": [ 1078.258, 1404.103, 1579.488 ],
        "CP1": [ 0, 0, 0 ],
        "CP2": [ 0, 0, 0 ],
        "CP3": [ 0, 0, 0 ],
        "CP4": [ 0, 0, 0 ],
        "CP5": [ 0, 0, 0 ]
      },
      "interaction_coef": [
        [ 0, 0, 0 ],
        [ 0, 0, 0 ],
        [ 0, 0, 0 ]
      ],
      "watprop": {
        "rpw": 14.7,
        "bwo": 1.01066,
        "vwo": 0.3049,
        "cbw": 3E-6,
        "cww": 0.0,
        "denwat": 63.0598,
        "wc": 0.344,
        "pc": 3197.8385,
        "tc": 1165.14,
        "mw": 18.015,
        "vc": 0.0505,
        "BIP": [ 0, 0, 0 ],
        "CP": [ 8.064270630, -7.88984940E-04, 1.648156320E-06,
          -4.079893080E-10, 2.497059150E-14 ],
        "shift": [ 0.16, 0.0 ]
      },
      "ppoints": 20,
      "maxpress": 5000
    }
  },
  "viscosity": {
    "hydrocarbonmodel": {
      "type": "LBC",
      "coefficients": [ 0.11784, 0.040371, 0.080914,
        -0.038499593, 0.007370649 ]
    },
    "watermodel": {
      "type": "P"
    }
  }
}

```

Figura 9. Ejemplo de modelo PVT composicional.

- "S1" [1/T]: Coeficiente del parámetro volume shift.
 - "teb" [T]: Temperatura de ebullición normal.
 - "CP1" [E/(mol.T)], "CP2" [E/(mol.T²)], "CP3" [E/(mol.T³)], "CP4" [E/(mol.T⁴)], "CP5" [E/(mol.T⁵)]: Coeficientes del polinomio de capacidad calorífica.
- "interaction_coef": Coeficientes de interacción binaria entre componentes, se debe ingresar la matriz completa en el orden correspondiente de los componentes. Este orden puede observarse en la Tabla 2.

$k_{1,1}$	$k_{1,2}$...	$k_{1,n}$
$k_{2,1}$	$k_{2,2}$...	$k_{2,n}$
...
$k_{n,1}$	$k_{n,2}$...	$k_{n,n}$

Tabla 2. Orden de los coeficientes de interacción binaria.

- "watprop": Contiene las propiedades del componente agua presente en la unidad de flujo:
- "rpw" [p]: Presión de referencia en la cual se midieron las demás propiedades.
 - "bwo": Factor volumétrico del agua medido a la presión de referencia.
 - "vwo" [μ]: Viscosidad del agua medida a la presión de referencia.
 - "cbw" [C]: Factor de cambio del factor volumétrico del agua.
 - "cvw" [C]: Factor de cambio de la viscosidad del agua con la presión.
 - "denwat" [ρ]: Densidad del agua.
 - "wc" [-]: Factor acéntrico del agua.
 - "pc" [p]: Presión crítica del agua.
 - "tc" [T]: Temperatura crítica del agua.
 - "mww" [MW]: Peso molecular del agua.
 - "vc" [L³]: Volumen crítico del agua.
 - "BIP" [-]: Coeficientes de interacción binaria del agua con otros componentes.

- **"CP" [Varía]**: Coeficientes del polinomio de capacidad calorífica, es un vector de 5 posiciones fijas donde la primera posición corresponde al parámetro **"CP1" [E/(mol.T)]**, la segunda al parámetro **"CP2" [E/(mol.T²)]**, la tercera al parámetro **"CP3" [E/(mol.T³)]**, la cuarta al parámetro **"CP4" [E/(mol.T⁴)]** y la quinta al parámetro **"CP5" [E/(mol.T⁵)]**.
- **"shift" [-]**: Es un vector de dos posiciones, la primera corresponde al valor del factor volume shift y la segunda al coeficiente de volume shift (equivalente a S1).
- **"ppoints"**: número de puntos que se generan en la tabla de propiedades del agua.
- **"maxpress"**: Presión máxima de la tabla de propiedades del agua.
 - **"viscosity"**: Contiene las especificaciones del cálculo de viscosidad de cada tipo de fluido:
- **"hydrocarbonmodel"**: Contiene los parámetros para el cálculo de la viscosidad de los componentes hidrocarburos:
 - **"type"**: El tipo de modelo para realizar el cálculo. Actualmente se dispone de una opción:
 - **"LBC"**: Modelo Lohrenz-Bray-Clark.
 - **"coefficients"**: Vector con los coeficientes del modelo **"LBC"**.
- **"watermodel"**: Contiene los parámetros para el cálculo de la viscosidad de los componentes hidrocarburos:
 - **"type"**: El tipo de modelo para realizar el cálculo.
 - **"P"**: Modelo de interpolación que tiene en cuenta el efecto de la presión en la viscosidad del agua.
 - **"PT"**: Modelo publicado por la IAPWS que tiene en cuenta el efecto de la presión y la temperatura en la viscosidad del agua.

En el caso de que se haya designado más de una unidad de flujo, una vez completada la información de la primera, lo siguiente sería especificarla con el número correspondiente y llenar nuevamente todos los parámetros mencionados.

4.4. Información de interacción roca-fluido, "rockfluid"

En esta sección se deben ingresar datos relacionados con la interacción entre los diferentes fluidos del yacimiento y la roca que lo compone. Deben especificarse los parámetros necesarios para el caso petróleo-gas y petróleo-agua y por cada unidad de flujo asignada en la sección "reservoir". En la Figura 10 se muestra un ejemplo de la estructura de esta sección.

```
"rockfluid": {
  "type": "TAB",
  "flowunits": {
    "1": {
      "ogtable": {
        "sg": [ 0, 0.053125, 0.159375, 0.2125, 0.265625, 0.31875, 0.425, 0.478125, 0.584375, 0.6375, 0.690625, 0.74375, 0.796875, 0.85 ],
        "krp": [ 0, 0.0625, 0.1875, 0.25, 0.3125, 0.375, 0.4375, 0.5625, 0.625, 0.75, 0.8125, 0.875, 0.9375, 1 ],
        "kro": [ 0.7, 0.6125, 0.56875, 0.525, 0.48125, 0.4375, 0.35, 0.30625, 0.21875, 0.175, 0.13125, 0.0875, 0.04375, 0 ],
        "pcgo": [ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 ]
      },
      "owtable": {
        "sw": [ 0.15, 0.230633357, 0.272001923, 0.361744298, 0.411125466, 0.505468213, 0.550853652, 0.600635658, 0.646787767, 0.68 ],
        "krw": [ 0, 7.25E-03, 1.62E-02, 3.00E-02, 0.07319213, 0.103053, 0.142530112, 0.180145838, 0.3 ],
        "kro": [ 0.7, 0.503930026, 0.431800526, 0.267684268, 0.195657595, 0.083546585, 4.80E-02, 1.30E-03, 6.41E-04, 0.00E+00 ],
        "pcow": [ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 ]
      }
    }
  }
}
```

Figura 10. Ejemplo de la estructura de la sección "rockfluid".

Cada variable que debe ser ingresada se explica a continuación:

- **"type"**: Es una variable que permite modificar la manera de especificar las propiedades de interacción roca-fluido. En el momento solo se encuentra disponible una opción:
 - **"TAB"**: Se usa para ingresar los datos a manera de vectores para el caso de propiedades petróleo-gas y petróleo-agua. La dimensión de los vectores debe ser la misma en cada caso.
- **"flowunits"**: Debe contener toda la información PVT de cada unidad de flujo asignada en la sección "reservoir". Por cada una de ellas debe aparecer un elemento identificado de la forma "#", donde # es el identificador de la unidad de flujo a la cual se le están asignando las propiedades. Dicha información se detalla a continuación:
 - **"ogtable"**: Contiene todas las propiedades de interacción roca-petróleo-gas de la unidad de flujo. Los parámetros que deben ser especificados son:
 - **"sg" [-]**: La saturación de gas a la cual se midieron las propiedades.

- "krg" [-]: Permeabilidad relativa del gas.
 - "kro" [-]: Permeabilidad relativa del petróleo.
 - "pcgo" [p]: Presión capilar en un sistema petróleo-gas.
- "owttable": Contiene todas las propiedades de interacción roca-petróleo-agua de la unidad de flujo. Los parámetros que deben ser especificados son:
- "sw" [-]: La saturación de agua a la cual se midieron las propiedades.
 - "krw" [-]: Permeabilidad relativa del agua.
 - "kro" [-]: Permeabilidad relativa del petróleo.
 - "pcow" [p]: Presión capilar en un sistema petróleo-agua.

Si se desea añadir otra unidad de flujo, lo siguiente sería especificarla como se hizo al inicio de esta sección y llenar nuevamente todos los parámetros correspondientes como se muestra en la Figura 11.

```

"rockfluid": {
  "type": "TAB",
  "flowunits": {
    "1": {
      "ogtable": {
        "sg": [ 0, 0.053125, 0.159375, 0.2125, 0.265625, 0.31875, 0.425, 0.478125, 0.584375, 0.6375, 0.690625, 0.74375, 0.796875, 0.85 ],
        "krg": [ 0, 0.0625, 0.1875, 0.25, 0.3125, 0.375, 0.4375, 0.5625, 0.625, 0.75, 0.8125, 0.875, 0.9375, 1 ],
        "kro": [ 0.7, 0.6125, 0.56875, 0.525, 0.48125, 0.4375, 0.35, 0.30625, 0.21875, 0.175, 0.13125, 0.0875, 0.04375, 0 ],
        "pcgo": [ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 ]
      },
      "owtable": {
        "sw": [ 0.15, 0.230633357, 0.272001923, 0.361744298, 0.411125466, 0.505468213, 0.550853652, 0.600635658, 0.646787767, 0.68 ],
        "krw": [ 0, 7.25E-03, 1.62E-02, 3.00E-02, 0.07319213, 0.103053, 0.142530112, 0.180145838, 0.3 ],
        "kro": [ 0.7, 0.503930026, 0.431800526, 0.267684268, 0.195657595, 0.083546585, 4.80E-02, 1.30E-03, 6.41E-04, 0.00E+00 ],
        "pcow": [ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 ]
      }
    },
    "2": {
      "ogtable": {
        "sg": [ 0, 0.053125, 0.159375, 0.2125, 0.265625, 0.31875, 0.425, 0.478125, 0.584375, 0.6375, 0.690625, 0.74375, 0.796875, 0.85 ],
        "krg": [ 0, 0.0625, 0.1875, 0.25, 0.3125, 0.375, 0.4375, 0.5625, 0.625, 0.75, 0.8125, 0.875, 0.9375, 1 ],
        "kro": [ 0.7, 0.6125, 0.56875, 0.525, 0.48125, 0.4375, 0.35, 0.30625, 0.21875, 0.175, 0.13125, 0.0875, 0.04375, 0 ],
        "pcgo": [ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 ]
      },
      "owtable": {
        "sw": [ 0.15, 0.230633357, 0.272001923, 0.361744298, 0.411125466, 0.505468213, 0.550853652, 0.600635658, 0.646787767, 0.68 ],
        "krw": [ 0, 7.25E-03, 1.62E-02, 3.00E-02, 0.07319213, 0.103053, 0.142530112, 0.180145838, 0.3 ],
        "kro": [ 0.7, 0.503930026, 0.431800526, 0.267684268, 0.195657595, 0.083546585, 4.80E-02, 1.30E-03, 6.41E-04, 0.00E+00 ],
        "pcow": [ 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0 ]
      }
    }
  }
}

```

Figura 11. Ejemplo de adición de un segundo conjunto de parámetros de interacción roca-fluido para otra unidad de flujo "2".

4.5. Sección térmica

```
"thermal": {
  "model_form": "ISTH",
  "overburden_heat_loss": {
    "heat_cap_ob": 0,
    "conduct_ob": 0,
    "heat_cap_ub": 0,
    "conduct_ub": 0,
    "temp_ob": 0,
    "grad_ob": 0
  },
  "flowunits": {
    "1": {
      "thermal_properties": {
        "conduct_o": 1.896,
        "conduct_g": 0.333,
        "conduct_w": 8.047,
        "conduct_r": 2053.68,
        "heat_cap_r": 20
      },
      "thermal_expansion": {
        "bpor": 0.0,
        "trpor": 635.67
      }
    }
  }
},
```

Figura 12. Ejemplo de la sección "thermal"

Cada variable que debe ser ingresada se explica a continuación:

- **"model_form"**: Es una variable que permite seleccionar la formulación térmica a usar en el modelo numérico. En el momento se encuentra disponibles las siguientes opciones:
 - **"ISTH"**: Hace referencia a un método de solución isotérmico, el cual calcula la entalpia de las fases del sistema.
 - **"IST"**: Hace referencia a un método de solución isotérmico

- **"ISH"**: Hace referencia a un método de solución isoentálpico, en el cual la variable a resolver es la temperatura del sistema.
 - **"overburden_heat_loss"**: en esta parte se incluye los parámetros necesarios para modelar las pérdidas de calor por los estratos adyacentes del yacimiento:
- **"heat_cap_ob"[E/L³.T]**: es la capacidad calorífica descrita para la formación adyacente al estrato superior del yacimiento.
- **"conduct_ob"[E/L.t.T]**: es la conductividad térmica de la formación adyacente al estrato superior del yacimiento.
- **"heat_cap_ub"[E/L³.T]**: es la capacidad calorífica descrita para la formación adyacente al estrato inferior del yacimiento.
- **"conduct_ub"[E/L.t.T]**: es la conductividad térmica de la formación adyacente al estrato inferior del yacimiento.
- **"temp_ob"[T]**: es la temperatura inicial de las formaciones adyacentes. Se considera que la temperatura asignada es igual en ambos estratos: superior e inferior.
- **"grad_ob"[T]**: es el gradiente de temperatura mínimo entre la temperatura de los bloques de los límites superior e inferior y la temperatura de la formación adyacente.
 - **"flowunits"**: la descripción es idéntica a la dada en el numeral 4.3.1 para "flowunits". La diferencia es las propiedades que en este caso agrupa, siendo las siguientes:
- **"thermal_properties"**: en esta sección se incluyen las propiedades térmicas para las cuatro fases que pueden estar en el medio poros. A continuación, se especifica cada una de ellas:
 - **"conduct_o"[E/L.t.T]**: conductividad térmica de la fase aceite.
 - **"conduct_g"[E/L.t.T]**: conductividad térmica de la fase gas.
 - **"conduct_w"[E/L.t.T]**: conductividad térmica de la fase agua.
 - **"conduct_r"[E/L.t.T]**: conductividad térmica de la fase roca.

- `"heat_cap_r"`[E/L³.T]: capacidad calorífica de la fase roca.
- `"thermal_expansion"`: en esta parte se especifican los parámetros relacionados con la expansión térmica de la roca, cuyos parámetros necesarios son:
 - `"bpor"`[p⁻¹]: es la compresibilidad de la roca.
 - `"trpor"`[T⁻¹]: es el coeficiente de expansión térmica.

Si se desea añadir otra unidad de flujo, lo siguiente sería especificarla de manera análoga como se hizo al inicio de la sección roca-fluido y llenar nuevamente todos los parámetros correspondientes como se muestra en la Figura 11.

4.6. Condiciones iniciales, "initcond"

En esta sección se deben especificar las condiciones iniciales del yacimiento. Existen dos configuraciones posibles: una donde las condiciones se especifican por cada bloque y otra donde se usan aspectos de equilibrio capilar y gravitacional por cada unidad de flujo asignada en la sección `"reservoir"`. Además, cada caso tiene diferentes parámetros de ingreso dependiendo del modelo PVT escogido en la sección `"pvtmodel"`.

4.6.1. Condiciones Iniciales para el modelo composicional

En la Figura 13 se puede observar un ejemplo de la estructura para cada forma de ingreso. En estos ejemplos se asume que se han designado tres componentes hidrocarburos en la sección `"pvtmodel"`.

```

"initcond": {
  "type": "PROPARRAY",
  "po": {
    "type": "CONS",
    "value": [ 4500 ]
  },
  "sw": {
    "type": "ALL",
    "value": [ 0.05, 0.09, 0.04, 0.06 ]
  },
  "zi": {
    "type": "CONS",
    "value": [ 0.0001161, 0.0000133, 0.0037029 ]
  },
  "temp": {
    "type": "CONS",
    "value": [ 671.67 ]
  }
},
},

"initcond": {
  "type": "GRAVCAPEQU_WOG",
  "flowunits": {
    "1": {
      "refp": 3550.0,
      "refd": 7500.0,
      "dwoc": 7500.0,
      "dgoc": 7500.0,
      "gzso": "NOT",
      "wzso": "NOT",
      "reft": 659.67,
      "tgrd": 0.013716,
      "zo": [ 0.6793, 0.0990, 0.0591 ],
      "zg": [ 0.6793, 0.0990, 0.0591 ]
    }
  }
},
},

"initcond": {
  "type": "GRAVCAPEQU_COMPDEPTH",
  "flowunits": {
    "1": {
      "refp": 3550.0,
      "refd": 7500.0,
      "dwoc": 7500.0,
      "gzso": "NOT",
      "wzso": "NOT",
      "reft": 659.67,
      "tgrd": 0.013716,
      "zi": {
        "type": "CONS",
        "value": [ 0.65, 0.25, 0.1 ]
      }
    }
  }
},
},

```

Figura 13. Formas de ingreso de condiciones iniciales del yacimiento, usando la opción "PROPARRAY" (izquierda), "GRAVCAPEQU_WOG" (centro) y "GRAVCAPEQU_COMPDEPTH" (derecha) para una malla 2x2x1 con un modelo de fluido tipo composicional.

A continuación, se describen los parámetros de ingreso de cada caso:

- **"type"**: Elección del tipo de configuración para las condiciones iniciales. Dependiendo de la opción escogida cambia el número y tipo de parámetros que deben especificarse posteriormente. Se puede elegir entre 3 opciones:
 - **"PROPARRAY"**: Se usa si desea especificar la condición de cada bloque de la malla de manera directa.
 - **"GRAVCAPEQU_WOG"**: Se usa si se desea que las condiciones iniciales de cada unidad de flujo asignada en la sección "reservoir" sean determinadas por el equilibrio capilar y gravitacional generado de acuerdo con sus características. En este caso se ingresa la composición de líquido y gas de manera independiente.
 - **"GRAVCAPEQU_COMDEPTH"**: Se usa si se desea que las condiciones iniciales de cada unidad de flujo asignada en la sección "reservoir" sean determinadas por el equilibrio capilar y gravitacional generado de acuerdo con sus características, además de tener la posibilidad de hacer que la composición del fluido varíe entre bloques. En este caso se ingresa la composición global del fluido.
- **"po", "sw", "zi" y "temp"**: (Solo **"PROPARRAY"**) Presión de aceite, saturación de agua, composición global y temperatura respectivamente. Todos tienen 2 parámetros de entrada:

- **"type"**: Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción de los valores en el parámetro **"value"**. Existen 2 opciones disponibles:
 - **"CONS"**: Valores constantes para toda la malla. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en **"value"**. En la Figura 13 (izquierda) se utiliza esta opción para ingresar los datos de **"po"**.
 - **"ALL"**: Valores variables para todos los bloques de la malla. Al elegirlo, se debe especificar en **"value"** el valor para cada bloque, donde primero deben especificarse los valores en la dirección **"i"**, posteriormente en la dirección **"j"** y por último en la dirección **"k"**, separado cada uno con una coma. Un esquema de ordenamiento se muestra en la Figura 5. En la Figura 13 (izquierda) se utiliza esta opción para ingresar los datos de **"sw"**.
- **"value" [p], [-], [-] y [T]**: El/Los datos de entrada de los parámetros. Es un vector, debe ir entre corchetes [].
 - **"flowunits"**: (Solo **"GRAVCAPEQU_WOG"** o **"GRAVCAPEQU_COMDEPTH"**) Debe contener toda la información PVT de cada unidad de flujo asignada en la sección **"reservoir"**. Por cada una de ellas debe aparecer un elemento identificado de la forma **"#"**, donde # es el identificador de la unidad de flujo a la cual se le están asignando las propiedades. Dicha información se detalla a continuación:
- **"refp" [p]**: Presión de referencia en algún punto de la unidad de flujo.
- **"refd" [L]**: Profundidad de referencia a la cual se midió la presión de referencia.
- **"dgoc" [L]**: (Solo **"GRAVCAPEQU_WOG"**) Profundidad del contacto gas-aceite.
- **"dwoc" [L]**: Profundidad del contacto agua-aceite.
- **"gzso" [-]** y **"wzso" [-]**: Condiciones para especificar si existe aceite en la zona de gas o aceite en la zona de agua respectivamente. Se debe elegir entre 2 opciones:
 - **"YES"**: Para activar la condición.
 - **"NOT"**: Para desactivar la condición.
- **"reft" [T]**: Temperatura de referencia en el contacto.

- "tgrd" [L]: Gradiente de temperatura.
- "zo" [-]: (Solo "GRAVCAPEQU_WOG") Fracción molar de cada componente de la fase oleica líquida. Es un vector, debe ir entre corchetes [] y la suma de todos sus elementos debe ser exactamente 1.
- "zg" [-]: (Solo "GRAVCAPEQU_WOG") Fracción molar de cada componente de la fase oleica gaseosa. Es un vector, debe ir entre corchetes [] y la suma de todos sus elementos debe ser exactamente 1.
- "zi": (Solo "GRAVCAPEQU_COMDEPTH") Fracción molar global de cada componente de la fase oleica. Tiene 2 parámetros de entrada:
 - "type": Tipo de distribución de los valores en la malla. La opción elegida afecta la forma de introducción de los valores en el parámetro "value". Existen 2 opciones disponibles:
 - "CONS": Valores constantes para toda la malla. Al elegirlo, se debe escribir un solo valor en "value".
 - "KVAR": Se usa para variar la composición en sentido vertical dentro de la unidad de flujo. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor para cada capa de la malla en dirección "k", separando cada uno con una coma.
 - "ALL": Valores variables para todos los bloques de la malla. Al elegirlo, se debe especificar en "value" el valor para cada bloque, donde primero deben especificarse los valores en la dirección "i", posteriormente en la dirección "j" y por último en la dirección "k", separado cada uno con una coma. Un esquema de ordenamiento se muestra en la Figura 5.

```

"initcond": {
  "type": "GRAVCAPEQU_WOG",
  "flowunits": {
    "1": {
      "refp": 3550.0,
      "refd": 7500.0,
      "dwoc": 7500.0,
      "dgoc": 7500.0,
      "gzso": "NOT",
      "wzso": "NOT",
      "reft": 659.67,
      "tgrd": 0.013716,
      "zo": [ 0.6793, 0.0990, 0.0591 ],
      "zg": [ 0.6793, 0.0990, 0.0591 ]
    },
    "2": {
      "refp": 5000.0,
      "refd": 7500.0,
      "dwoc": 7500.0,
      "dgoc": 7500.0,
      "gzso": "YES",
      "wzso": "NOT",
      "reft": 830,
      "tgrd": 0.013716,
      "zo": [ 0.15, 0.05, 0.80 ],
      "zg": [ 0.35, 0.25, 0.60 ]
    }
  }
},
},

```

```

"initcond": {
  "type": "GRAVCAPEQU_COMPDEPTH",
  "flowunits": {
    "1": {
      "refp": 3550.0,
      "refd": 7500.0,
      "dwoc": 7500.0,
      "gzso": "NOT",
      "wzso": "NOT",
      "reft": 659.67,
      "tgrd": 0.013716,
      "zi": {
        "type": "CONS",
        "value": [ 0.65, 0.25, 0.1 ]
      }
    },
    "2": {
      "refp": 4550.0,
      "refd": 7500.0,
      "dwoc": 7500.0,
      "gzso": "NOT",
      "wzso": "YES",
      "reft": 550.256,
      "tgrd": 0.013716,
      "zi": {
        "type": "CONS",
        "value": [ 0.20, 0.15, 0.65 ]
      }
    }
  }
},
},

```

Figura 14. Ejemplo de adición de un segundo conjunto de condiciones iniciales para otra unidad de flujo "2", usando la opción "GRAVCAPEQU_WOG" (izquierda) y "GRAVCAPEQU_COMPDEPTH" (derecha).

- "value" [-], [-] y [T]: El/Los datos de entrada de los parámetros. Es un vector, debe ir entre corchetes [] y la suma de todos sus elementos debe ser exactamente 1.

Si se tiene otra unidad de flujo (Solo "GRAVCAPEQU_WOG" o "GRAVCAPEQU_COMDEPTH"), lo siguiente sería especificarla como se mencionó anteriormente y llenar nuevamente todos los parámetros mencionados, como se muestra en la **Error! No se encuentra el origen de la referencia..**

4.7. Control numérico, "numcont"

En esta sección se definen los parámetros numéricos necesarios para controlar la simulación. La estructura de esta sección se muestra en la Figura 15.

```
"numcont": {  
  "dtmax": 100,  
  "dtmin": 1e-6,  
  "dtstart": 5E0,  
  "maxpre": 290,  
  "maxmol": 0.2,  
  "maxsat": 0.1,  
  "fdt": 2.0,  
  "itmax": 20,  
  "itmin": 3,  
  "ncuts": 8,  
  "save_flash": 3,  
  "linear_solver": {  
    "abstol": 1E-20,  
    "zerotol": 1E-30  
  },  
  "pitol": {  
    "type": "RXTOL",  
    "value": 1e-2  
  },  
  "moltol": {  
    "type": "RXTOL",  
    "value": 1e-2  
  },  
  "pwftol": {  
    "type": "RXTOL",  
    "value": 1e-2  
  }  
},
```

Figura 15. Control numérico.

- **"dtmax" [t]:** Indica el tamaño de paso de tiempo máximo permitido para realizar cálculos de las propiedades de interés a un tiempo futuro.
- **"dtmin" [t]:** Es el tamaño de paso mínimo de tiempo permitido para realizar cálculos de las propiedades de interés a un tiempo futuro.

- **"dtstart" [t]**: Se refiere al tamaño de paso de tiempo con el que se desea iniciar la simulación, este valor se va modificando conforme avanza la simulación según se requiera.
- **"maxpre" [p]**: El cambio de presión máximo permitido en un bloque para cierto intervalo de tiempo simulado.
- **"maxmol" [mol]**: El cambio de moles máximo permitido en un bloque para cierto intervalo de tiempo simulado.
- **"maxsat" [-]**: El cambio de saturación máximo permitido en un bloque para cierto intervalo de tiempo simulado.
- **"fdt" [-]**: Factor de aceleración del tamaño de paso en el tiempo.
- **"itmax" [-]**: Las iteraciones máximas permitidas durante la solución numérica del sistema de ecuaciones generado en la simulación.
- **"itmin" [-]**: Las iteraciones mínimas exigidas durante la solución numérica del sistema de ecuaciones generado en la simulación.
- **"ncuts" [-]**: Número de veces (cortes) que se reduce el tamaño del tiempo en cada paso de convergencia numérica fallida.
- **"save_flash" [-]**: Iteración a partir de la cual se guardan los resultados de los cálculos flash para utilizarlos como valor semilla en el siguiente paso de tiempo.
- **"linear_solver"**: Control numérico del solucionador lineal. Tiene 2 parámetros de entrada:
 - **"abstol" [-]**: Tolerancia absoluta del solucionador lineal.
 - **"zerorol" [-]**: Tolerancia cero del solucionador lineal.
 - **"pitol", "moltol" y "pwftol"**: Tolerancia permitida en el error calculado de presión, moles y presión de fondo de pozo entre dos iteraciones sucesivas. Si dicha tolerancia no se excede en tiempo de simulación se puede considerar que el sistema converge. Tiene dos valores de entrada:
- **"type"**: Tipo de tolerancia. Existen varias opciones, algunas de ellas más exigentes que otras y en ocasiones no permiten converger a un resultado:

- **"DXTOL"**: Tolerancia absoluta. Toma el máximo valor de la diferencia entre el vector de la iteración k y la k+1.

$$DXTOL = \max\{abs(X^{k+1} - X^k)\}$$

- **"ABSTOL"**: Tolerancia residual absoluta. Toma la norma 2 del vector residual de la malla en la iteración k.

$$ABSTOL = \|R^k\|_2$$

- **"INFTOL"**: Tolerancia infinita. Toma el máximo valor del vector residual de la malla en la iteración k.

$$INFTOL = \max\{R^k\}$$

- **"STOL"**: Tolerancia relativa actualizable. Toma la razón entre la norma 2 de la diferencia entre el vector residual en la iteración k y el vector residual en la iteración k-1 y la norma 2 de la diferencia entre el vector residual en la iteración k-1 y el vector residual en la iteración k-2.

$$STOL = \frac{\|R^k - R^{k-1}\|_2}{\|R^{k-1} - R^{k-2}\|_2}$$

- **"RELTOL"**: Tolerancia relativa residual. Toma la razón entre la norma 2 del vector residual en el tiempo k y la norma 2 del vector residual en la primera iteración.

$$RELTOL = \frac{\|R^k\|_2}{\|R^0\|_2}$$

- **"IUTOL"**: Tolerancia infinita actualizable. Toma el máximo valor de la diferencia entre el vector residual a la iteración k y el vector residual a la iteración k-1.

$$IUTOL = \max\{R^k - R^{k-1}\}$$

- **"RXTOL"**: Tolerancia relativa variable. Toma la razón entre la norma 2 de la diferencia entre el vector de la iteración k y la k+1 y la norma 2 del vector de variables en la iteración k.

$$RXTOL = \frac{\|X^{k+1} - X^k\|_2}{\|X^k\|_2}$$

➤ **"value" [-]**: El valor de la tolerancia elegida.

El objetivo de los parámetros "fdt" y "ncuts" es obtener una buena resolución de la simulación cuando se están dando cambios significativos en las propiedades de los bloques debido a alguna perturbación y acelerar la simulación cuando no se dan cambios significativos.

4.8. Información de los pozos, "wellcons"

En esta sección se ingresa la información relacionada con la ubicación de los pozos en la malla, sus características y su comportamiento en el tiempo. En la Figura 16 se muestra un ejemplo de la configuración de 2 pozos en una malla 13x14x6. Notar que se especifica un pozo productor con condición de presión de fondo constante y un pozo inyector con condición de caudal de gas a condición estándar constante. A continuación, se explica cada parámetro de esta sección:

- "timeimp" [t]: Valores de tiempo en los que se desean obtener los valores de salida de las variables especificadas en la sección "initialset". El último dato es el tiempo final de simulación.
- "wellindex": El identificador de cada pozo que va a incluirse en la simulación. Este valor es un vector, se debe ingresar usando [] y debe ser un número natural.
- "timechange": El/Los momento/s donde se desea que haya un cambio de comportamiento en algún pozo (cambios de taza, de tipo de pozo, de perforados, etc.), por ello solo aquellos valores que sean especificados en este vector pueden ser usados en el parámetro "time" de "schedule" (explicado mas adelante). Es importante anotar que "timeimp" debe contener todo valor especificado en "timechange".
- "schedule": Contiene toda la información relacionada con el comportamiento de cada pozo en el tiempo. Posee 11 parámetros que deben ser especificados para cada pozo que se desee añadir. Si se ha seleccionado el modelo de fluido tipo composicional (en la sección "pvtmodel"), y únicamente para los pozos inyectores, aparecen 2 parámetros adicionales como se muestra en la Figura 17. Cada conjunto de parámetros por pozo debe estar incluido entre dos llaves { }. Los parámetros se explican a continuación:

```

"wellcons": {
  "timeimp": [ 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 110, 120 ],
  "wellindex": [ 1, 2 ],
  "timechange": [ 0, 10, 30, 50 ],
  "schedule": [
    {
      "time": 0,
      "well": 1,
      "type": "PRODUCER",
      "injf": "-",
      "radw": 0.2,
      "skin": 0.0,
      "wsop": "BHFP",
      "sche": "CON",
      "vlsp": 2900,
      "numperf": 2,
      "perf": [
        {
          "i": 3,
          "j": 3,
          "k": 3
        },
        {
          "i": 3,
          "j": 3,
          "k": 4
        }
      ]
    }
  ],
  {
    "time": 0,
    "well": 2,
    "type": "INJECTOR",
    "injf": "GAS",
    "radw": 0.27,
    "skin": 0.0,
    "wsop": "QGSC",
    "sche": "CON",
    "vlsp": 16.8,
    "numperf": 2,
    "perf": [
      {
        "i": 11,
        "j": 3,
        "k": 2
      },
      {
        "i": 11,
        "j": 3,
        "k": 3
      }
    ]
  }
]
},

```

Figura 16. Ejemplo de configuración de pozos en una malla 13x14x6.

- **"time" [t]**: El momento en el cual se van a implementar los diferentes cambios al pozo que corresponda. Siempre debe especificarse la condición inicial al tiempo cero.
- **"well" [-]**: El identificador del pozo especificado en **"wellindex"** al cual se le va a implementar los cambios para el momento asignado.
- **"type"**: El carácter del pozo. Esta condición puede variar con el tiempo para un mismo pozo. Existen 2 opciones disponibles:

```
{
  "time": 0,
  "well": 1,
  "type": "INJECTOR",
  "injf": "WAT",
  "radw": 1.0,
  "skin": 0.0,
  "qlty": -0.1,
  "injt": 353.15,
  "wsop": "QWSC",
  "sche": "CON",
  "vlsp": 0.5,
  "indexcomp": [ 5 ],
  "vifc": [ 1.0 ],
  "numperf": 1,
  "perf": [
    {
      "i": 1,
      "j": 1,
      "k": 1
    }
  ]
},
```

Figura 17. Ejemplo de configuración de un pozo inyector con un modelo de fluido composicional.

- **"PRODUCER"**: Para asignarle un carácter productor al pozo.
- **"INJECTOR"**: Para asignarle un carácter inyector al pozo.
- **"injf"**: El fluido de inyección del pozo. Existen 3 opciones disponibles:
 - **"WAT"**: Agua.
 - **"GAS"**: Gas.
 - **"OIL"**: Petróleo.

- **"-"**: Etiqueta que debe usarse si el pozo es productor.
- **"radw" [L]**: El radio del pozo.
- **"skin" [-]**: El factor de daño adimensional del pozo.
- **"qlty" [-]**: Calidad del vapor inyectado. Se usan valores negativos para indicar fluido subenfriado y valores mayor a la unidad para indicar fluido sobrecalentado.
- **"injt" [-]**: Temperatura del vapor inyectado.
- **"wsop"**: La condición de operación del pozo. Existen 5 opciones disponibles:
 - **"BHFP"**: Presión de fondo constante.
 - **"QGSC"**: Caudal de gas constante a condiciones estándar.
 - **"QGRC"**: Caudal de gas constante a condiciones de yacimiento.
 - **"QOSC"**: Caudal de aceite constante a condiciones estándar.
 - **"QORC"**: Caudal de aceite constante a condiciones de yacimiento.
 - **"QWSC"**: Caudal de agua constante a condiciones estándar.
 - **"QWRC"**: Caudal de agua constante a condiciones de yacimiento.
 - **"QLSC"**: Caudal líquido constante a condiciones estándar.
 - **"QLRC"**: Caudal líquido constante a condiciones de yacimiento.
 - **"QTSC"**: Caudal total constante a condiciones de estándar.
 - **"QTRC"**: Caudal total constante a condiciones de yacimiento.
 - **"SHUT"**: Pozo cerrado.
- **"sche"**: Permite configurar el comportamiento de la condición de operación de un pozo en el tiempo (**"wsop"**). Se utiliza para determinar qué tan brusco va a ser el cambio de condición del pozo. Este cambio siempre ocurre entre el valor de tiempo actual y el siguiente, pero nunca con el anterior. Puede elegirse entre 2 opciones:
 - **"CON"**: Cambio instantáneo entre ambos valores.

- **"INT"**: Interpolación lineal entre ambos valores.
- **"vlsp" [p], [q_g] y [q_L]**: Es el valor numérico de la condición operativa **"wsop"**.
- **"indexcomp" [-]**: (Solo modelo composicional) Vector de índices de los componentes numerados en la tabla de composición en la sección **"pvtmodel"** presentes en el fluido de inyección. Es un vector, debe ir entre corchetes [].
- **"vifc" [-]**: (Solo modelo composicional) Vector de composición global del fluido de inyección. Es un vector, debe ir entre corchetes [] y la suma de todos sus elementos debe ser exactamente 1.
- **"numperf"**: La cantidad de perforados del pozo, debe ser un número natural. En este simulador un perforado se simula como un bloque del yacimiento a través del cual fluidos ingresan o salen del yacimiento a través de los pozos.
- **"perf"**: Es un vector que contiene todas las coordenadas de los perforados del pozo en cuestión. Cada perforado se debe encerrar en llaves { } y especificando al frente de **"i"**, **"j"** y **"k"** la coordenada del bloque deseado.

4.9. Propiedades relacionadas a componentes adicionales, **"species"**

En esta sección se deben especificar las condiciones y propiedades relacionadas a las especies químicas que van a interactuar con el yacimiento durante la simulación. La estructura para esta sección está compuesta por 7 elementos: **"config"**, **"properties"**, **"output"**, **"transfer"**, **"modifiers"**, **"numcont"** y **"wellcons"**, como se muestra en la Figura 18. En este caso no se muestra cada parámetro de manera explícita dado que el resultado es demasiado grande. A continuación, se explica brevemente el contenido de cada una:

- **"config"**: Se especifican los componentes de la simulación, y las fases en las cuales se encuentran presentes.
- **"properties"**: Se especifican las propiedades físicas propias de cada especie.
- **"output"**: Se indican las variables de salida relacionadas a cada componente.
- **"transfer"**: Contiene los parámetros relacionados a las transferencias de masa de cada componente (si aplica) entre las fases especificadas.

- **"modifiers"**: Se usa para indicar si algún componente modifica alguna propiedad del yacimiento (p ej. Viscosidad, curvas Kr, etc.).
- **"numcont"**: Complemento al control numérico, especificando parámetros para cada componente.
- **"wellcons"**: Complemento a la información de pozos, especificando parámetros para cada componente.

```

"species": {
  "config": { ...
  },
  "properties": { ...
  },
  "output": { ...
  },
  "transfer": { ...
  },
  "modifiers": { ...
  },
  "numcont": { ...
  },
  "wellcons": { ...
  }
}

```

Figura 18. Estructura sección **"species"**.

La herramienta DFT-UPGRADING TOOL fue pensada para trabajar con la inyección de nanocatalizadores en procesos térmicos, donde se pueden hacer inyecciones de nanopartículas con propósitos catalíticos.

4.9.1. Subsección configuración "config"

Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección para el caso de inyecciones dispersas simultaneas de surfactantes y nanopartículas.

```

"config": {
  "numspe": 1,
  "names": [ "NANOPARTICLE" ],
  "ref_phase": [ "WAT" ],
  "phases": [
    [ "OIL", "GAS", "WAT", "SITE1", "SITE2" ],
    [ "0.0", "0.0", "NEQ", "NEQ", "NEQ" ]
  ]
},

```

Figura 19. Ejemplo de la estructura de la subsección "config".

A continuación, se explica cada parámetro:

- **"numspe" [-]**: Número de componentes. Debe ser un número natural, y para los casos presentados igual a 2.
- **"names"**: Nombres de los componentes que participan de la simulación. Es un vector, debe ir entre corchetes []. El orden en que se ingresa cada componente en este parámetro es importante ya que determina su índice, el cual es utilizado mas adelante para especificar otros parámetros.
- **"ref_phase"**: Fase de referencia de cada componente, es la fase que siempre se va a resolver en el sistema de ecuaciones. Debe aparecer un elemento por cada especie y en el mismo orden correspondiente en el parámetro **"names"**. Es un vector, debe ir entre corchetes []. Las opciones disponibles solo pueden ser fases fluidas:
 - **"OIL"**: Fase oleica.
 - **"GAS"**: Fase gaseosa.
 - **"WAT"**: Fase acuosa.
- **"phases"**: Matriz que indica en cual fase se encuentra presente cada componente. La primera fila debe contener el nombre de las fases, solo pueden aparecer las fases definidas en la sección **"initialset"**. Luego, debe aparecer una fila por cada componente definido en **"names"**, en la cual puede aparecer una de las siguientes opciones:
 - **"0.0"**: El componente nunca estará presente en dicha fase.
 - **"EQ"**: El componente se encuentra presente en dicha fase y se resuelve con relaciones de equilibrio.

- **"NEQ"**: El componente se encuentra presente en dicha fase y se resuelve con relaciones de no equilibrio.

4.9.2. Subsección propiedades "properties"

Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección se muestra en la Figura 20 donde el orden en el que se especifican las propiedades depende del orden de cómo se ingresaron en **"config"** para el caso ejemplo 1 es surfactante y 2 es nanopartícula.. A continuación, se explica cada parámetro:

- **"#"** [-]: Es el índice identificador de cada especie, dentro de él deben aparecer todos los parámetros correspondientes a cada caso. A continuación, se explican los parámetros de cada caso.

Propiedades comunes:

- **"molecular_weight"** [MW]: Peso molecular de la especie.

Propiedades nanopartículas:

- **"diameter"** [L]: Diámetro de las nanopartículas.
- **"beta"** [-]: Coeficiente de área superficial.
- **"density"** [ρ]: Densidad de la nanopartícula.

Propiedades Sfoamer (surfactante):

- **"specific_gravity"** [-]: Gravedad específica del surfactante.

```

"properties":{
  "1":{
    "molecular_weight": 0.25,
    "specific_gravity":0.913
  }
  "2": {
    "molecular_weight": 0.06008,
    "diameter": 18,
    "density": 124.8538,
    "beta": 0.9
  }
}

```

Figura 20. Ejemplo de la estructura de la subsección "properties".

4.9.3. Subsección parámetros de salida "output"

La subsección output permite seleccionar las variables de impresión para las especies, Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección se muestra en la Figura 21. A continuación, se explica cada parámetro:

- **"#" [-]**: Es el índice identificador de cada especie, dentro de él deben aparecer todos los parámetros correspondientes a cada caso. A continuación, se explican los parámetros de cada caso.
- **"reservoir"**: Un vector que contiene todas las variables de salida relacionadas con las características del yacimiento. Las opciones disponibles son:
 - **"XWAT", "XOIL", "XGAS" y "XROCK"**: Concentración de la especie en la fase acuosa, oleica, gaseosa y rocosa respectivamente. El resultado se obtiene en m/m.

```

"output": {
  "1": {
    "reservoir": [ "XWAT", "XOIL", "XSITE1", "XSITE2" ],
    "well": [ "QWAT", "QWATAC" ]
  }
}

```

Figura 21. Ejemplo de la estructura de la subsección "output".

- **"XSITE1" y "XSITE2"**: (Solo nanopartículas) Concentración de nanopartículas en cada sitio activo. El resultado se obtiene en m/m.

- **"MFWAT", "MFOIL", "MFGAS" y "MFROCK"**: Concentración de la especie en la fase acuosa, oleica, gaseosa y rocosa respectivamente. El resultado se obtiene en m/m.
 - **"well"**: Un vector que contiene todas las variables de salida relacionadas con las características del/los pozos del yacimiento. Las opciones disponibles son:
- **"QWAT", "QOIL" y "QGAS"**: Caudal de la especie en la fase acuosa, oleica y gaseosa respectivamente. El resultado se obtiene en q_o o q_g .
- **"QWATAC", "QOILAC" y "QGASAC"**: Volumen acumulado de la especie en la fase acuosa, oleica y gaseosa respectivamente. El resultado se obtiene en L^3 .
- **"PPMWAT", "PPMOIL" y "PPMGAS"**: Concentración de la especie en la fase acuosa, oleica y gaseosa respectivamente. El resultado se obtiene en ppm's.

4.9.4. Subsección transferencia "transfer"

En la subsección transfer se especifican las cinéticas de transferencia de las especies entre fases, teniendo en cuenta diferentes tipos de fenomenologías. Para el Módulo **DFT-UPGRADING TOOL** se consideran fenómenos de partición, retención, adsorción y desorción de nanocatalizadores. Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección se muestra en la Figura 22.

- **"#" [-]**: Es el índice identificador de cada especie, dentro de él deben aparecer todos los parámetros correspondientes a cada caso. A continuación, se explican los parámetros de cada caso.
- **"model"**: Modelo de transferencia entre fases, para esta herramienta se manejan 4 opciones diferentes:
 - **"SITE1" y "SITE2"**: Modelo de sitio 1 (irreversible) y de sitio 2 (reversible), utilizado para el componente nanopartículas.
 - **"FIRST_ORDER"**: Cinética de transferencia que sigue un modelo de primer orden, utilizado por el componente Sfoamer (surfactante).
 - **"EQUILIBRIUM"**: Relación de equilibrio de la fase en equilibrio con la fase de referencia, utilizado por el componente surfactante.

```

"transfer": {
  "1": [
    {
      "model": "SITE1",
      "origin_phase": 3,
      "destiny_phase": 5,
      "kir": 8.40e-02,
      "s1max": 7.26e-05
    },
    {
      "model": "SITE2",
      "origin_phase": 3,
      "destiny_phase": 6,
      "kra": 2.11e-03,
      "krd": 1.00e-06,
      "s2max": 1.45e-04
    }
  ],
  "2": [
    {
      "model": "FIRST_ORDER",
      "origin_phase": 3,
      "destiny_phase": 4,
      "xs": [ 0, 1.41548628571429E-09 ],
      "xsmeq": [ 0, 0.00000001 ],
      "ks": [ 0.0001, 0.0001 ]
    },
    {
      "model": "FIRST_ORDER",
      "origin_phase": 4,
      "destiny_phase": 3,
      "xsmeq": [ 0, 1.41548628571429E-09 ],
      "xs": [ 0, 0.00000001 ],
      "ks": [ 0.0001, 0.0001 ]
    }
  ]
},
},
"transfer": {
  "1": [
    {
      "model": "SITE1",
      "origin_phase": 3,
      "destiny_phase": 5,
      "kir": 8.40e-02,
      "s1max": 7.26e-05
    },
    {
      "model": "SITE2",
      "origin_phase": 3,
      "destiny_phase": 6,
      "kra": 2.11e-03,
      "krd": 1.00e-06,
      "s2max": 1.45e-04
    }
  ],
  "2": [
    {
      "model": "EQUILIBRIUM",
      "phase": 1,
      "ref_pressure": [ 14.7, 4000 ],
      "ref_temperature": [ 15, 300 ],
      "coefficients": [
        [ 60, 60 ],
        [ 60, 60 ]
      ]
    },
    {
      "model": "FIRST_ORDER",
      "origin_phase": 3,
      "destiny_phase": 4,
      "xs": [ 0, 0.001, 0.04 ],
      "xsmeq": [ 0.00E+00, 0.0001, 0.0007 ],
      "ks": [ 0.0001, 0.0001, 0.0001 ]
    },
    {
      "model": "FIRST_ORDER",
      "origin_phase": 4,
      "destiny_phase": 3,
      "xs": [ 0.00E+00, 0.0001, 0.007 ],
      "xsmeq": [ 0, 0.0001, 0.04 ],
      "ks": [ 0.001, 0.001, 0.001 ]
    }
  ]
},
},

```

Figura 22. Ejemplo de la estructura de la subsección "transfer".

A continuación, se explica cada parámetro según el tipo de fenómeno:

Modelo de sitio activo 1 y 2

- **"origin_phase" [-]**: Índice de la fase de origen de la transferencia. Debe ser un número natural.

- "destiny_phase" [-]: Índice de la fase de destino de la transferencia. Debe ser un número natural.
- "kir" [-]: Constante de retención irreversible.
- "s1max" [-]: Capacidad de retención máxima en la zona irreversible.
- "kra" [-]: Constante de retención reversible (deposición).
- "krd" [-]: Constante de retención reversible (remoción).
- "s2max" [-]: Capacidad de retención máxima en la zona reversible.

Modelo de primer orden

- "origin_phase" [-]: Índice de la fase de origen de la transferencia. Debe ser un número natural.
- "destiny_phase" [-]: Índice de la fase de destino de la transferencia. Debe ser un número natural.
- "xsmeq" [m/m]: Concentración en equilibrio de la especie en fase destino en el punto de equilibrio, la cantidad relativa de la especie retenida en la fase destino a la concentración "xs".
- "xs" [m/m]: Concentración de la especie inyectada sobre la fase origen.
- "ks" [1/t]: Constante de la cinética de transferencia de masa, un valor relacionado con la velocidad con la que se logró llegar al estado de equilibrio a la concentración "xs" especificada.

Modelo de equilibrio

- "phase" [-]: Índice de la fase de equilibrio.
- "ref_pressure" [p]: Presión de referencia.
- "ref_temperature" [T]: Temperatura de referencia.
- "coefficients" [-]: Matriz con los coeficientes de equilibrio a las presiones y temperaturas de referencia.

4.9.5. Subsección modificadores "modifiers"

Esta subsección indica como afecta la presencia de las especies el flujo de las fases, para el módulo DFT-UPGRADING TOOL se considera principalmente cambios de permeabilidades relativas, los efectos del mejoramiento in situ “UPGRADING” y espumamiento. Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección se muestra en la Figura 23. A continuación, se explica cada parámetro:

- **"#"** [-]: Es el índice identificador de cada especie, dentro de él deben aparecer todos los parámetros correspondientes a cada caso. Cada especie puede tener más de un modificador. A continuación, se explican los parámetros de cada caso.
- **"property"**: Es el parámetro que determina la propiedad que se va a ser modificada, dependiendo de que propiedad sea se deben ingresar parámetros diferentes. Para esta herramienta se disponen de tres opciones:
 - **"RELATIVE_PERMEABILITY"**: Se utiliza para simular un cambio de permeabilidad relativa debido a la presencia del componente.

```

"modifiers":{
  "1":[
    {
      "property": "RELATIVE_PERMEABILITY",
      "max_ref_conc":0.001,
      "rockfluid":{
        "type": "TAB",
        "flowunits":{
          "1":{
            "ogtable":{
              "sg":[ ...
            ],
            "krg":[ ...
            ],
            "kro":[ ...
            ],
            "pcgo":[ ...
            ]
          },
          "owtable":{
            "sw":[ ...
            ],
            "krw":[ ...
            ],
            "kro":[ ...
            ],
            "pcow":[ ...
            ]
          }
        }
      }
    }
  ]
},

```

Figura 23. Ejemplo de la estructura de la subsección "modifiers".

A continuación, se explica cada parámetro según el tipo de modificador:

Modificador de permeabilidad relativa por nanopartículas y surfactante

- **"max_ref_conc"** [m/m]: La máxima concentración de referencia utilizada para medir las curvas Kr.
- **"rockfluid"**: Este elemento es explicado a detalle en el numeral 4.4.

"Upgrading":

- **"reactions"**: Arreglo con la información de cada reacción
- **"name"**: nombre de la reacción.
- **"ref_phase"**: Fase de referencia.
- **"reactants"**: Reactante
- **"products"**: Productos
- **"stoich_coef_reac"**: coeficiente estequiométrico reactantes
- **"stoich_coef_prod"**: coeficiente estequiométrico productos
- **"reaction_order"**: orden de la reacción
- **"preexpfactor"**: Factor pre-exponencial correspondiente a un parámetro cinético de la reacción
- **"activation_e"**: Energía de activación correspondiente a un parámetro cinético de la reacción
- **"enthalpy"**: Entalpia de reacción
- **"adsorption"**: esta sección incluye la adsorción de los componentes reactivos sobre la nanopartícula.
 - **"type"**: se define el tipo de curva que describe la adsorción del componente reactivo. En este momento se encuentra solo la opción de "Langmuir"

- **"ref_temp"**: temperatura a la que se introduce la isoterma de adsorción
- **"ref_conc"**: valores de concentración en equilibrio del componente que se puede adsorber.
- **"adsorbed"**: valores de adsorción correspondientes a las concentraciones de equilibrio.

```

"property": "UPGRADING",
  "reactions_number": 3,
  "reactions": {
    "1": {
      "name": "ASF-RES",
      "ref_phase": "OIL",
      "reactants": [ 6 ],
      "products": [ 5 ],
      "stoich_coef_reac": [ 1 ],
      "stoich_coef_prod": [ 3.052643 ],
      "reaction_order": 1,
      "preexpfactora": 0.0,
      "preexpfactor": 8.28E+14,
      "activation_e": 181125.36,
      "enthalpy": 100.2,
      "adsorption": {
        "type": "LANGMUIR",
        "ref_temp": [ 1175.67 ],
        "ref_conc": [ 0, 100, 500, 1000, 1200, 1500, 1800, 2000, 5000, 10000, 20000 ],
        "adsorbed": [
          [ 0, 10.39, 50, 95.45, 112.5, 136.95, 160.16, 175, 350, 525, 700 ]
        ]
      }
    }
  }
}

```

Figura 24. Ejemplo de la estructura de la subsección Upgrading de **"modifiers"**.

"FOAM_krg": Modelamiento de la espuma. Los parámetros requeridos son los siguientes:

- **"fmmob"**: parámetro relacionado a la resistencia al flujo de las espumas (varía entre 0 y 100000).
- **"sfbet"**: parámetro que controla la transición entre dos regímenes e espumas diferentes (varía entre 0 y 100000).
- **"sf"**: saturación de agua crítica (varía entre 0 y 1).

- **"epsurf"**: exponente que controla la nitidez de la zona de transición (varía entre -4 y 4)
- **"fmsurf"**: Fracción molar del componente crítico relacionado al surfactante (varía entre 0 y 1)
- **"fmoil"**: saturación critica de aceite donde la espume se destruye (varía entre 0 y 1).
- **"floil"**: saturación de aceite más baja (varía entre 0 y 1)
- **"epoil"**: exponente que controla la saturación de aceite (varía entre 0 y 5)
- **"fmcap"**: numero capilar de referencia (valores entre 0 – 1)
- **"epcap"**: exponente que controla el efecto del número capilar sobre la movilidad del gas (varía entre -10 y 10)

```
{
  "property": "FOAM_krg",
  "fmmob": 20,
  "sfbet": 200,
  "sf": 0.2,
  "epsurf": 1e-10,
  "fmsurf": 0.00001,
  "fmoil": 0.2,
  "floil": 0.05,
  "epoil": 1,
  "fmcap": 1e-22,
  "epcap": 1
}
```

Figura 25. Ejemplo de la estructura de **"FOAM_krg"** para el modelo de espumas.

4.9.6. Subsección control numérico "numcont"

Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección para cualquier caso que utilice dos especies se muestra en la Figura 26. A continuación, se explica cada parámetro:

- **"type"**: Tipo de tolerancia. Existen varias opciones, estas se explican a detalle en el numeral 4.9.6.
- **"value" [-]**: El valor de la tolerancia elegida.

```

"numcont": {
  "1": {
    "type": "RXTOL",
    "value": 1e-4
  },
  "2": {
    "type": "STOL",
    "value": 1e-5
  }
},

```

Figura 26. Ejemplo de la estructura de "numcont" para dos especies.

4.9.7. Subsección "wellcons"

Un ejemplo de cómo debe ser la estructura de esta subsección para cualquier caso que utilice dos especies se muestra en la Figura 27. A continuación, se explica cada parámetro:

- **"schedule"**: Contiene toda la información relacionada a las especies químicas con el comportamiento de cada pozo en el tiempo. Posee 2 parámetros que deben añadir por cada tiempo de cambio de condición de pozo mas otros dos adicionales por cada pozo ingresado. Cada conjunto de parámetros debe estar encerrado entre dos llaves { }. Los parámetros se explican a continuación:
 - **"time" [t]**: El momento en el cual se van a implementar los diferentes cambios al pozo que corresponda. Siempre debe especificarse la condición inicial al tiempo cero.
 - **"well" [-]**: El identificador del pozo especificado en **"wellindex"** (numeral 4.8) al cual se le va a implementar los cambios para el momento asignado.
 - **"type"**: El carácter del pozo. Esta condición puede variar con el tiempo para un mismo pozo. Existen 2 opciones disponibles:

- **"RATE"**: Para especificar un caudal de inyección de un componente químico.
 - **"CONC"**: Para especificar una concentración de inyección de un componente químico.
- **"vlxs"**: Es el valor numérico del parámetro elegido en **"type"**.

```

"wellcons": {
  "schedule": [
    {
      "time": 0,
      "well": 1,
      "1": {
        "type": "RATE",
        "vlxs": 0
      },
      "2": {
        "type": "CONC",
        "vlxs": 0
      }
    },
    {
      "time": 0,
      "well": 2,
      "1": {
        "type": "RATE",
        "vlxs": 0
      },
      "2": {
        "type": "CONC",
        "vlxs": 0
      }
    },
    {
      "time": 250,
      "well": 1,
      "1": {
        "type": "RATE",
        "vlxs": 3000
      },
      "2": {
        "type": "CONC",
        "vlxs": 1000
      }
    },
    {
      "time": 250,
      "well": 2,
      "1": {
        "type": "CONC",
        "vlxs": 0
      },
      "2": {
        "type": "CONC",
        "vlxs": 0
      }
    }
  ]
}

```

Figura 27. Ejemplo de la estructura de la subsección **"wellcons"** para dos especies.