



Un modelo ejecutable para la simulación multi-física de procesos de recobro mejorado en yacimientos de petróleo basado en esquemas preconceptuales

Steven Velásquez Chancí

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Minas, Departamento de Ciencias de la Computación y la Decisión
Medellín, Colombia
2019

Un modelo ejecutable para la simulación multi-física de procesos de recobro mejorado en yacimientos de petróleo basado en esquemas preconceptuales

Steven Velásquez Chancí

Tesis de investigación presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magíster en Ingeniería de Sistemas

Director:

Ph.D. Juan Manuel Mejía Cárdenas

Co-Director:

Ph.D. Carlos Mario Zapata Jaramillo

Línea de Investigación:

Ingeniería de Software

Grupos de Investigación:

Dinámicas de Flujo y Transporte en medios porosos

Lenguajes Computacionales

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Departamento de Ciencias de la Computación y la Decisión

Medellín, Colombia

2019

A mi familia, amigos y a todos los que
estuvieron pendientes de este proceso.
¡Se logró!

Agradecimientos

Agradezco a mi Director Juan Manuel Mejía Cardenas por su supervisión y confianza durante este proceso, a mi Codirector Carlos Mario Zapata Jaramillo por su guía y por saberme centrar cuando lo he requerido, a Juan David Valencia Londoño, cuya constante disposición para solucionar mis dudas me ayudaron a llevar un avance continuo, a Felipe Ospina Montoya, cuyo apoyo ha sido invaluable, y a Paola Andrea Noreña Cardona, por su fé, apoyo, asesoría y acompañamiento constante durante el desarrollo de esta Tesis.

Finalmente, agradezco al Departamento de Ciencias de la Computación y la Decisión por financiar mis estudios por medio de la beca de Facultad y a la alianza formada por el Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS), la Agencia Nacional de Hidrocarburos (ANH) y la Universidad Nacional de Colombia por el financiamiento del “Plan Nacional para el Potenciamiento de la Tecnología CEOR con Gas Mejorado Químicamente” bajo el acuerdo 273-2017, dentro del cual se enmarca la investigación asociada a esta Tesis de Maestría.

Resumen

La simulación de procesos de recobro mejorado se rige por las leyes en las que se describe el transporte de fluidos en medios porosos. Existen múltiples propuestas de elaboración de *frameworks* y simuladores para procesos de recobro mejorado. Sin embargo, carecen de trazabilidad de conceptos, procesos y de representación de eventos que surgen de la física. En los Esquemas Preconceptuales (EP) se incluye toda la estructura de un dominio de aplicación y, también se pueden representar los procesos que se dan en tal dominio. Estos, aportan cohesión, consistencia y trazabilidad entre conceptos y procesos. Por lo que, en esta Tesis de Maestría se propone un modelo ejecutable para la simulación de procesos de recobro mejorado basado en esquemas preconceptuales. El modelo ejecutable se valida con el noveno *SPE Comparative Solution Project*. Los resultados del modelo ejecutable se ajustan a los datos reportados en la literatura. El modelo ejecutable propuesto permite trazar consistentemente los conceptos, procesos y eventos presentes en la simulación de procesos de recobro mejorado.

Palabras clave: Modelo Ejecutable, Esquemas Preconceptuales, Simulación de Yacimientos de Petróleo, Procesos de Recobro Mejorado, Representación Basada en Eventos.

Abstract

Enhanced oil recovery (EOR) processes simulation is governed by mass conservation laws. In such laws, flow, accumulation, sources and sinks phenomena in porous media are described. Multiple proposals for framework and simulation elaboration have been defined. However, they lack concepts and processes tracing and event representation for physical phenomena. Preconceptual Schemas (PS) are used for including the complete structure of an application domain and representing processes emerging in such a domain. Cohesion, consistency, and tracing between concepts and processes is obtained by using PS. In this MSc. Thesis an executable model for enhanced oil recovery processes simulation based on preconceptual schemas is proposed. The executable model is validated by running the ninth SPE Comparative Solution Project. The results are in accordance with data reported in the literature. The proposed executable model allows for tracing consistently the concepts, processes, and events, which are present in EOR processes simulation.

Palabras clave: Executable Models, Preconceptual Schemas, Oil Reservoir Simulation, Enhanced Oil Recovery Processes, Event based Representation.

Contenido

Agradecimientos	IV
Resumen	V
Abstract	VI
Contenido	VII
Lista de figuras	VIII
Lista de tablas	x
1. Introducción	2
2. Marco teórico	4
2.1. El medio poroso	4
2.2. Transporte de fluidos en medios porosos	5
2.2.1. Mojabilidad	5
2.2.2. Presión Capilar	6
2.2.3. Permeabilidad Relativa	6
2.3. Simulación de Yacimientos de Petróleo	6
2.3.1. Modelo <i>Black Oil</i> Extendido	7
2.3.2. Condiciones iniciales	8
2.3.3. Discretización	9
2.3.4. Modelado de Pozos	11
2.3.5. Método de Newton-Raphson	12
2.4. Procesos de Recobro Mejorado	13
2.4.1. Modelado del Químico	13
2.5. Esquemas Preconceptuales	13
2.5.1. Elementos del Esquema Preconceptual	13
2.5.2. Esquemas Preconceptuales en el contexto del software científico	16
2.6. Modelo Ejecutable	18
3. Planteamiento del Problema	20
3.1. Antecedentes	20

3.2. Problema	21
3.3. Objetivos	23
3.3.1. Objetivo general	23
3.3.2. Objetivos específicos	23
4. Propuesta de solución	24
4.1. Subrutinas que define el analista	24
4.2. Operadores sobre arreglos	25
4.3. Conceptualización	25
4.3.1. Malla	26
4.3.2. Malla aparece	26
4.3.3. Roca	27
4.3.4. Fluido	27
4.3.5. Interacción entre fluidos	28
4.3.6. Relación de Equilibrio	29
4.3.7. Pozo	30
4.3.8. Ecuación	31
4.4. Representación en EP de la simulación de procesos EOR	31
4.4.1. Tiempo pasa	31
4.4.2. Presión del Fluido varía	32
5. Validación y Resultados	49
5.1. Traducción a C++ y consistencia	49
5.2. Simulación y resultados	50
6. Conclusiones y trabajo futuro	54
6.1. Conclusiones	54
6.2. Trabajo futuro	54
A. Anexo: Discretización de las Ecuaciones del BOM	55
B. Anexo: Traducciones a código de la representación	58
C. Anexo: Nombrar el anexo C de acuerdo con su contenido	59
D. Sizas Tikz	61
Bibliografía	63

Lista de Figuras

2-1. Medio poroso y volumen de elemento representativo.	4
2-2. Esquemático de un yacimiento cerrado.	9
2-3. Esquemático de pozo multiperforado.	11
2-4. Aproximación a la derivada de una función.	13
2-5. Elementos del EP.	14
2-6. Elementos para la representación de Software Científico.	16
2-7. Ejemplo de Condiciones Iniciales.	17
2-8. Ejemplo de Conceptos tipo arreglo.	17
2-9. Ejemplo de parámetros.	17
2-10. Ejemplo de vector independiente.	18
2-11. Ejemplo de función, cálculo del potencial.	19
4-1. Subrutina Modificar Variable.	24
4-2. Índice de acceso “*” en arreglos.	25
4-3. Ejemplos de operadores sobre arreglos.	25
4-4. Conceptos principales en la simulación.	26
4-5. Definición de la malla.	34
4-6. Representación de la aparición de la Malla.	35
4-7. Caracterización de la Roca.	36
4-8. Función “Calcular propiedad compresible”.	36
4-9. Caracterización del fluido.	37
4-10. Caracterización del fluido.	37
4-11. Adición de Interacción entre fluidos.	38
4-12. Función “Calcular Baker”.	39
4-13. Adición de Relaciones de equilibrio.	40
4-14. Perforación de Pozos.	41
4-15. Representación en EP de la simulación de procesos EOR.	42
4-16. Diagrama basado en el grafo de interacción de eventos.	43
4-17. Representación del paso del tiempo.	44
4-18. Especificación del evento Presión del fluido varía.	45
4-19. Actualización de propiedades al término actual.	46
4-20. Recálculo de Propiedades al término actual para la iteración.	46
4-21. Cálculo de residual para la iteración.	47

4-22. Cálculo y armado de la matriz del jacobiano al término actual para la iteración.	47
4-23. Sistema lineal resultante del método de Newton-Raphson.	48
4-24. Recálculo de Propiedades al término actual para la iteración.	48
5-1. Validación 5 bloques.	52
D-1. gg	61
D-2. gg izi	62
D-3. gg	62

Lista de Tablas

3-1. Síntesis de la revisión de literatura.	22
5-1. Traducción a código de las condiciones iniciales.	50
5-2. Arreglos que conforman la base de datos que se emula.	50
5-3. Traducción a código del concepto Malla.	51
5-4. Traducción a código del concepto Roca.	51
5-5. Traducción a código de la relación dinámica “Petrofísico caracteriza Roca”. .	52
5-6. Traducción a código del cálculo de residual en el evento “Presión del Fluido Varía”.	53

1. Introducción

La simulación de yacimientos de petróleo es una aplicación del flujo de fluidos en medios porosos. En esta, se estudia a nivel macroscópico el desplazamiento de los fluidos a través de una roca porosa y, que se debe a cambios de presión y saturación, efectos gravitacionales, capilares, entre otros. Tales fenómenos se rigen por las leyes de conservación de la masa o el volumen, las cuales se describen como un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acoplado.

Un modelo de simulación que se usa en la industria es el *Black Oil Model* (BOM), en este se considera el transporte de tres fluidos que se caracterizan a condiciones de barril estándar y que tienen compresibilidad. En el BOM también se consideran términos de fuentes y sumideros, los cuales se modelan como pozos. La solución analítica del sistema que se describe es inviable, por lo que se requiere una solución numérica. Para ello, se discretiza el dominio espacial y se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas sobre una celda y su conjunto de caras. El sistema que resulta es no lineal y se resuelve aplicando Newton-Raphson (Atkinson, 2008).

Los Esquemas Preconceptuales (EP) son representaciones intermedias que sirven para establecer un punto común de comprensión entre un interesado y un analista de software (Zapata, 2007). Estos, tienen elementos que permiten representar la estructura del dominio y los procesos o acciones que se dan en el mismo. Calle (2016) y, Noreña y Zapata (2018b) extienden la notación de los EP para contextos de software científico, los cuales tienen dominios de aplicación de mayor complejidad.

Los modelos matemáticos aparecen en todo esfuerzo de desarrollo de un simulador o *framework* de simulación para procesos de recobro mejorado. Además de los modelos matemáticos, se elaboran otras representaciones en las que se muestran los conceptos, flujos de los procesos, pero no son trazables y carecen de elementos para representar eventos. Las propuestas que consideran la trazabilidad son específicas de la implementación de su respectivo *framework* o simulación. Todo esto, confluye en que los simuladores de yacimientos para procesos de recobro mejorado se realicen de manera empírica.

Noreña y Zapata (2018a), Noreña y Zapata (2018b), Durango *et al.* (2018) y Noreña y Zapata (2019) exponen el potencial de los EP para representar diferentes dominios de

aplicación en software científico. Se logra evidenciar que en sus representaciones se mantiene la cohesión entre los elementos presentes en cada dominio, conservando así, la trazabilidad entre conceptos. Adicionalmente, en las propuestas que se enuncian, se logra trazar todo el proceso en el mismo esquema.

En esta Tesis de Maestría se desarrolla un modelo ejecutable para la simulación multifísica de procesos de recobro mejorado en yacimientos de petróleo basado en esquemas preconceptuales. El modelo ejecutable consta de ocho conceptos principales, tres eventos en los que se procesa la simulación y múltiples funciones en las que se incluyen las porciones de la representación que se reutilizan. Posteriormente, se presenta la traducción de las porciones más representativas del modelo ejecutable a código C++.

Conforme a lo anterior, esta Tesis se estructura de la siguiente manera: en el Capítulo 2, se presenta el marco teórico para la caracterización del dominio; en el Capítulo 3 se plantea el problema y se definen los objetivos de esta Tesis; en el Capítulo 4 se propone el modelo ejecutable para la simulación de procesos de recobro mejorado como solución al problema; en el Capítulo 5 se valida el modelo ejecutable con un caso de literatura; finalmente, en el Capítulo 6 se presentan las conclusiones y el trabajo futuro.

2. Marco teórico

2.1. El medio poroso

La física en que se apoya la simulación de yacimientos de petróleo incluye el concepto de medio poroso. Un medio poroso se puede entender como un dominio espacial que ocupa parcialmente un sólido y una porción que ocupan los fluidos, a la que se le llama espacio vacío o poroso. Un yacimiento es un medio poroso que ocurre naturalmente, una formación geológica del subsuelo, que, a nivel microscópico, se compone por una red de poros que se pueden interconectar y que permiten almacenar fluidos (Bear, 2018).

La definición de medio poroso se extiende de la definición de un medio continuo. Un medio continuo, es aquel que no pierde sus propiedades cuando se divide infinitamente, es decir, sus propiedades son continuas en todo punto. Sin embargo, esta definición depende del nivel de observación. A nivel microscópico, si se toman medidas de espacio poroso en diferentes puntos, es posible encontrar unas zonas vacías y otras ocupadas por la roca. Por otro lado, al incrementar el tamaño de la muestra para la medida, es posible notar que las medidas toman valores menos oscilatorios, tal como se muestra en la Figura 2-1. El mínimo tamaño de muestra al que el espacio poroso empieza a tomar un valor constante se le llama volumen de elemento representativo (REV, Bear (2018)). El espacio poroso medido en un REV se denota porosidad (ϕ), que corresponde a la capacidad de almacenamiento de fluidos a nivel macroscópico.

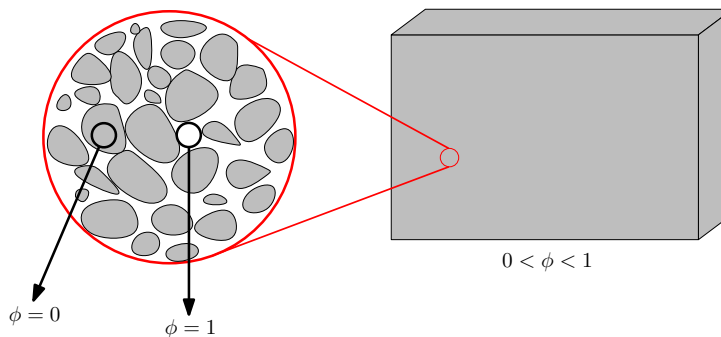


Figura 2-1.: Medio poroso y volumen de elemento representativo. Elaboración a partir de Bear (2018).

2.2. Transporte de fluidos en medios porosos

Los fluidos que se almacenan en un yacimiento, en general, se encuentran en un estado estable, el cual se afecta con la aplicación de diferentes campos actuando sobre el dominio físico (el medio poroso). Así, los fluidos se pueden desplazar debido a efectos gravitacionales, cambios de presión y saturación o capilaridad, entre otros.

El flujo macroscópico de los fluidos se rige por la ley de conservación de momentum en medios porosos o ley de Darcy que se enuncia en la ecuación 2-1. En esta ley se establece que la velocidad Darcy (\vec{u}) de un fluido es proporcional a los gradientes de presión y gravitacionales ($\nabla\Phi$ con $\Phi = p + \rho gz$) de un fluido, e inversamente proporcional a su viscosidad (μ). Además, depende de la conductividad del medio poroso, a la cual se le denomina permeabilidad absoluta (\mathbb{K}) (Fanchi, 2002; Whitaker, 1986).

$$\vec{u} = \frac{\mathbb{K}}{\mu} (\nabla\Phi) \quad (2-1)$$

donde $\mathbb{K}(\vec{x}, t)$ es una propiedad direccional con $\vec{x} = (x, y, z)$:

$$\mathbb{K} = \begin{pmatrix} k_{xx} & & \\ & k_{yy} & \\ & & k_{zz} \end{pmatrix} \quad (2-2)$$

Estas ecuaciones se aplican para un solo fluido. En el caso de múltiples fluidos ocupando el espacio poroso se usa la ecuación 2-3, en la cual, se introduce un término de permeabilidad relativa ($kr_f(S_f)$), que depende de la fracción del volumen poroso que ocupa un fluido, la cual se denomina saturación (S_f).

$$\vec{u}_f = \frac{\mathbb{K}kr_f}{\mu_f} \nabla\Phi_f \quad (2-3)$$

2.2.1. Mojabilidad

En la mojabilidad se mide la preferencia de la superficie de una roca cuando se moja por determinado fluido o por una combinación de fluidos (mojabilidad intermedia) (Chen, 2007). El fluido de preferencia o “fluido mojante” se atrapa en los poros más pequeños de la roca, generando una capa del fluido sobre la superficie de la misma (Chen, 2007). A la fracción del fluido que se queda atrapado en la roca se le denomina “saturación irreducible” (S_{fc}) (Chen, 2007).

2.2.2. Presión Capilar

Cuando existe flujo de dos fluidos, se genera una discontinuidad en la presión de ambos, la cuál se denomina “presión capilar”. Ésta se calcula como la resta de la presión del “fluido no mojante” con la del “fluido mojante” (Chen, 2007; Fanchi, 2002). En la Ecuación 2-4 se presenta el cálculo de la “presión capilar”.

$$p_c = p_{\text{fluido no mojante}} - p_{\text{fluido mojante}} \quad (2-4)$$

La presión capilar es función de la saturación de uno de los fluidos que se relaciona, según el caso: $p_c(S_f)$. En el caso de un sistema de tres fluidos, se requieren dos presiones capilares (Chen, 2007).

2.2.3. Permeabilidad Relativa

La permeabilidad relativa (k_r) es una relación o fracción de movimiento de un fluido respecto a otro u otros (Chen, 2007). Cuando sólo existen dos fluidos, la permeabilidad relativa es función directa de la saturación del fluido correspondiente ($k_{rf}(S_f)$). Sin embargo, cuando hay tres o más fluidos, ésta puede depender de otras saturaciones ($k_{rf}(S_f, \dots)$) (Chen, 2007). Cuando existen tres fluidos en un yacimiento de petróleo, obtener información experimental que relacione la permeabilidad relativa conjunta es difícil. En práctica, lo que se hace es medir permeabilidades relativas entre dos fluidos, es decir, los “contactos”, e interpolar la permeabilidad del fluido de mojabilidad intermedia entre ellas. (Zuo *et al.*, 2014).

Existen múltiples métodos de interpolación para obtener la permeabilidad relativa del fluido con más de un contacto (Blunt, 2000; Delshad y Pope, 1989; Zuo *et al.*, 2014). Para el desarrollo de esta Tesis de Maestría se usa la interpolación de Baker (1988), la cuál se muestra en la Ecuación 2-5.

$$k_{ro}(S_g, S_w) = \frac{(S_w - S_{wc}) k_{row} + (S_g - S_{gc}) k_{rgo}}{(S_w - S_{wc}) + (S_g - S_{gc})} \quad (2-5)$$

En un sistema de agua, gas y petróleo, se obtiene la permeabilidad relativa del petróleo al agua $k_{row}(S_w)$ y la permeabilidad relativa del petróleo al gas $k_{rgo}(S_g)$ y se pondera la permeabilidad relativa del petróleo por la saturación del gas y del agua (Baker, 1988).

2.3. Simulación de Yacimientos de Petróleo

El dominio de la simulación de yacimientos de petróleo se enmarca dentro del contexto del desarrollo de software científico referido a procesos industriales y de investigación de nuevas

tecnologías (Kelly, 2015); los cuales requieren la implementación de modelos matemáticos complejos que representan múltiples fenómenos físicos y químicos entre los fluidos. La simulación de yacimientos de petróleo se rige por las leyes de conservación de la masa y del momentum. En estas leyes se describe la acumulación, transporte, fuentes y sumideros de los fluidos como un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas para un dominio físico. La solución analítica de estos sistemas, cuando es viable, requiere condiciones que se alejan de los problemas reales (Ertekin *et al.*, 2001). Por ello, es necesario una solución numérica o simulación. Un modelo de simulación que se usa en la industria es el *Black Oil Model*.

2.3.1. Modelo *Black Oil* Extendido

El *Black Oil Model* (BOM) es un modelo de conservación de volumen a condiciones estándar, en el cual, se considera la existencia de tres fluidos en el medio poroso: aceite, gas y agua. En el BOM, se asume que el aceite o petróleo tiene condiciones de barril estándar, es decir, presión y temperatura atmosférica (Chen, 2007). Además, se supone que no existen variaciones considerables en la composición del aceite y del gas (Abou-Kassem *et al.*, 2006; Chen, 2007; Ertekin *et al.*, 2001). En éste modelo se considera que puede existir una transferencia de masa en equilibrio desde aceite al gas, lo que se denomina “Gas disuelto”. Adicionalmente, en el modelo *Black Oil* extendido, se considera una transferencia de masa desde el gas al aceite, lo que se denomina “aceite volatilizado”. Las siguientes son las ecuaciones de conservación de volumen del BOM (Abou-Kassem *et al.*, 2006; Chen, 2007; Ertekin *et al.*, 2001).

$$\text{aceite: } \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] - \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) - \tilde{q}_o = 0 \quad (2-6)$$

$$\text{gas: } \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_g}{B_g} + \frac{R_s S_o}{B_o} \right) \right] - \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_g} \vec{u}_g + \frac{R_s}{B_o} \vec{u}_o \right) - \tilde{q}_g = 0 \quad (2-7)$$

$$\text{agua: } \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_w}{B_w} \right) \right] - \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_w} \vec{u}_w \right) - \tilde{q}_w = 0 \quad (2-8)$$

donde \vec{u}_f corresponde a la velocidad Darcy y \tilde{q}_f a los aportes de fuentes y sumideros, que posteriormente se modelan como pozos, para el fluido $f = \{o : \text{aceite}, g : \text{gas}, w : \text{agua}\}$.

En el BOM se establece, también, que los fluidos tienen una compresibilidad, es decir que cambian su volumen y densidad debido a cambios de presión o transferencia de masa a otros fluidos (gas). La propiedad que se asocia a ese cambio de volumen es el factor volumétrico (B_f) (Chen, 2007).

Para calcular las densidades del gas y del aceite en el BOM extendido, que se requieren en el cálculo de potencial de cada fluido, se tiene en cuenta la masa existente de aceite en el gas y

viceversa. Para esto, se mide una densidad a condiciones estándar y se aplican la siguientes ecuaciones:

$$\rho_o = \frac{\rho_{o,sc} + R_s \rho_{g,sc}}{B_o} \quad (2-9)$$

$$\rho_g = \frac{\rho_{g,sc} + R_v \rho_{o,sc}}{B_g} \quad (2-10)$$

$$\rho_w = \frac{\rho_{w,sc}}{B_w} \quad (2-11)$$

Cabe notar que no se considera existencia de masa de ningún fluido hidrocarburo en el agua, por lo que su densidad sólo depende de su factor volumétrico (B_w) y su densidad a condiciones estándar.

En la versión del *Black Oil Model* que se usa en esta Tesis de Maestría se asume lo siguiente:

- La ley de Darcy es aplicable al tipo de flujo (Número de Reynolds ≤ 1) (Takhanov, 2011).
- El estado de los yacimientos que se simulan es sobresaturado (Chen, 2007).
- No hay segregación de fluidos.

Ecuaciones constitutivas

En el BOM se consideran tres ecuaciones gobernantes, en las cuales se involucran seis incógnitas a resolver ($P_o, P_g, P_w, S_o, S_g, S_w$) para el sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas que se establece. Por tanto, se requieren ecuaciones adicionales en las que se relacionen las incógnitas libres. Esas ecuaciones son la restricción de volumen y las dos ecuaciones de capilaridad.

$$S_o + S_g + S_w = 1 \quad (2-12)$$

$$P_{cgo} = P_g - P_o \quad (2-13)$$

$$P_{cow} = P_o - P_w \quad (2-14)$$

En esta Tesis de Maestría se consideran las siguientes incógnitas (P_o, S_g, S_w). Así, usando la Ecuación 2-12, se obtiene $S_o = 1 - S_g - S_w$, a partir de la Ecuación 2-13 se logra $P_g = P_o + P_{cgo}$, y de la Ecuación 2-14 se despeja $P_w = P_o - P_{cow}$.

2.3.2. Condiciones iniciales

En el desarrollo de esta Tesis de Maestría se consideran yacimientos con condiciones de borde cerradas o Neumann cero para todas las fronteras, es decir, no existen acuíferos

aportando presión o caudal en yacimiento. Las diferencias de presión se generan por la presencia de pozos productores e inyectores. En la Figura 2-2 se ejemplifica un yacimiento con condiciones de borde cerradas.

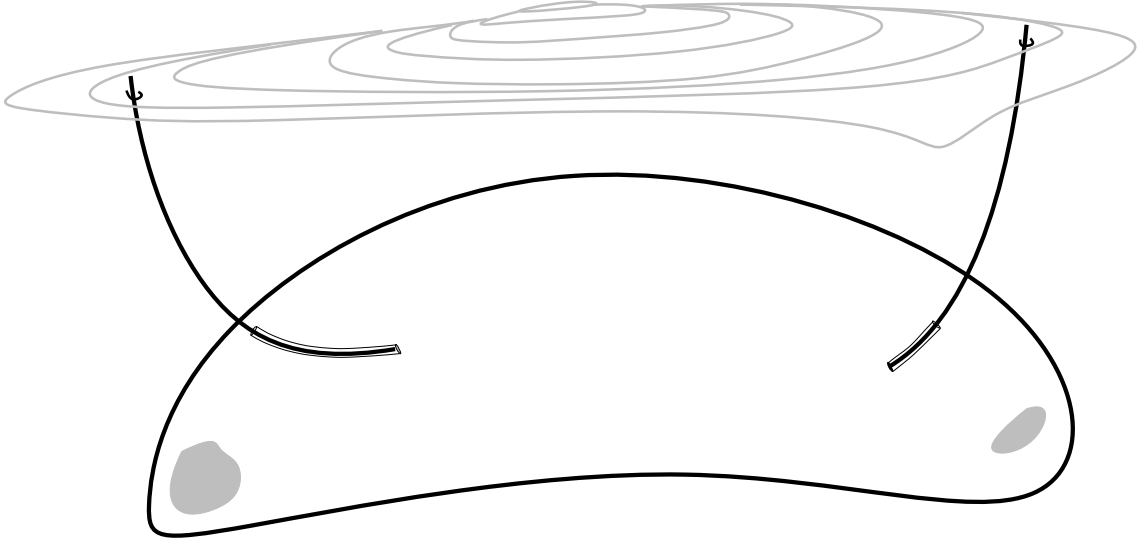


Figura 2-2.: Esquemático de un yacimiento cerrado. Los autores.

Además para un tiempo $t = 0$ se tiene que:

$$P_f(\vec{x}, 0) = P_f^0(\vec{x}) \quad \forall f \in \{o, g, w\} \quad (2-15)$$

$$S_f(\vec{x}, 0) = S_f^0(\vec{x}) \quad \forall f \in \{o, g, w\} \quad (2-16)$$

Es decir, existe funciones en el espacio que describen las condiciones iniciales de presión $P_f^0(\vec{x})$ y saturación $S_f^0(\vec{x})$ para los fluidos f del yacimiento.

2.3.3. Discretización

Existen múltiples métodos numéricos para resolver las ecuaciones diferenciales parciales que se describen en el BOM, tales como las diferencias finitas (FDM), los volúmenes finitos (FVM), los elementos finitos (FEM), entre otros. Éstos consisten en construir un sistema de ecuaciones algebraicas para un dominio discreto, es decir, con un número finito de celdas o volúmenes de control, a partir de un dominio físico continuo, cuya solución se aproxime a la del sistema de ecuaciones diferenciales parciales original. Al proceso de construir el sistema de ecuaciones algebraico para dominios discretos se le llama discretización. En la Figura ?? se muestra un ejemplo de un dominio discreto.

Para las ecuaciones diferenciales que son dependientes del tiempo, como lo son las de BOM, se requiere, también, obtener un conjunto finito de intervalos de tiempo, para los cuales

resolver las ecuaciones. Así, para un término $F(t)$ dependiente del tiempo, su integral en un intervalo $[t; t + \Delta t]$ se puede expresar, usando el teorema del valor medio como:

$$\int_t^{t+\Delta t} F(t)dt = F_m|\Delta t| \quad (2-17)$$

donde $F_m = F(t^*)$ denota el valor promedio de la función F , con $t^* \in [t; t + \Delta t]$. Este t^* no se conoce, por tanto, se necesita una aproximación numérica para calcular tal valor promedio. Según la aproximación que se tome, se define el esquema de aproximación para el tiempo. Pudiendo ser:

- Esquema Explícito

$$F_m = F^n = F(t_n) = F(t) \quad (2-18)$$

- Esquema Implícito

$$F_m = F^{n+1} = F(t_{n+1}) = F(t + \Delta t) \quad (2-19)$$

- Esquema Crank-Nicholson

$$F_m = \frac{F(t_n) + F(t_{n+1})}{2} = \frac{F(t) + F(t + \Delta t)}{2} \quad (2-20)$$

En esta Tesis de Maestría se elige el método de los volúmenes finitos (FVM) para la discretización espacial de las ecuaciones 2-6, 2-7 y 2-8 y un esquema implícito (2-19) para la discretización del tiempo, es decir, elección del tiempo al $n + 1$ (futuro). El proceso de discretización se muestra en el anexo A. Para una celda con índice i con superficie S como un conjunto de caras c , la discretización de las ecuaciones es la siguiente:

$$\underbrace{\frac{|\Omega_i|}{\Delta t} \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_n^{n+1}}_{\text{Acumulación - Aceite}} + \underbrace{\sum_{c \in S} [T_{o,c}^{n+1} \Delta \Phi_{o,c}^{n+1} + R_{v,c} T_{g,c}^{n+1} \Delta \Phi_{g,c}^{n+1}] - Q_{o,i}^{n+1}}_{\text{Flujo - Aceite}} = 0 \quad (2-21)$$

$$\underbrace{\frac{|\Omega_i|}{\Delta t} \left[\phi_i \left(\frac{S_{g,i}}{B_{g,i}} + \frac{R_{s,i} S_{o,i}}{B_{o,i}} \right) \right]_n^{n+1}}_{\text{Acumulación - Gas}} + \underbrace{\sum_{c \in S} [T_{g,c}^{n+1} \Delta \Phi_{g,c}^{n+1} + R_{s,c} T_{o,c}^{n+1} \Delta \Phi_{o,c}^{n+1}] - Q_{g,i}^{n+1}}_{\text{Flujo - Gas}} = 0 \quad (2-22)$$

$$\underbrace{\frac{|\Omega_i|}{\Delta t} \left[\phi_i \left(\frac{S_{w,i}}{B_{w,i}} \right) \right]_n^{n+1}}_{\text{Acumulación - Agua}} + \underbrace{\sum_{c \in S} [T_{w,c}^{n+1} \Delta \Phi_{w,c}^{n+1}] - Q_{w,i}^{n+1}}_{\text{Flujo - Agua}} = 0 \quad (2-23)$$

dónde:

$$\begin{aligned} \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_n^{n+1} &= \phi_i^{n+1} \left(\frac{S_{o,i}^{n+1}}{B_{o,i}^{n+1}} + \frac{R_{v,i}^{n+1} S_{g,i}^{n+1}}{B_{g,i}^{n+1}} \right) - \phi_i^n \left(\frac{S_{o,i}^n}{B_{o,i}^n} + \frac{R_{v,i}^n S_{g,i}^n}{B_{g,i}^n} \right), \\ \left[\phi_i \left(\frac{S_{g,i}}{B_{g,i}} + \frac{R_{s,i} S_{o,i}}{B_{o,i}} \right) \right]_n^{n+1} &= \phi_i^{n+1} \left(\frac{S_{g,i}^{n+1}}{B_{g,i}^{n+1}} + \frac{R_{s,i}^{n+1} S_{o,i}^{n+1}}{B_{o,i}^{n+1}} \right) - \phi_i^n \left(\frac{S_{g,i}^n}{B_{g,i}^n} + \frac{R_{s,i}^n S_{o,i}^n}{B_{o,i}^n} \right), \\ \left[\phi_i \left(\frac{S_{w,i}}{B_{w,i}} \right) \right]_n^{n+1} &= \phi_i^{n+1} \left(\frac{S_{w,i}^{n+1}}{B_{w,i}^{n+1}} \right) - \phi_i^n \left(\frac{S_{w,i}^n}{B_{w,i}^n} \right) \end{aligned}$$

El término $T_{f,c}$ en la Ecuación 2-24 corresponde a la transmisividad en una cara c que conecta una celda i con otra celda j .

$$T_{f,c} = \left(\frac{2}{(\Delta l_i / A_c K_{l,i}) + (\Delta l_j / A_c K_{l,j})} \right) \frac{k_{rf,c}}{\mu_{f,c} B_{f,c}} \quad (2-24)$$

2.3.4. Modelado de Pozos

Los pozos son el principal objeto de estudio de la simulación de yacimientos de petróleo, debido a que en ellos, se concentra el propósito de cualquier operación de campo. Éstos tienen dos tipos, inyector o productor, y se forman por un conjunto de bloques perforados en los que existe un flujo radial (Peaceman, 1983). Peaceman (1983) describe el flujo en pozos con varias capas de perforados como se muestra en la Ecuación 2-25. En la Figura 2-3 se ilustra un pozo vertical con múltiples perforados.

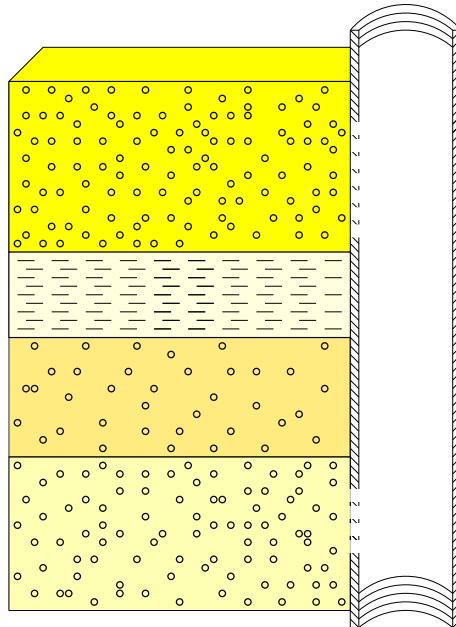


Figura 2-3.: Esquemático de pozo multiperforado. Elaboración a partir de Chen (2007).

$$q_{f,sc}^{(v)} = \sum_{m=1}^{M_w^{(v)}} \frac{2\pi k_{rf,m} \rho_{f,m} \sqrt{k_{xx,m} k_{yy,m} h_{z,m}}}{B_{f,m} \mu_{f,m} (\ln(r_{e,m}/r_w) + s_m)} \left(p_{bh}^{(v)} - p_{p,m} - \gamma_{f,bh} (z_{bh}^{(v)} - z_m) \right) \delta(x - x_m^{(v)}) \quad (2-25)$$

Donde v corresponde al índice del pozo, M_w a la cantidad de perforados y m al índice de cada perforado, que debe coincidir con el de una celda; y P_p es la presión del perforado.

Además, los pozos se controlan por condiciones operativas, que permiten mantener un régimen conocido de presión o caudal, tanto en inyección como producción. Las condiciones operativas también dependen del tipo del pozo. Sin embargo, en esta Tesis de Maestría sólo se consideran dos tipos de condición operativa, presión y caudal a condiciones estándar. Donde, para un pozo productor es caudal de líquido, es decir, caudal de aceite más el de agua; y para un pozo inyector es el caudal del fluido de inyección. Luego para el caudal de un pozo productor:

$$q_{prod,sc}^v = q_{o,sc}^v + q_{w,sc}^v \quad (2-26)$$

Donde $q_{f,sc}^v$ para $f \in \{o, w\}$ se calcula usando la Ecuación 2-25.

Para un pozo inyector, se necesita calcular la movilidad del fluido de inyección, sumando las movilidades de los fluidos que debe desplazar en el mismo, porque el influjo está dominado por los fluidos que se desplazan. Por tanto, el caudal de inyección es:

$$q_{iny,sc}^{(v)} = \sum_{m=1}^{M_w^{(v)}} \left(\sum_{f \in F} \frac{k_{rf,m}}{\mu_{f,m}} \right) \frac{2\pi \rho_{iny,m} \sqrt{k_{xx,m} k_{yy,m} h_{z,m}}}{B_{iny,m} (\ln(r_{e,m}/r_w) + s_m)} \left(p_{bh}^{(v)} - p_{p,m} - \gamma_{iny,bh} (z_{bh}^{(v)} - z_m) \right) \delta(x - x_m^{(v)}) \quad (2-27)$$

Donde iny corresponde al fluido de inyección y $f \in F : \{o, g, w, \dots\}$ a los fluidos en el dominio físico.

2.3.5. Método de Newton-Raphson

El sistema de ecuaciones algebraicas que se forman por 2-21, 2-22 y 2-23 es no lineal, por lo tanto, se aplica el método del Newton-Raphson el cual se usa para encontrar las raíces de una ecuación no lineal aproximando su derivada, como se ilustra en la Figura 2-4.

$$A \cdot \Delta \vec{x} = \vec{b} \Leftrightarrow J_{i,j}^k \cdot \Delta \vec{x} = -\vec{R}_i^k \quad (2-28)$$

$$\Delta \vec{x} = \vec{x}^{k+1} - \vec{x}^k = (\Delta P_o, \Delta S_g, \Delta S_w)^T \quad (2-29)$$

$$-\vec{R}_i^k = \left(\Delta R_{P_o,i}^k, \Delta R_{S_g,i}^k, \Delta R_{S_w,i}^k \right)^T \quad (2-30)$$

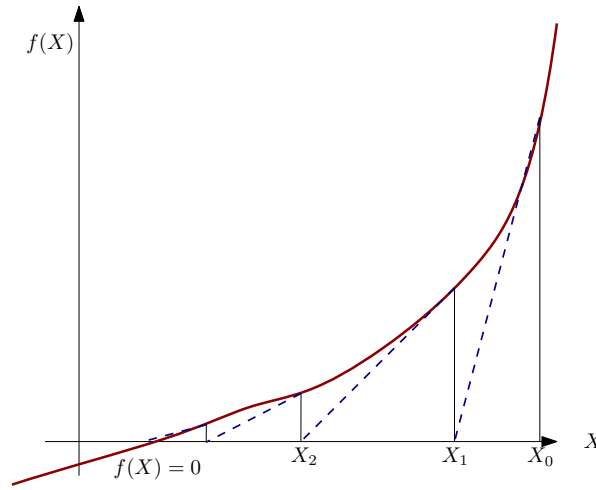


Figura 2-4.: Aproximación a la derivada de una función. **Elaboración a partir de .**

$$J_{i,j}^k = \frac{\partial R_i^k}{\partial x_j^k} \quad (2-31)$$

$$\frac{\partial R^k}{\partial x^k} \approx \frac{R(x^k + \xi) - R(x^k)}{\xi} \quad (2-32)$$

2.4. Procesos de Recobro Mejorado

2.4.1. Modelado del Químico

2.5. Esquemas Preconceptuales

Los Esquemas Preconceptuales (EP) son representaciones intermedias entre el lenguaje natural y un esquema conceptual o un lenguaje formal. Estos esquemas contienen todo el dominio de aplicación de un interesado y, por tanto, sirven para establecer un punto común de entendimiento entre un interesado y un analista de software (Zapata, 2007). Los EP se desarrollan con la idea de mantener la coherencia y consistencia entre el discurso del interesado y el software que se desarrolla.

2.5.1. Elementos del Esquema Preconceptual

Zapata (2012) define los elementos del EP tal como se observa en la Figura 2-5 para la representación del dominio del interesado. Estos elementos se dividen en cuatro categorías: nodos, relaciones, enlaces, y aglutinadores.

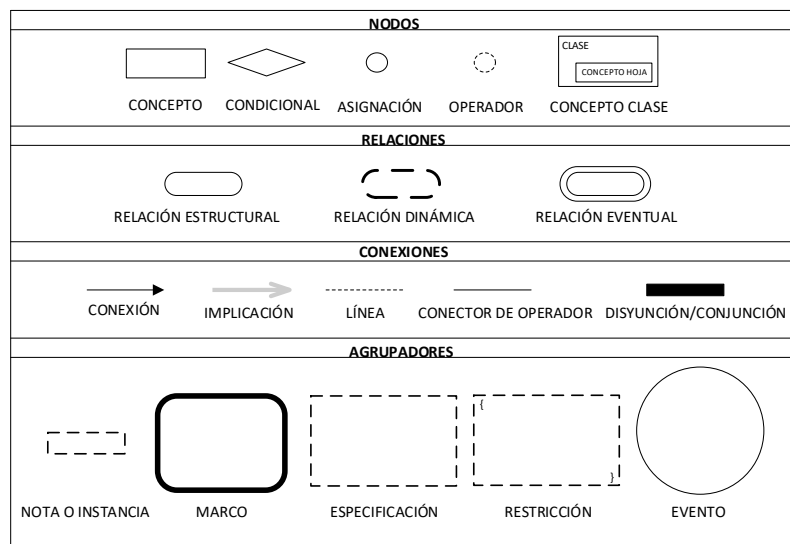


Figura 2-5.: Elementos del EP. (Zapata, 2012).

Nodos

- **Concepto:** sustantivo o sintagma nominal que representa un actor u objeto dentro del dominio del interesado. Se subclasifican en conceptos clase y conceptos hoja, según su jerarquía (Zapata, 2007, 2012).
- **Condicional:** condición para ejecutar una relación dinámica o una especificación a partir de una expresión lógica formada por conceptos o variables, operadores, y valores o parámetros (Zapata, 2007, 2012).
- **Operador:** símbolo lógico o matemático que sirve para formar expresiones a evaluar (Zapata, 2012).
- **Asignación:** Sirve para asignar el valor que resulta de una expresión matemática o lógica (Zapata, 2012).
- **Concepto Clase:** Sirve para representar el acceso a un concepto hoja o atributo desde su concepto contenedor (Zapata, 2007).

Relaciones

- **Relación Estructural:** Relación permanente entre dos conceptos. Se asocia con los verbos “ser” o “tener”, y que significan generalización o agregación, respectivamente (Zapata, 2007, 2012).
- **Relación Dinámica:** Se asocia con verbos que denotan acción u operaciones que modifican el dominio de estudio; permite establecer relaciones transitorias entre el

concepto ejecutor de la acción y el concepto objeto de dicha acción (Zapata, 2007, 2012).

- **Relación Eventual:** Se relaciona con un verbo que denota ocurrencia, el cuál no se asocia a un concepto ejecutor. (Noreña *et al.*, 2018; Zapata, 2012).

Enlaces

- **Conexión:** Es una flecha unidireccional que sirve para conectar conceptos con relaciones dinámicas o estructurales (Zapata, 2007, 2012).
- **Implicación:** Es una línea continua y dirigida que sirve para indicar una relación causa-efecto u orden entre relaciones dinámicas, condicionales o eventos. (Zapata, 2007, 2012).
- **Concepto-Nota:** Sirve para conectar un concepto a una nota o instancia (Zapata, 2007, 2012).
- **Conector de Operador:** Sirve para conectar un valor, concepto, atributo compuesto u otros operadores, a un operador (Zapata, 2012).
- **Conjunción/Disyunción:** Sirve para agrupar o bifurcar implicaciones, estableciendo una causalidad conjunta o múltiples efectos (Zapata, 2007, 2012).

Aglutinadores

- **Nota o Instancia:** Sirve para limitar los valores para un concepto a un conjunto predefinido (Zapata, 2007, 2012).
- **Especificación:** Sirve para agrupar un conjunto de operaciones que describen una relación dinámica o eventual (Zapata, 2012).
- **Marco:** Sirve para asociar múltiples relaciones dinámicas a una responsabilidad o para agrupar conceptos (Zapata, 2012).
- **Restricción:** Sirve para establecer una condición sobre una especificación de operaciones (Zapata, 2012). Adicionalmente, se usa para establecer ciclos sobre conceptos o condiciones (Chaverra, 2011).
- **Evento:** Es una ocurrencia que habilita cambios de estado en los procesos (Zapata *et al.*, 2013).

2.5.2. Esquemas Preconceptuales en el contexto del software científico

Calle (2016) y Noreña y Zapata (2018b) descubren la capacidad del EP para representar aplicaciones en el contexto del software científico. Para ello, definen elementos adicionales que permiten modelar dominios de mayor complejidad. En esta Tesis de Maestría se usan las condiciones iniciales, conceptos tipo arreglo, parámetros, variables, vectores, operadores predefinidos, operador “*push*”, operador “*type*”, y funciones que define el analista. En la Figura 2-6 se representan los elementos previamente mencionados. A continuación, se explican los elementos adicionales que se usan en el desarrollo de esta Tesis de Maestría.

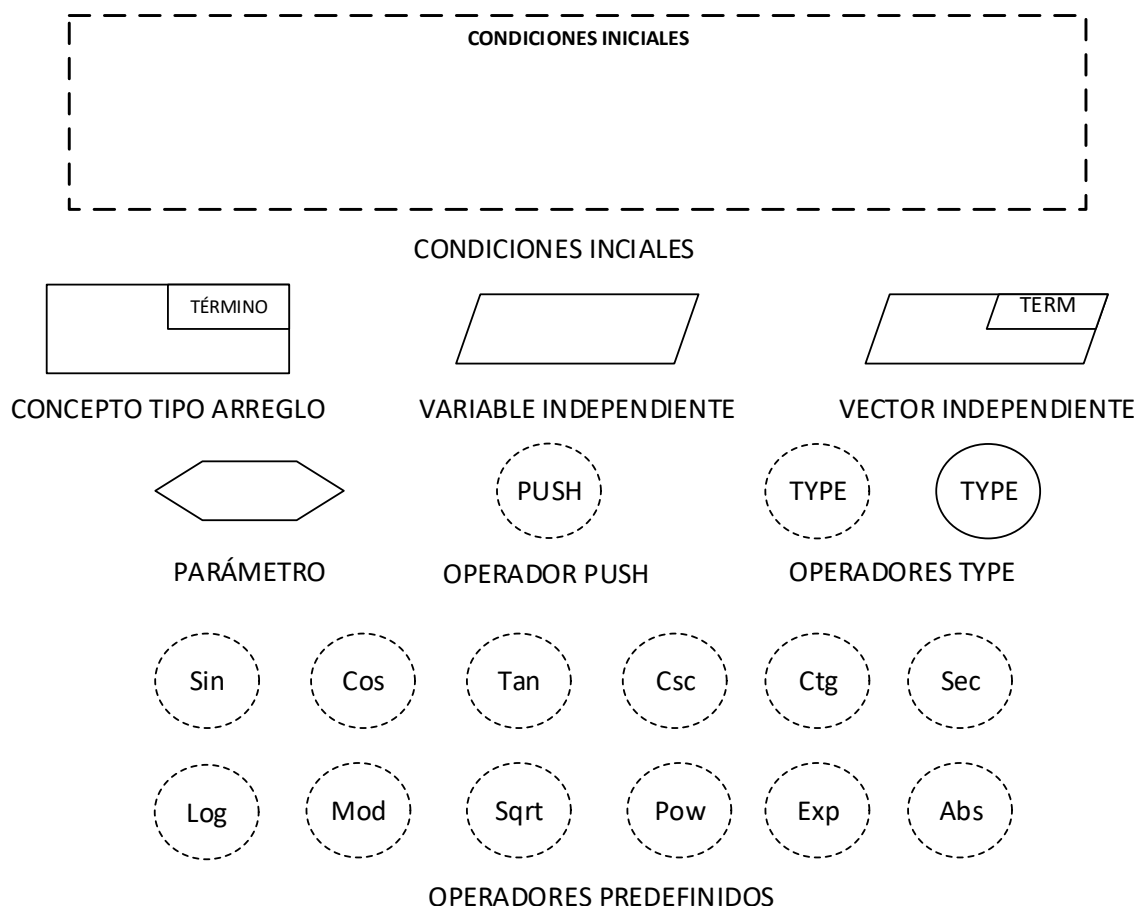


Figura 2-6.: Elementos para la representación de Software Científico. (Calle, 2016; Noreña y Zapata, 2018b).

Condiciones Iniciales

Las condiciones iniciales son especificaciones, de variables y parámetros globales, que se conoce desde el inicio de la simulación (Noreña y Zapata, 2018b). Un ejemplo de uso se presenta en la Figura 2-7.

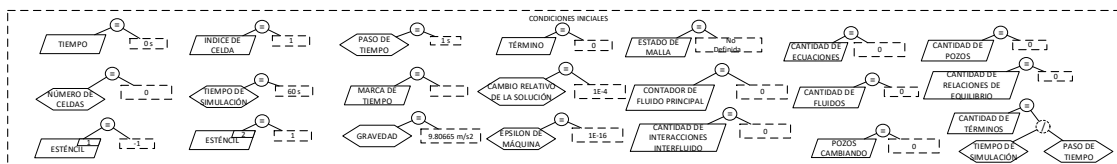


Figura 2-7.: Ejemplo de Condiciones Iniciales. Los autores.

Concepto tipo arreglo

Los conceptos tipo arreglo permiten almacenar de manera permanente múltiples valores, y a su vez, iterar sobre ellos (Calle, 2016). En esta Tesis de Maestría se usan conceptos tipo arreglos multidimensionales. En la Figura 2-8 se expone un ejemplo de su uso.

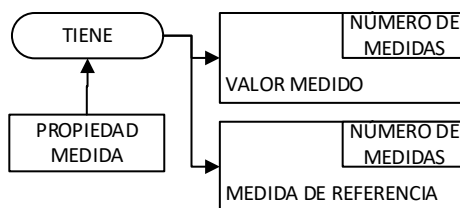


Figura 2-8.: Ejemplo de Conceptos tipo arreglo. Los autores.

Parámetro

Los parámetros se usan para almacenar constantes o definir entradas en la especificación de relaciones dinámicas, especificaciones de tipo marco y funciones, que reciben múltiples argumentos o parámetros (Calle, 2016; Noreña y Zapata, 2018b). Se expone un ejemplo de uso en la Figura 2-9.

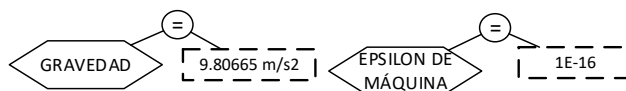


Figura 2-9.: Ejemplo de parámetros. Los autores.

Variable Independiente

Las variables independientes permiten almacenar valores durante la ejecución de una especificación sin estar acopladas a un concepto. Si se definen en las condiciones iniciales, se pueden usar de manera global durante toda la simulación (Noreña y Zapata, 2018b). En la Figura 2-7 se pueden ver ejemplos de variables independientes.

Vector independiente

Los vectores independientes cumplen la misma tarea y propiedades de las variables independientes, pero permiten almacenar más de un valor (Noreña y Zapata, 2018b). Un ejemplo de vector independiente se presenta en la Figura 2-10.

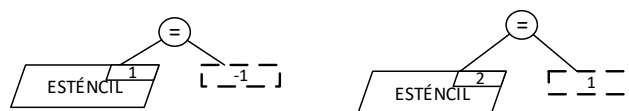


Figura 2-10.: Ejemplo de vector independiente. Los autores.

Operadores Predefinidos

Son funciones algebraicas y trigonométricas predefinidas que se pueden usar como operadores en el EP (Calle, 2016).

Operador *Push*

El operador *Push* sirve para insertar, valores, conceptos o parámetros dentro de un concepto tipo arreglo, el elemento que se inserta queda en la última posición del arreglo (Calle, 2016).

Operador *Type*

El operador *Type* tiene dos versiones: una como operador de asignación y otra como operador de información. En el caso de la asignación, sirve para otorgarle el tipo de una subclase a un concepto. Mientras que en el de información, permite consultar si el tipo del concepto corresponde con el tipo de una subclase definida (Calle, 2016).

Funciones que define el analista

Las funciones que define el analista son especificaciones reutilizables en el EP a modo de un operador personalizado cuyo nombre define el analista. Estas funciones llevan en su especificación un concepto “*return*” que corresponde al valor que devuelve la función cuando se usa como operador (Calle, 2016). En la figura 2-11 se presenta un ejemplo de definición y uso de una función que define el analista.

2.6. Modelo Ejecutable

Un modelo ejecutable es una abstracción que permite describir y definir la conceptualización y comportamiento de un dominio real o hipotético de estudio. Además, cuentan con semánticas que permiten definir acciones (Stephen J. Mellor, 2002). El EP se

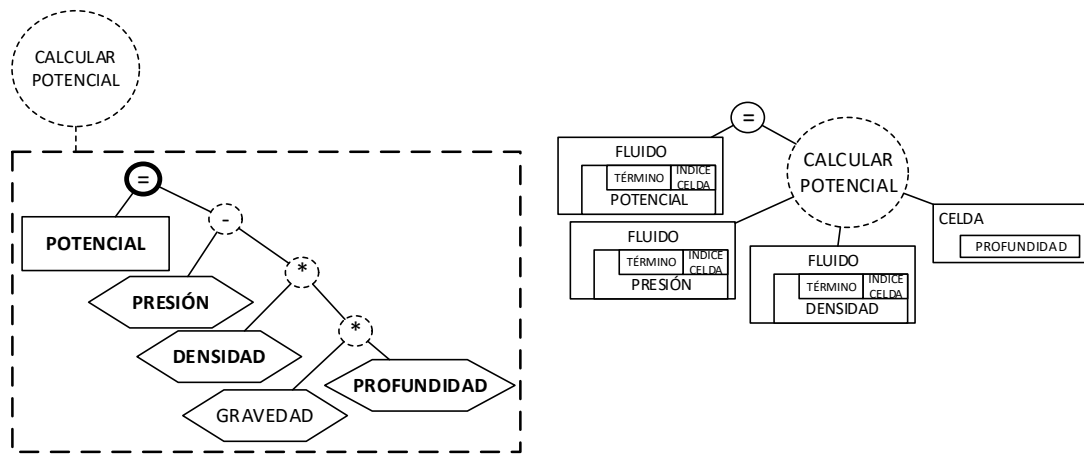


Figura 2-11.: Ejemplo de función, cálculo del potencial. Los autores.

enmarca dentro de esta definición, puesto que los EP ejecutables tienen elementos que permiten representar acciones que se procesan internamente en el modelo (Chaverra, 2011).

3. Planteamiento del Problema

3.1. Antecedentes

A continuación se mencionan los autores que presentan modelos matemáticos en el área de la simulación de procesos de recobro mejorado e ilustran el dominio de aplicación con diversas representaciones. Valencia (2016) y Valencia *et al.* (2018) desarrollan un modelo de simulación para la generación de espumas *in situ* inyectando químicos dispersos en gas, describiendo los fenómenos físicos y mecanismos, de los fluidos y del químico inyectado, que se presentan en el yacimiento. Adicionalmente, presentan las ecuaciones de su modelo matemático y un diagrama de flujo del proceso de solución de las mismas. Sin embargo, los conceptos que se enuncian en su modelo conceptual y matemático no son trazables en sus diagramas y no tienen representación de los eventos que resultan de los fenómenos físicos que se modelan. Mozo (2017) elabora un modelo de inyección de nanopartículas para la estimulación de pozos, empleando un modelo conceptual para explicar los fenómenos que se describen en su modelo matemático. Además, explica el proceso de solución de las ecuaciones de su modelo por medio de un algoritmo. Esta propuesta carece de trazabilidad en los conceptos que se explican. Isaza (2017) desarrolla un modelo de remediación del daño que generan los asfaltenos, presentando el modelo conceptual para una simulación de tipo *Black Oil* al que se le agrega el transporte de los asfaltenos en el petróleo y su transferencia a la roca. También, se presenta un algoritmo genérico de solución de las ecuaciones que se muestran en el modelo matemático. Por último, Solano *et al.* (2019) presenta un modelo de generación de espumas para aplicación en yacimientos naturalmente fracturados, desarrollando un *Black Oil Model* con inyección de un surfactante disperso en una corriente de gas. Para describir los fenómenos físicos que Solano *et al.* (2019) modelan, presentan un mapa conceptual y las ecuaciones de su modelo matemático. Esta propuesta carece de trazabilidad en el proceso de solución de las ecuaciones.

Los siguientes autores elaboran *frameworks* de simulación de yacimientos de petróleo. Sus esfuerzos, se enfocan en la velocidad de computo y procesamiento paralelo. Zaza *et al.* (2016) presenta un simulador *Black Oil* en paralelo utilizando la arquitectura CUDA (*Compute Unified Device Architecture*). En este trabajo, Zaza *et al.* (2016) muestran en un diagrama general la descripción de la solución de las ecuaciones de su modelo matemático, involucrando los conceptos que se relacionan con cada etapa de la solución. También, se muestra el esquema de solución, involucrando conceptos del modelo matemático. Sin

embargo, no todos los conceptos son trazables en su esquema de solución. Wang *et al.* (2016, 2017) desarrollan un simulador *Black Oil* en paralelo para múltiples dominios continuos que incluye modelos de fracturas discretas en yacimientos no convencionales. Además, se presentan todas las ecuaciones del modelo matemático que relaciona los múltiples dominios, aunque carece de representaciones que agrupen los conceptos, fenómenos físicos y procesos de solución. Fang *et al.* (2017) desarrollan un modelo de flujo entre dos dominios para un solo fluido. En este, se calcula un sistema de mallas mezcladas y se definen términos de transmisividad media y total para las transferencias del fluido entre los dominios, ilustrando un diagrama del proceso de solución de los dos dominios de flujo. Sin embargo, no se acoplan todos los conceptos que se definen. Qiao *et al.* (2017) presentan un *framework* multipropósito basado en un modelo composicional para flujo reactivo, desarrollan todo el modelo matemático explicando cómo acoplar nuevos fenómenos. Sin embargo, no tienen elementos de trazabilidad de conceptos ni del proceso de solución de sus ecuaciones. Flemisch *et al.* (2011) desarrollan un *framework* de simulación de yacimientos sobre DUNE (*Distributed and Unified Numerics Environment*; Blatt *et al.* (2016)). La herramienta tiene la capacidad de simular flujo en dos fases con un modelo de múltiples medios continuos. Las variables de los modelos se pueden resolver de manera completamente implícita y acoplada o de manera secuencial, presentando una representación del proceso con los detalles de implementación de los modelos. Sin embargo, no existen elementos que permitan trazar los conceptos presentes en sus modelos matemáticos.

Cao, DeBaun *et al.* (2005) y Zhang *et al.* (2007) tienen elementos de trazabilidad tanto de conceptos como del proceso. Sin embargo, son específicos de la manera en la que implementan sus *frameworks*. Adicionalmente, carecen de elementos para representar eventos que emergen de los fenómenos físicos que se estudian.

En Tabla 3-1 se muestra una síntesis de la revisión de literatura de modelos ejecutables para la simulación de yacimientos de petróleo. Se destaca que existen algunos elementos de trazabilidad, tanto conceptual como del proceso, en los trabajos que se revisan. Sin embargo, faltan elementos de acople que garanticen la cohesión y consistencia de los modelos matemáticos con el método de solución de los mismos. También se evidencia que los trabajos carecen de representación de los eventos que surgen de caracterizar los fenómenos físicos que se estudian en cada trabajo.

3.2. Problema

La simulación de procesos de recobro mejorado requiere la elaboración y solución de modelos matemáticos complejos (Ertekin *et al.*, 2001), que involucran múltiples conceptos

AUTORES	Enfoques			
	Modelos matemáticos	Trazabilidad de conceptos	Trazabilidad del proceso	Representación de eventos
Valencia (2016)	x			
Valencia <i>et al.</i> (2018)	x			
Mozo (2017)	x		x	
Isaza (2017)	x		x	
Solano <i>et al.</i> (2019)	x	x		
Zaza <i>et al.</i> (2016)	x		x	
Wang <i>et al.</i> (2016, 2017)	x			
Fang <i>et al.</i> (2017)	x		x	
Qiao <i>et al.</i> (2017)	x			
Flemisch <i>et al.</i> (2011)	x		x	
Cao	x	x	x	
DeBaun <i>et al.</i> (2005)	x	x	x	
Mohammad <i>et al.</i> (2017)	x			
Wang <i>et al.</i> (2015)	x			
Zhang <i>et al.</i> (2007)	x	x	x	
Wang <i>et al.</i> (2016)	x			
Hu <i>et al.</i> (2013)	x			
Zaydullin <i>et al.</i> (2014)	x			

Tabla 3-1.: Síntesis de la revisión de literatura. Los autores.

para describir los fenómenos físicos, y, que pueden estar presentes en diferentes ecuaciones. Las ecuaciones, a pesar de ser una representación formal, no contienen toda la información relevante a la simulación, por lo que se pierde la trazabilidad de los conceptos que se requieren para representar los fenómenos físicos correctamente. Adicionalmente, existe diversidad de técnicas para solucionar los modelos matemáticos que se elaboran. Por esta razón, hay poca trazabilidad en los procesos de solución. Todo esto repercute en que los simuladores de yacimientos para procesos EOR se desarrollen de manera empírica, sin seguir un estándar.

Los esquemas preconceptuales son herramientas que permiten representar dominios de conocimiento y mantener la cohesión de los elementos presentes en un dominio, puesto que incluyen toda su estructura. Adicionalmente, el mismo esquema sirve para representar el comportamiento dinámico o los procesos que se dan en dicho dominio. Recientes trabajos, muestran el potencial de los esquemas preconceptuales para representar dominios de aplicación en el área del software científico.

Por ejemplo, Noreña y Zapata (2018a) representan eventos temporales usando EPs, y lo ejemplifican con la simulación de un sensor que toma mediciones de temperatura constantemente y modifica el estado de una alerta. Más aún, Noreña y Zapata (2018b) hace uso de los eventos del esquema preconceptual en la representación de eventos determinísticos y aleatorios del tipo señal para un sistema de red de telefonía celular. Luego Durango *et al.* (2018) representan un dominio en ingeniería ambiental para medir el ruido por medio de sonómetros. Posteriormente, Noreña y Zapata (2019) utiliza los esquemas preconceptuales para representar la simulación de una bodega de comida de mar, su proceso de refrigeración y la toma de decisiones respecto a aceptar o no envíos de comida.

Los EPs aportan la cohesión, consistencia y trazabilidad en los conceptos y en el proceso que se requieren para formalizar el desarrollo de un simulador de yacimientos de petróleo para procesos de recobro mejorado. Además, tienen elementos para la representación de eventos.

3.3. Objetivos

3.3.1. Objetivo general

Desarrollar un modelo ejecutable para la simulación multifísica de procesos de recobro mejorado en yacimientos de petróleo basado en esquemas preconceptuales.

3.3.2. Objetivos específicos

- Establecer los fenómenos de transporte, transferencia y de superficie más relevantes durante los procesos de recobro mejorado para yacimientos de petróleo.
- Conceptualizar los elementos del sistema y las interacciones físicas y químicas que se presentan en los procesos de recobro mejorado para yacimientos de petróleo.
- Diseñar una estrategia de solución numérica multipropósito de los sistemas de ecuaciones algebraicas y diferenciales que describen los mecanismos físicos y químicos que gobiernan los procesos de recobro mejorado.
- Construir una simulación basada en esquemas preconceptuales ejecutables.
- Validar los esquemas preconceptuales ejecutables con la literatura.

4. Propuesta de solución

En este Capítulo se propone un modelo ejecutable para la simulación multifísica de procesos de recobro mejorado en yacimientos de petróleo basado en esquemas preconceptuales. Con este fin, se presenta un uso adicional del elemento “función” definido en los EP. Además, se plantea usar operadores sobre arreglos para facilitar el desarrollo de la representación del dominio de la simulación de procesos EOR. Luego, se conceptualizan los términos derivados de las ecuaciones que se presentan en el marco teórico. Posteriormente, se muestra el EP completo de la simulación y se explica por secciones los eventos que procesan la simulación.

4.1. Subrutinas que define el analista

Las subrutinas que define el analista son funciones tal como Calle (2016) propone, pero carecen de un concepto de retorno. Estas utilizan elementos globales y también pueden recibir parámetros adicionales; su representación gráfica es igual a la de una función, pero éstas carecen de asignación cuando se usan como operadores. En la Figura 4-1 se ilustra un ejemplo de subrutina que se usa en el desarrollo de esta Tesis.

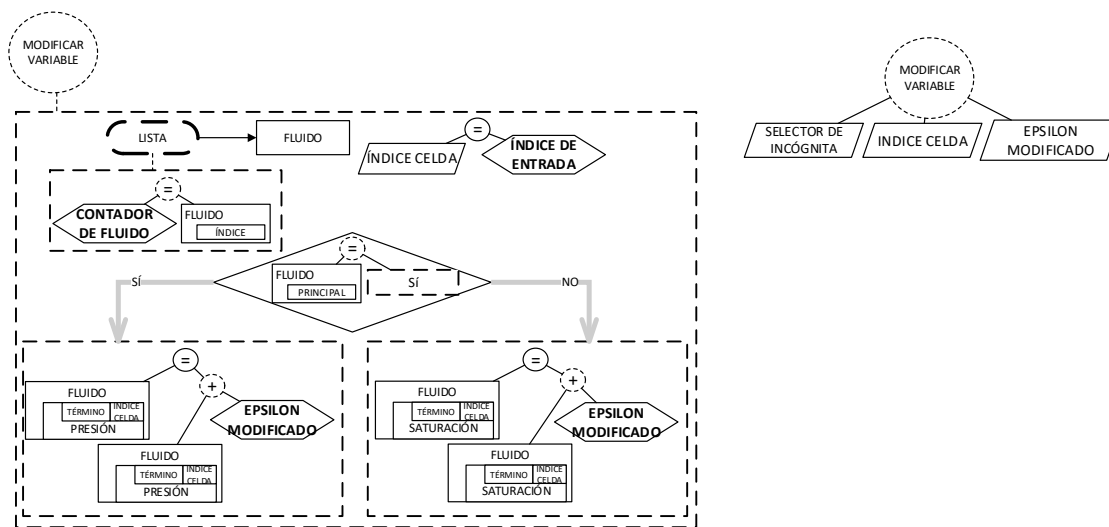


Figura 4-1.: Subrutina Modificar Variable. Los autores.

En la parte izquierda de la Figura 4-1 se ve la definición de la subrutina “Modificar Variable”, mientras que en la derecha se ve su uso en el EP, que posteriormente aparece en

el evento “Presión del fluido varía”. Es posible notar que la subrutina recibe tres parámetros de entrada, el “contador del fluido”, el “índice de entrada” y el “épsilon modificado”. Además, en esta se accede a atributos del concepto fluido; y no tiene concepto de retorno.

4.2. Operadores sobre arreglos

Los operadores sobre arreglos son aquellos que pueden tomar un arreglo por parámetro y evaluar expresiones matemáticas con los elementos del mismo. Para indicar que se está accediendo a todos los elementos del arreglo, se usa un “*” en el índice del mismo, tal como se muestra en la Figura 4-2.

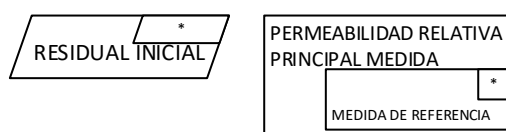


Figura 4-2.: Índice de acceso “*” en arreglos. Los autores.

En la Figura 4-3 se muestran tres ejemplos de uso, uno en conceptos tipo arreglo, y otros dos de arreglos independientes. Se destaca que las operaciones no se definen en el EP. En la programación, éstas se usan desde alguna librería o función del lenguaje.

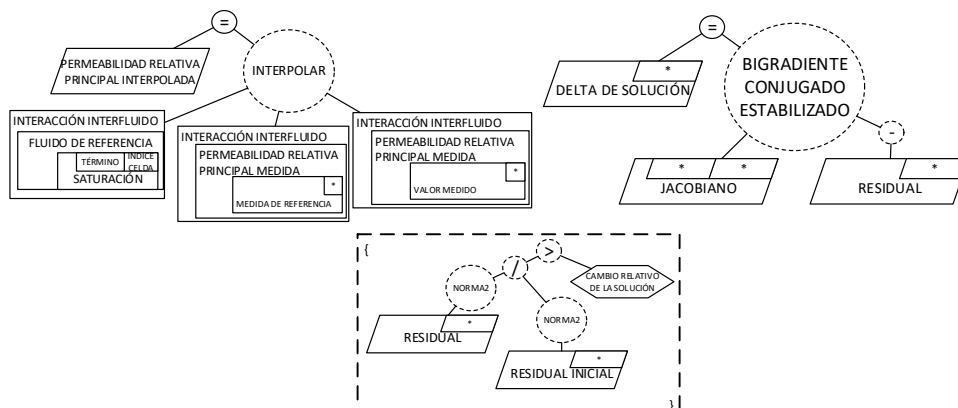


Figura 4-3.: Ejemplos de operadores sobre arreglos. Los autores.

4.3. Conceptualización

En esta sección se explican los conceptos principales que resultan en la traducción de las ecuaciones algebraicas resultantes de la discretización del BOM extendido y las ecuaciones

constitutivas usando el método de los volúmenes finitos. En la Figura 4-4 se presentan los conceptos a explicar.



Figura 4-4.: Conceptos principales en la simulación. Los autores.

4.3.1. Malla

Al resolver el dominio espacial continuo como un conjunto discreto de celdas (discretizar el espacio), aparecen propiedades tales como los volúmenes de las celdas y el área de las caras. Este conjunto discreto de celdas es el que se denomina como “malla”. A su vez, la celda es un conjunto discreto de caras que generan una superficie cerrada¹. Cada celda cuenta con una numeración, que sirve para identificar posiciones en el espacio y ubicar las vecindades correspondientes para el cálculo del flujo discretizado.

Una malla existe a partir de la conceptualización de los elementos emergentes en la discretización, que contiene todas las propiedades necesarias para generar el conjunto de celdas. Además, existe un actor “geomodelador” que se usa para definir el número de celdas en cada eje, sus espesores y topes tal como se presenta en la Figura 4-5. Una vez se definen tales propiedades, la “malla aparece” en un proceso iterativo de creación de la cantidad de celdas y el respectivo cálculo de volúmenes, profundidades y numeración para cada una. Posteriormente, las caras se crean en otro proceso iterativo, conteniendo la información sobre las vecindades de cada celda, donde cada celda tiene un conjunto de caras².

4.3.2. Malla aparece

El evento “Malla aparece” Se dispara cuando el estado de la malla es “Definida”, que sucede justo después de que el geomodelador defina la malla. En este evento, se desarrollan dos ciclos principales. El primer ciclo es anidado por cada eje coordenado, y en total se

¹En el caso tridimensional

²Es posible notar que la cara existente entre dos celdas vecinas se crea dos veces, una por cada celda.

recorre el número de celdas a definir. En este ciclo, se calculan los volúmenes y profundidades de cada celda, además se asigna un índice único de celda y la numeración en cada eje (x, y, z) . La especificación del evento “Malla Aparece” se presenta en la Figura 4-4.

En el segundo ciclo principal, se itera sobre las celdas que se definen previamente y se calcula la conectividad, es decir la definición de caras. Para esto, se consulta la existencia de celdas adyacentes a la celda actual en todas las direcciones. Si existe una celda en alguna dirección, se crea y calcula su área y orientación. Adicionalmente, a la cara se le asigna un índice y también se le asigna la celda vecina. Es importante notar que cada celda almacena su conjunto de caras, por lo que las caras se duplican.

4.3.3. Roca

La especificación de la relación dinámica “petrofísico caracteriza roca” se especifica con la inserción de las condiciones iniciales de “porosidad” y “permeabilidad absoluta” para la roca que se asocia al yacimiento. Es posible notar que, estos atributos de la roca se representan como arreglos por la cantidad de términos, que se derivan de los pasos de tiempo, y la cantidad de celdas definidas en la malla. Adicionalmente, el petrofísico define la “compresibilidad de poro” y la “presión de referencia” a la que ésta se mide para el cálculo de la porosidad a los términos posteriores. El modelo incluye una única roca, a la cual se asignan todas las propiedades de cada una de las celdas. La caracterización de la roca se presenta en la Figura 4-7.

Se considera, además que la “porosidad” es función de la “presión actual” del sistema (Chen, 2007). Y se aproxima en una celda i como:

$$\phi_i \approx \phi_i^0 (1 + C_r (P_{p,i} - P_r)) \quad (4-1)$$

donde ϕ_i^0 corresponde a las condiciones iniciales de porosidad en la celda i , C_r corresponde a la compresibilidad de la roca, P_r a la presión de referencia para esa compresibilidad, y $P_{p,i}$ a la “presión actual”, en la celda i , que se asocia con el fluido que tiene el atributo de principalidad. En la Figura 4-8 se presenta el cálculo de porosidad para cada tiempo que se define como la función “Calcular propiedad compresible” en el EP.

4.3.4. Fluido

Los fluidos tienen propiedades que son funciones de su presión y saturación, las cuales, a su vez, son funciones del tiempo y del espacio. Así, todas las propiedades que se proponen en la conceptualización se representan como arreglos dependientes de la cantidad de términos

y de la cantidad de celdas, tal como se presenta en la Figura 4-9. La representación del fluido, su relación dinámica “ingeniero de fluidos caracteriza fluido” y su respectiva especificación se presentan en la Figura 4-10.

En pos de la generalidad, la “viscosidad” del “fluido” y su “factor volumétrico” se definen como funciones directas de su “presión”. Con este fin, aparece el concepto de “propiedad medida”, el cuál tiene una “medida de referencia” y un “valor medido” a esa referencia. Ambos son arreglos de la “cantidad de medidas”. En la Figura 4-10 también es posible ver que el fluido tiene una “viscosidad medida” y un “factor volumétrico medido”. Esto permite calcular de manera general estas propiedades, independientemente del fluido, como una interpolación en el conjunto de medidas a la presión del fluido correspondiente. El ingeniero de fluidos inserta la viscosidad medida y el factor volumétrico medido cuando “caracteriza el fluido”.

Es importante notar también, que el fluido tiene un “tipo” y un atributo de tipo lógico “principal”. El tipo del fluido puede ser “petróleo”, “gas” o “agua”. Sin embargo, el fluido cuyo atributo principal sea “sí” o “true”, incluye su “presión” en su respectiva ecuación. Los demás fluidos incluyen su “saturación”. Esto permite tener flexibilidad en el modelado de casos de estudio en el que alguno de los fluidos no exista.

4.3.5. Interacción entre fluidos

Las interacciones entre fluidos se proponen como una generalización de los contactos entre fluidos (véase Subsección 2.2.3). En el caso del modelo BOM, se deben especificar dos: los contactos gas-aceite y aceite-agua. En este concepto, se relacionan directamente las dependencias de la “permeabilidad relativa del fluido principal” con su respectivo “fluido de referencia” en el contacto. Además, para el fluido cuya incógnita es la saturación, se relaciona la presión del fluido principal con su respectiva “presión capilar”, con el fin de calcular la presión faltante. Para esto, es necesario saber de antemano cuál es el “fluido mojante” y cuál es el “fluido no mojante”. Adicionalmente, todas las propiedades que se mencionan son “propiedades medidas” que se calculan a la saturación del fluido de referencia. En la Figura 4-11 se presenta la representación propuesta para las interacciones entre fluidos.

La permeabilidad relativa conjunta k_{rp} , es decir, la del fluido principal considerando todos sus contactos, se calcula usando la interpolación de Baker (1988), tal como se presenta en la Ecuación 2-5. Se define la saturación del fluido de referencia como S_r , la saturación irreducible del fluido como S_{rc} , y la permeabilidad relativa del fluido principal al fluido de referencia como k_{rpp} . Así, la interpolación de Baker (1988), en términos de las interacciones entre fluidos *in*, queda:

$$k_{rp} = \frac{\sum_{in \in I} [(S_{r,in} - S_{rc,in}) k_{rpr,in} (S_{r,in})]}{\sum_{in \in I} [(S_{r,in} - S_{rc,in})]} \quad (4-2)$$

La representación de la interpolación de Baker (1988) en la Ecuación 4-2, se ilustra en la Figura 4-12.

4.3.6. Relación de Equilibrio

En las ecuaciones del BOM se considera existencia de masa de gas en el aceite (R_s o gas disuelto), y, en el caso del BOM extendido, la de aceite en el gas (R_v o aceite volatilizado). En el concepto “Relación de equilibrio”, se generaliza la existencia de masa de un fluido dentro de otro fluido con un “coeficiente de partición”. Se postula, también, que existe un “fluido aportante” y un “fluido receptor”, tal como se ve en la Figura 4-13. El coeficiente de partición cumple la mismas condiciones de la viscosidad o el factor volumétrico del fluido. Además, la relación de equilibrio tiene un “coeficiente de partición medido”.

Tal definición de las relaciones de equilibrio tiene implicaciones en el cálculo de la densidad de los fluidos, de la acumulación y del flujo. En el cálculo de densidad de un fluido, se debe considerar la masa de cualquier otro fluido que esté presente dentro del mismo. Así, en el caso concreto del BOM, existe gas en el aceite, y en el BOM Extendido, aceite en el gas. Se recuerdan los cálculos de densidades en 2-9, 2-10, 2-11 como se explican en la Subsección 2.3.1:

$$\begin{aligned} \rho_o &= \frac{\rho_{o,sc} + R_s \rho_{g,sc}}{B_o} \\ \rho_g &= \frac{\rho_{g,sc} + R_v \rho_{o,sc}}{B_g} \\ \rho_w &= \frac{\rho_{w,sc}}{B_w} \end{aligned}$$

En las relaciones de equilibrio se propone que puede existir cualquier transferencia de masa en equilibrio de un fluido a otro. Por tanto, la densidad de un fluido debe calcularse con los aportes de densidad de los fluidos receptores por todas las relaciones de equilibrio en las que éste es el fluido aportante. Tal como se presenta en:

$$\rho_a = \frac{\rho_{a,sc} + \sum_{r \in R} [\chi_{a,r} \rho_{r,sc}]}{B_a} \quad (4-3)$$

donde χ es el coeficiente de partición en el que se relacionan el fluido aportante a , y el fluido receptor r , y R el conjunto de relaciones de equilibrio en las que a es el fluido

aportante. Se destaca que χ es una relación volumétrica a condiciones estándar y es función de la presión del fluido aportante a ($\chi_{a,r}(P_a)$).

Para el cálculo del flujo y de la acumulación, se recuerdan las Ecuaciones que se discretizan del BOM Extendido 2-21, 2-22, 2-23 en las que se considera la existencia de gas disuelto (R_s) y aceite volatilizado (R_v), como se muestra en la Subsección 2.3.1. Éstas ecuaciones se generalizan para un fluido receptor r arbitrario como sigue:

$$\text{Acumulación: } \frac{|\Omega_i|}{\Delta t} \left[\phi_i \left(\frac{S_{r,i}}{B_{r,i}} + \sum_{a \in R} \frac{\chi_{a,r,i} S_{a,i}}{B_{a,i}} \right) \right]_n^{n+1} \quad (4-4)$$

$$\text{Flujo: } \sum_{c \in S} \left[T_{r,c}^{n+1} \Delta \Phi_{r,c}^{n+1} + \sum_{a \in R} \chi_{a,r,c} T_{a,c}^{n+1} \Delta \Phi_{a,c}^{n+1} \right] \quad (4-5)$$

4.3.7. Pozo

Se proponen los pozos, de manera análoga a la malla, como un conjunto de “perforados” que a su vez tienen atributos adicionales como lo son la “presión de fondo” y el “caudal”. Estos pozos, tienen una caracterización distinta según el tipo, sea productor o inyector. Además, es posible notar que el “pozo” es un concepto abstracto, de cuál se instancia uno de los dos tipos. Más aún, los perforados dependerán del tipo de pozo, siendo estos también abstractos, con sus respectivos tipos “perforado inyector” o “perforado productor”. En la Figura 4-14 se presenta la representación de los pozos.

La principal diferencia entre los pozos productores e inyectores radica en que el pozo inyector tiene un “fluido de inyección”. Además, la “tasa” y el “acumulado” del pozo inyector sólo dependen de este fluido, mientras que para el pozo productor dependerá de la cantidad de fluidos caracterizados. Estos pozos están sujetos a la restricción de no cambiar su tipo, además para un pozo productor, su conjunto de perforados corresponderá también a perforados productores. Así, para los pozos inyectores serán perforados inyectores.

Los pozos funcionan bajo una “condición operativa”, que permite regular la presión o el caudal al que estos inyectan o producen fluido. Estas condiciones definen, si un pozo genera una ecuación, o si su caudal se puede resolver directamente usando la presión de fondo. Por otro lado, las condiciones operativas pueden variar en el tiempo. Por esto, se requiere calcular o resolver el atributo que no está sujeto a la condición operativa cada que se establezca un cambio en la condición. En la Figura 4-14 se observa, también.

4.3.8. Ecuación

La ecuación es un concepto agrupador, tanto el fluido como el pozo son ecuaciones (**¡Posteriormente los químicos!**). Este sirve para asociar iterar sobre todos los conceptos que generan un residual en el método de Newton. Tienen un índice y estado. Este último permite que todos los pozos generen ecuación pero no necesariamente se resuelva en el jacobiano. Sólo se resuelven las ecuaciones cuyo estado sea “activo”.

4.4. Representación en EP de la simulación de procesos EOR

En esta sección se propone una representación basada en un EP para procesos EOR. En el esquema 4-15 se evidencia la solución del BOM discretizado usando volúmenes finitos en una malla cartesiana ortogonal. El paso a paso en la ejecución de los eventos se muestra en 4-16. En el evento “Presión del fluido varía” se desarrollan las iteraciones del método de Newton-Raphson e internamente las iteraciones sobre las celdas requeridas para solucionar el sistema algebraico resultante de la discretización. En las secciones siguientes se explica el EP elaborado en las respectivas porciones correspondientes a eventos, subrutinas y funciones que procesan la simulación de procesos EOR.

Para el correcto desarrollo de la simulación, se establecen las siguientes precondiciones: existe una única malla y una única roca. En el caso de una simulación de dos fluidos debe existir una única interacción entre fluidos. En el caso de tres fluidos deben existir exactamente dos interacciones entre fluidos.

4.4.1. Tiempo pasa

El evento “Tiempo pasa” se dispara en el momento en que se tienen las suficientes realizaciones de los conceptos para ejecutar la simulación, es decir, se ejecutaron las mínimas relaciones dinámicas para poder disparar el evento, como se ve en la figura 4-17. En este evento se procesa el inicio y el final de la simulación, incrementando el “tiempo” y “término” al que se van a calcular las propiedades de los conceptos principales.

Se puede observar también que, en este evento se realiza el cálculo de las propiedades iniciales para toda la malla. Debido a que, al término cero, sólo se tienen las propiedades que se insertan en las relaciones dinámicas ejecutadas previamente. las demás propiedades deben ser calculadas como se presenta en la figura 4-4, puesto que se requieren para el término de acumulación en las ecuaciones de transporte para todos los fluidos existentes.

4.4.2. Presión del Fluido varía

En el evento “Presión del Fluido varía” se procesa el núcleo de la simulación. En éste, se llevan a cabo las iteraciones del método de Newton-Raphson para converger al próximo paso de tiempo. La especificación de este evento consta de cinco procesos principales: La actualización de propiedades al término actual, el recálculo de las mismas, el cálculo de los residuales en cada iteración, el cálculo de la matriz jacobiana, y la actualización de las incógnitas. La especificación del evento “Presión del Fluido varía” se presenta en la figura 4-18.

Actualización de arreglos de propiedades

En la actualización de propiedades al término actual, se hace un incremento de tamaño y asignación del estimado inicial para el método de Newton-Raphson para todas las celdas de la malla, fluidos y propiedades dependientes del tiempo. Lo mismo sucede para los pozos y cada uno de sus perforados. La actualización de propiedades se expone en la figura 4-19.

Recálculo de propiedades de los fluidos

Posteriormente, en la figura 4-20 se muestra el recálculo de las propiedades de los fluidos para cada celda. Como el sistema que se resuelve tiene por incógnitas la presión del fluido principal y la saturación de los demás fluidos, es necesario calcular el resto de las propiedades de los fluidos como funciones de la presión y las saturaciones.

Cálculo de Residuales

Luego se hace un recorrido de todas las ecuaciones, y se calcula el residual dependiendo de si la ecuación es de tipo fluido o de tipo pozo, cabe aclarar que sólo las ecuaciones de tipo pozo pueden tener como estado “Inactivas”.

Es importante notar también, que la función “ubicar” se encarga de calcular la posición correspondiente en el vector residual que agrupa todas las incógnitas a resolver. Además, el tipo de residual indica si se debe ubicar como una ecuación de fluido que se evalúa para todas las celdas o sólo es una ecuación de pozo y por tanto una sola fila en las últimas posiciones del residual, tal comportamiento se evidencia en 4-21.

Cálculo de la Matriz del Jacobiano

Siguiendo 4-22

Solución del sistema lineal y actualización de incógnitas

Por último una vez se tiene la matriz del jacobiano construida se soluciona usando el operador “Bigradiiente conjugado estabilizado”, proveniente de alguna librería, que resuelve el sistema: $Jacobiano * DeltaDeSolucion = -Residual$ como se observa en **4-23**. Posteriormente, se actualizan las incógnitas sumándoles el delta de solución de manera acorde al cálculo del residual. Esto se presenta en **4-24**.

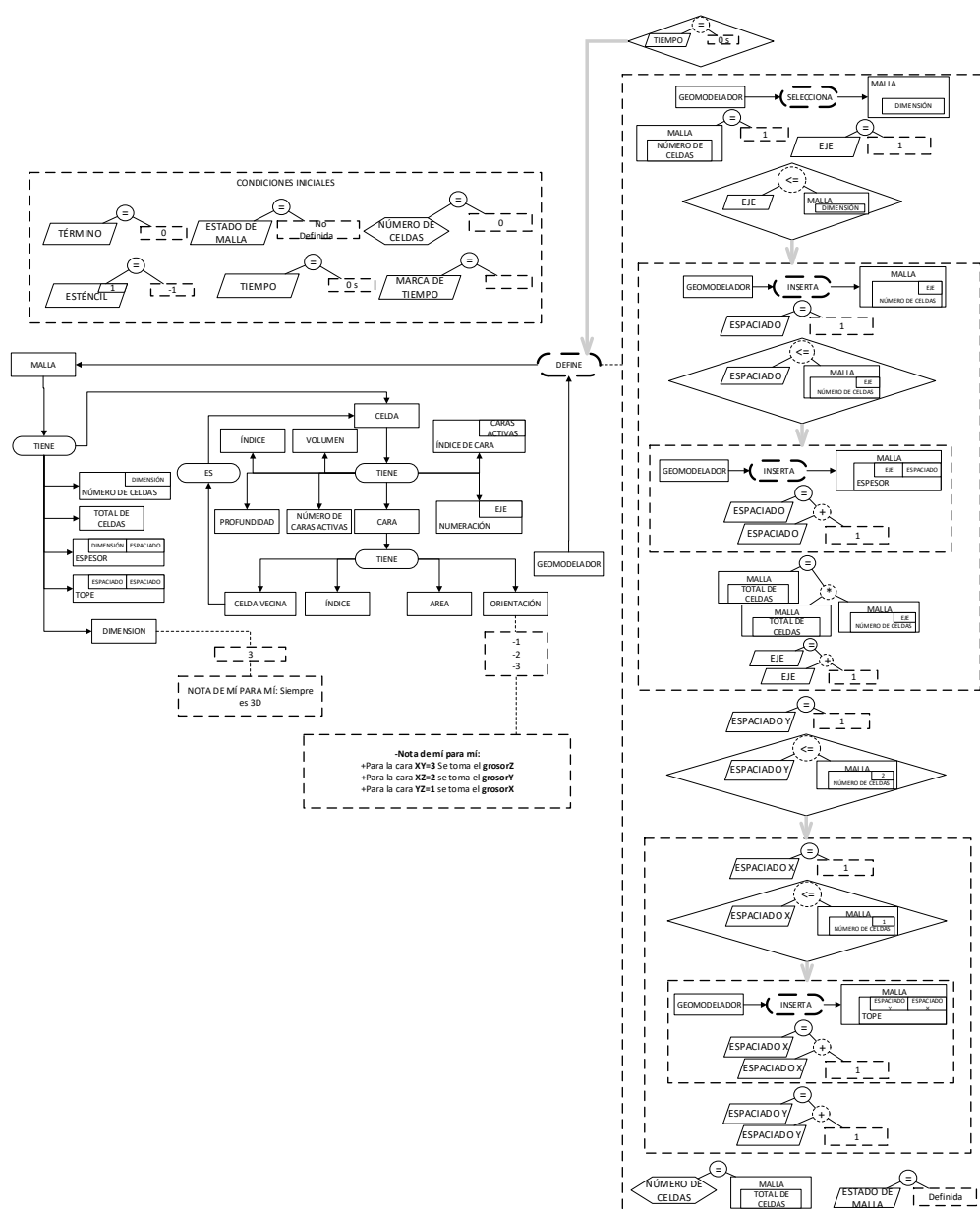


Figura 4-5.: Definición de la malla. Los autores.

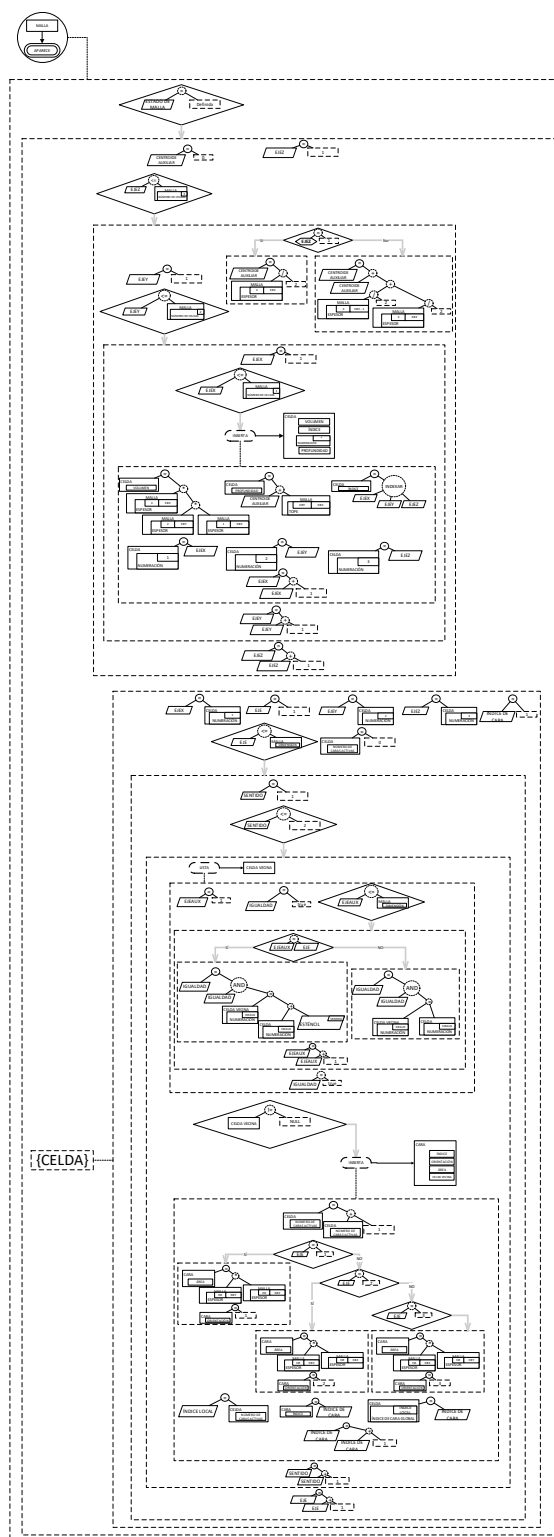


Figura 4-6.: Representación de la aparición de la Malla. Los autores.

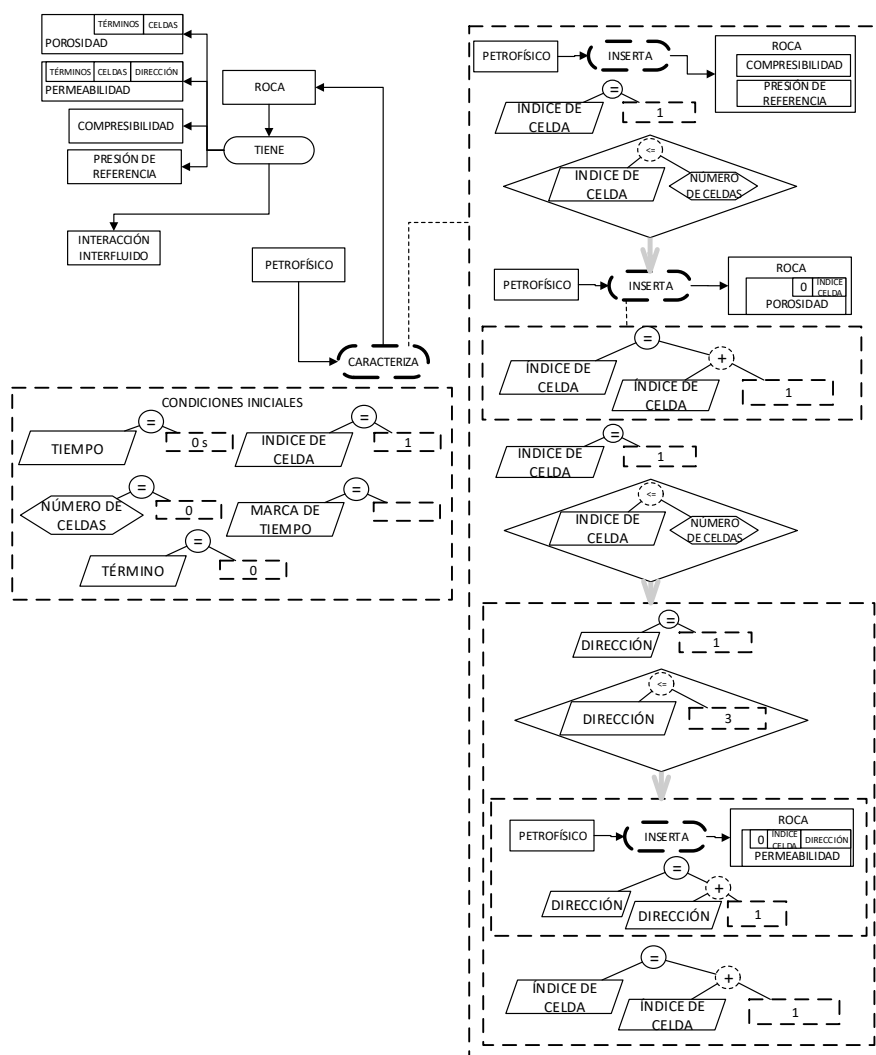


Figura 4-7.: Caracterización de la Roca. Los autores.

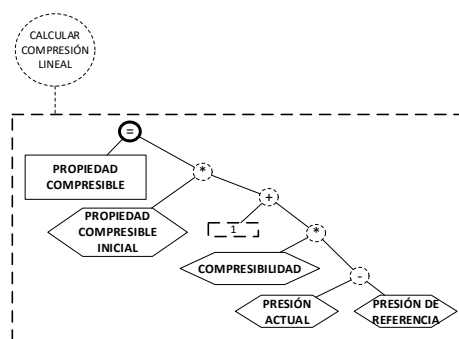


Figura 4-8.: Función "Calcular propiedad compresible". Los autores.

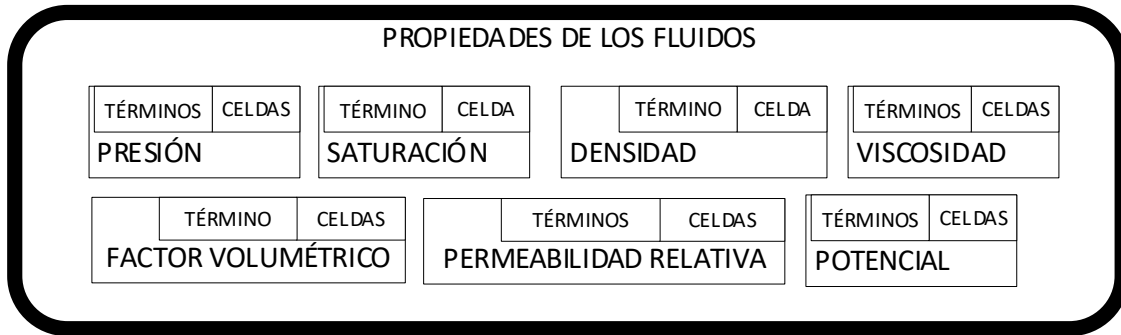


Figura 4-9.: Propiedades de los fluidos. Los autores.

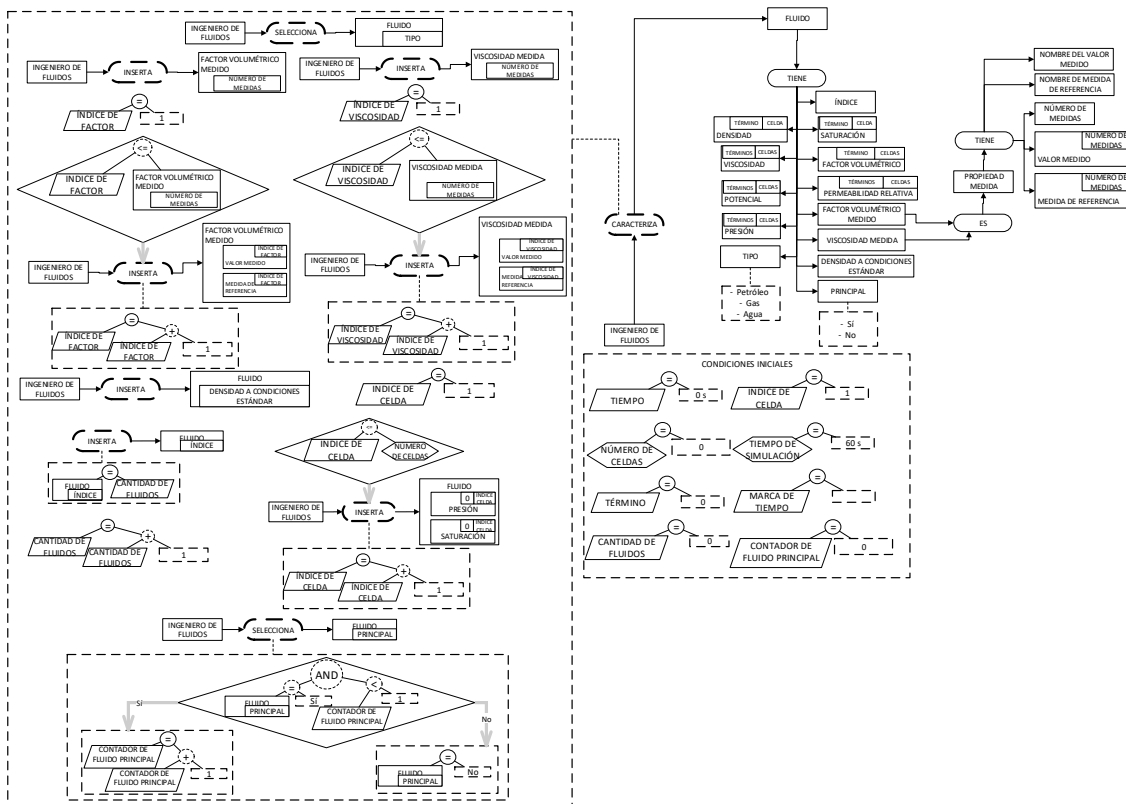
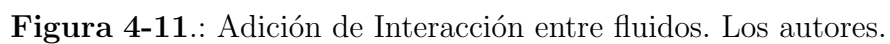


Figura 4-10.: Caracterización del fluido. Los autores.



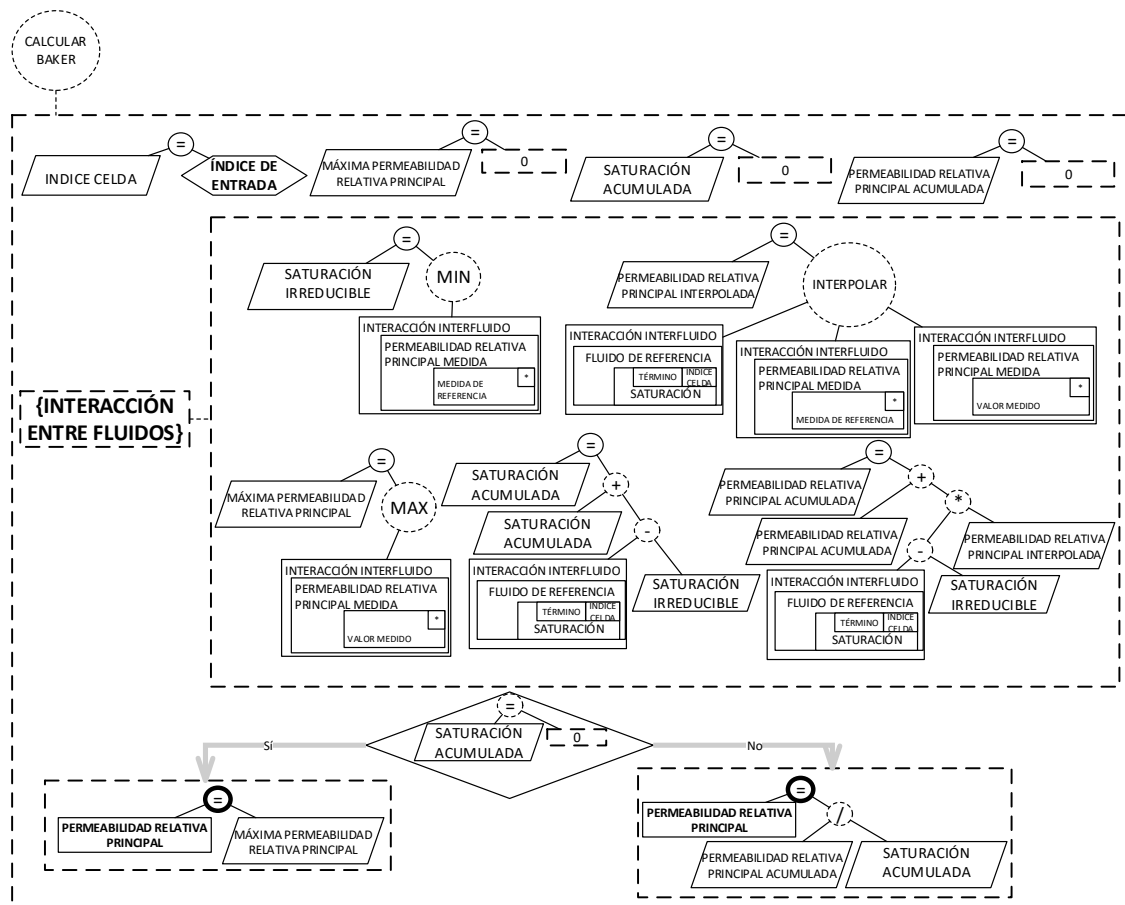


Figura 4-12.: Función "Calcular Baker". Los autores.

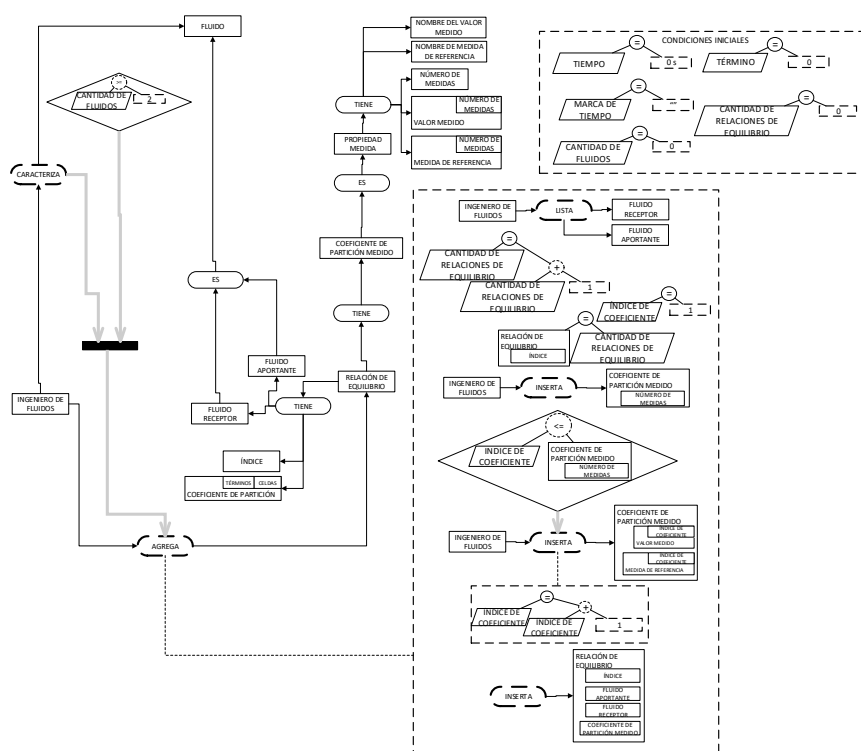


Figura 4-13.: Adición de Relaciones de equilibrio. Los autores.

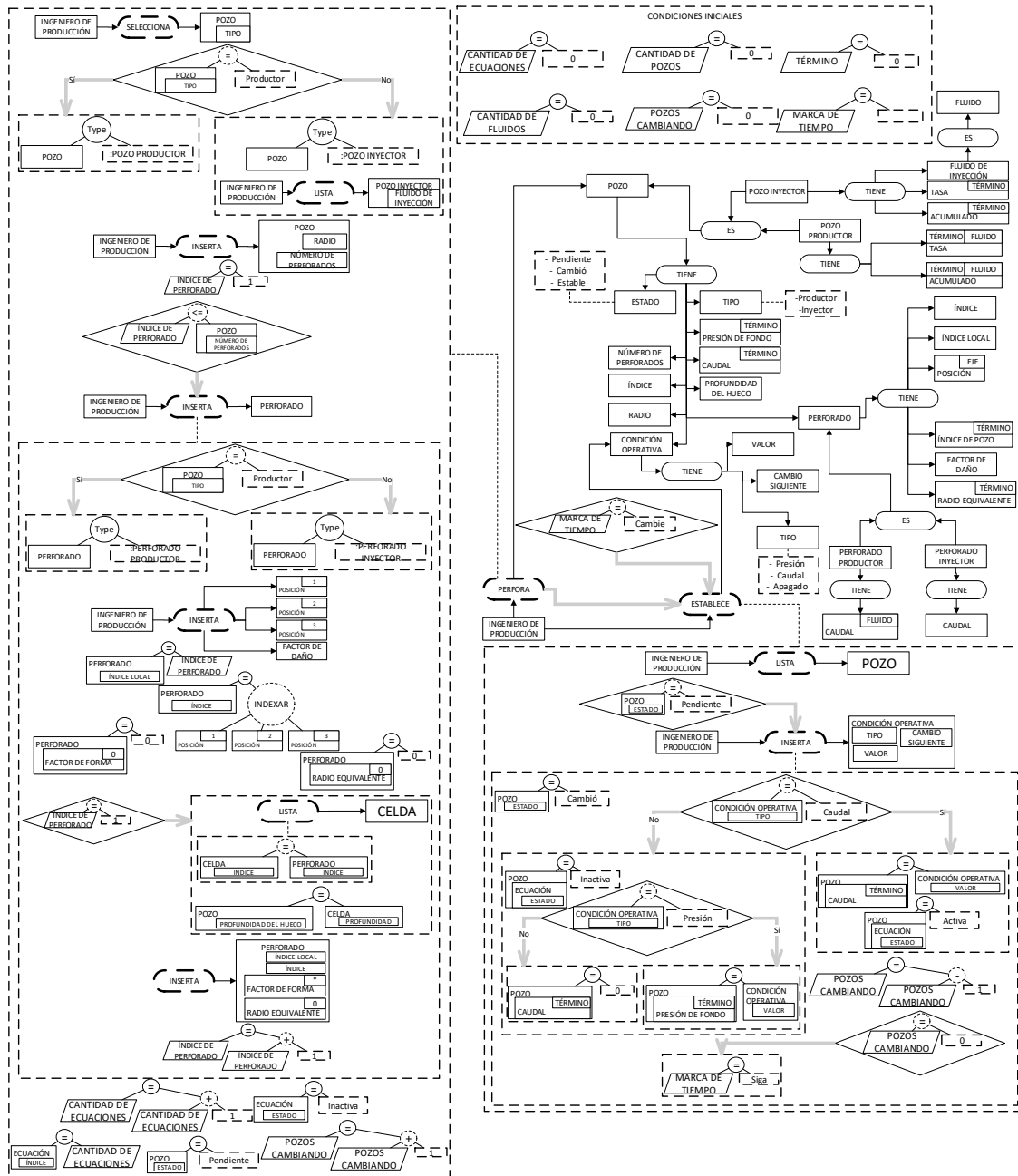


Figura 4-14.: Perforación de Pozos. Los autores.

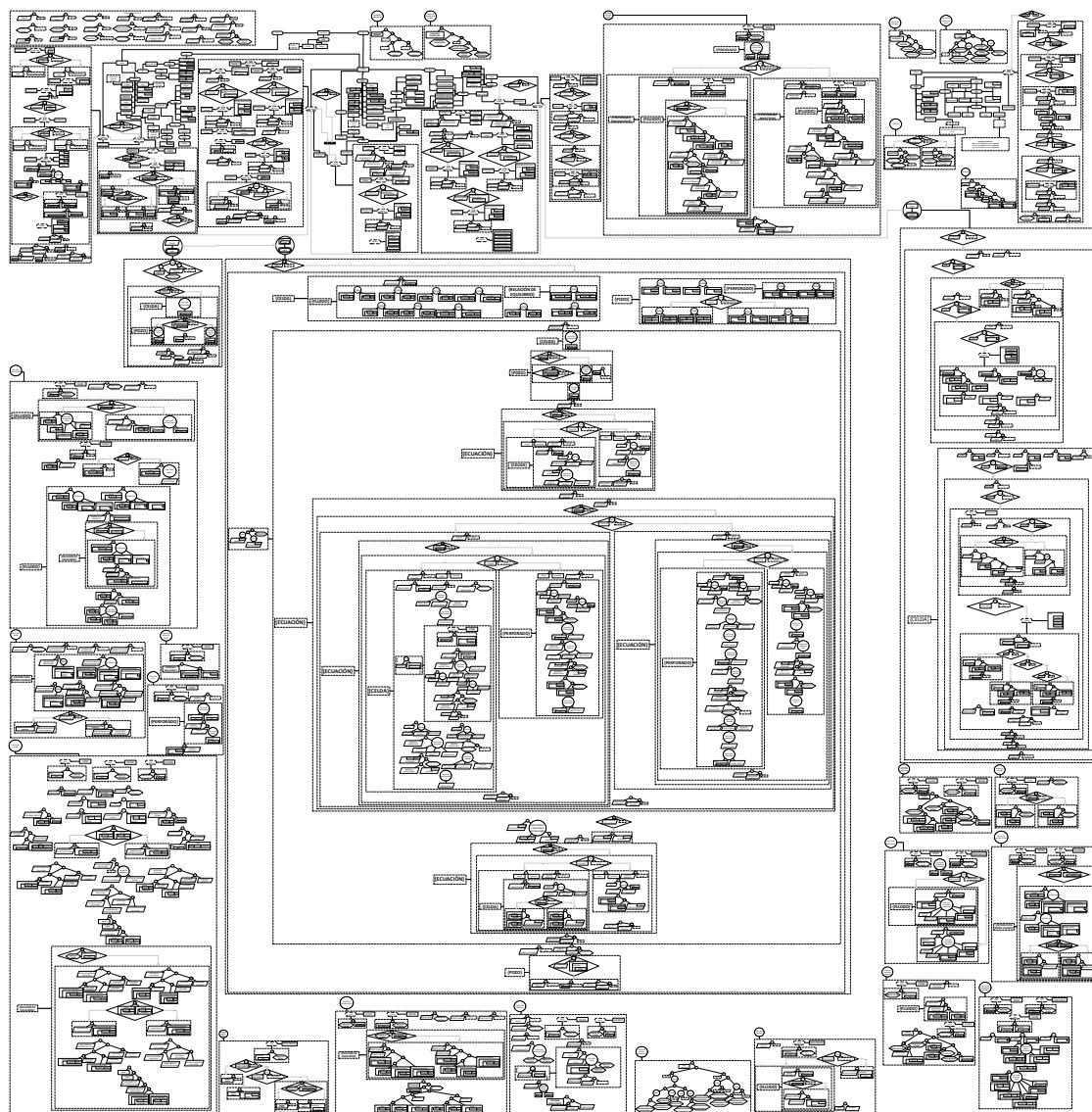


Figura 4-15.: Representación en EP de la simulación de procesos EOR. Los autores.

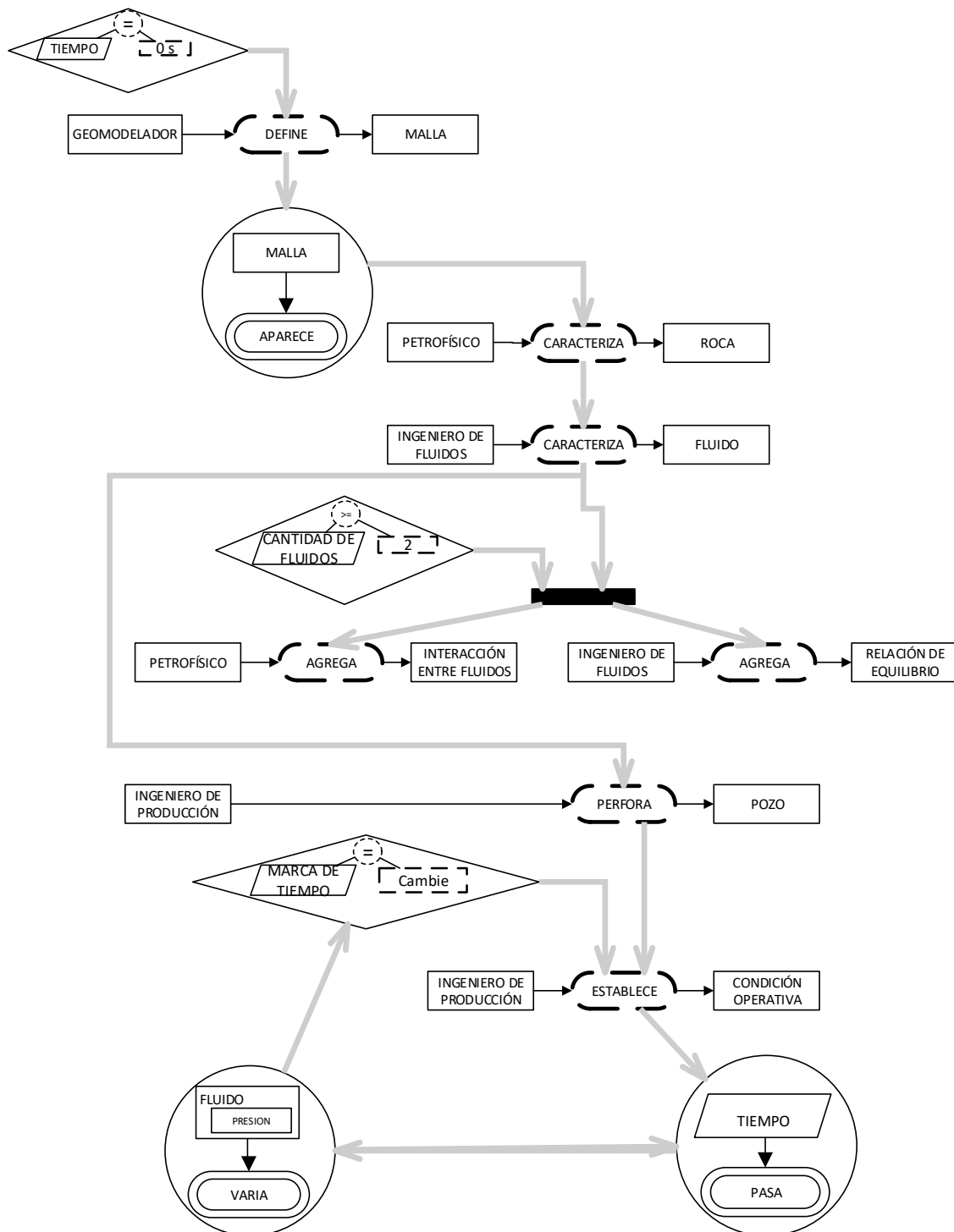


Figura 4-16.: Diagrama basado en el grafo de interacción de eventos. Los autores basados en Zapata *et al.* (2013).

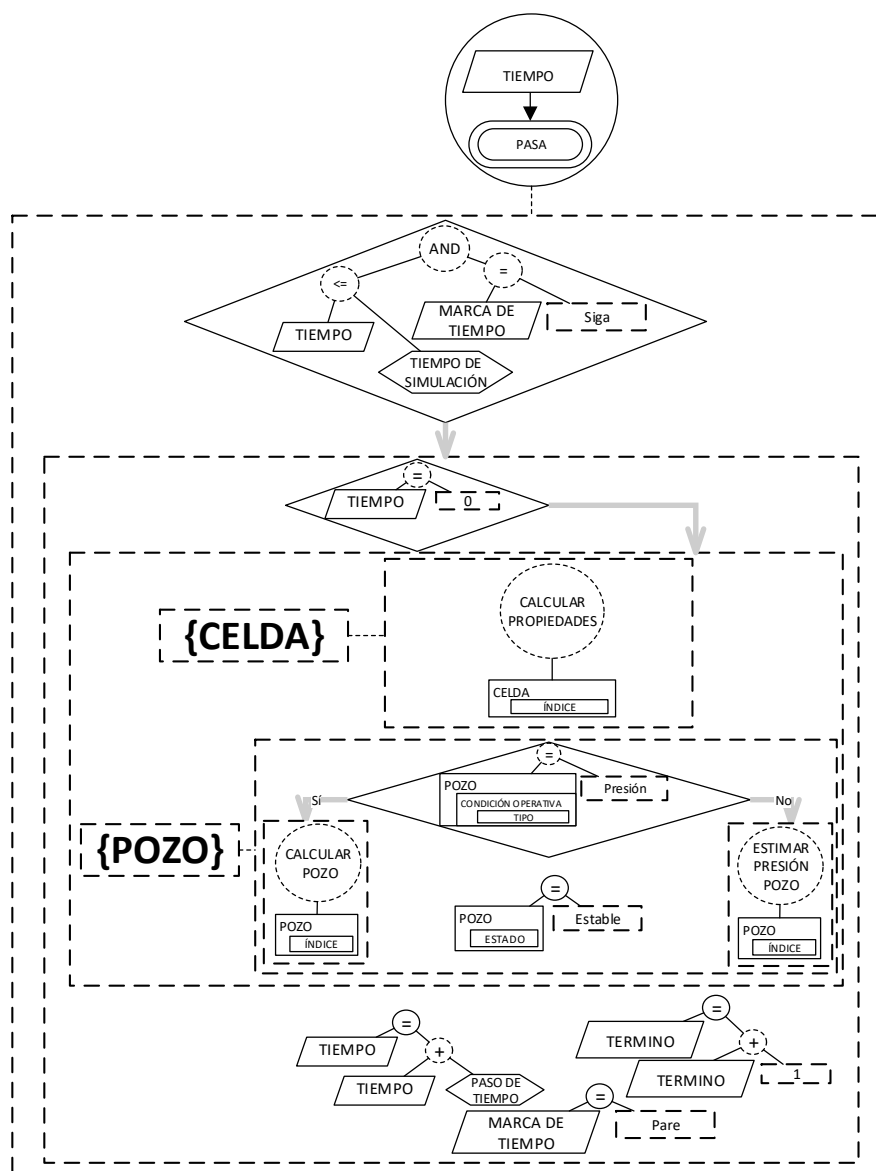


Figura 4-17.: Representación del paso del tiempo. Los autores.



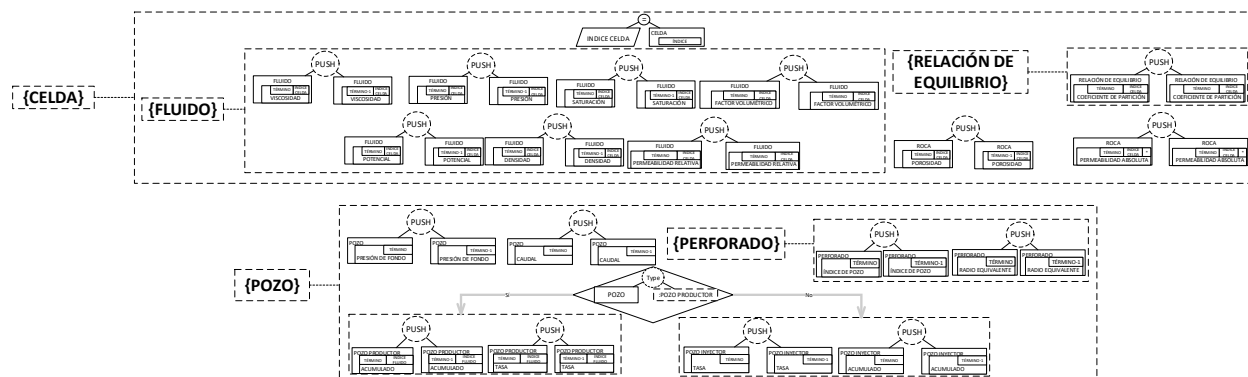


Figura 4-19.: Actualización de propiedades al término actual. Los autores.

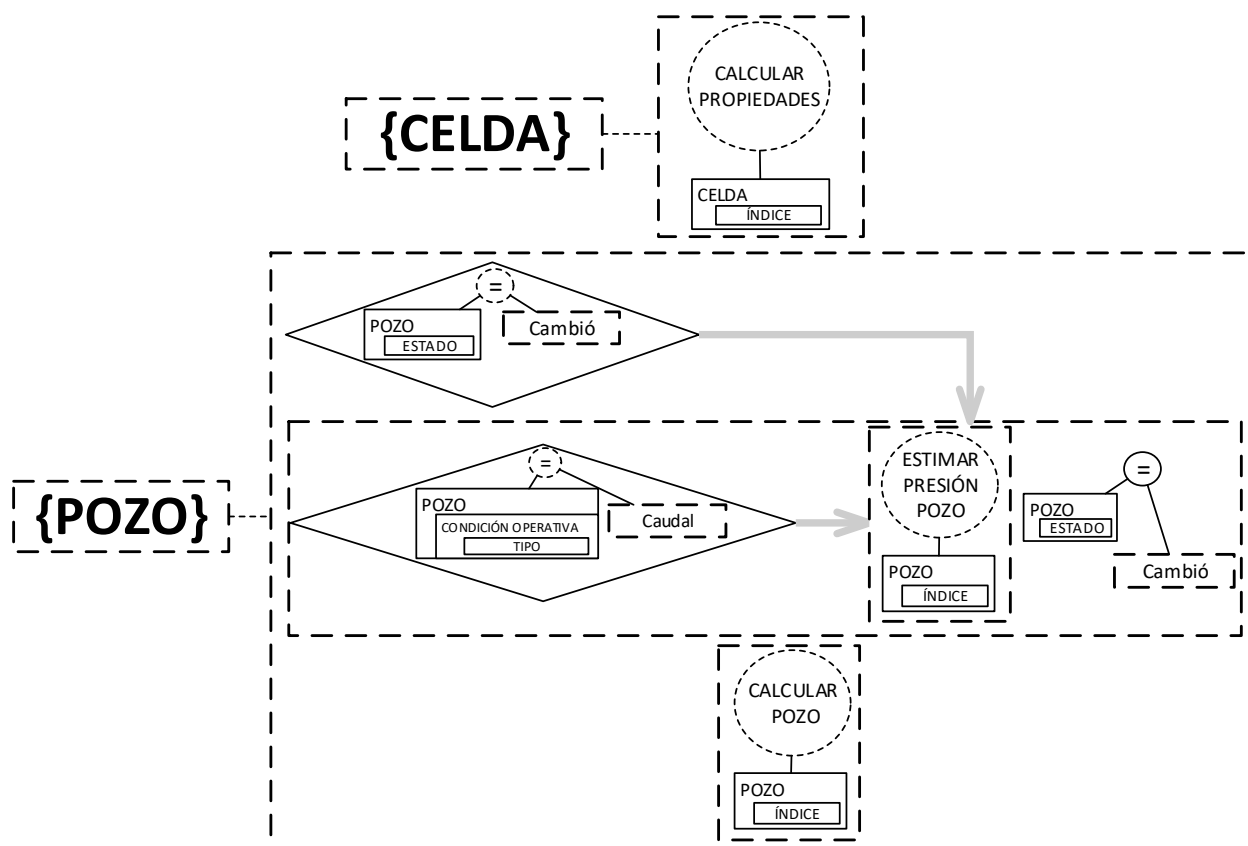


Figura 4-20.: Recálculo de Propiedades al término actual para la iteración. Los autores.

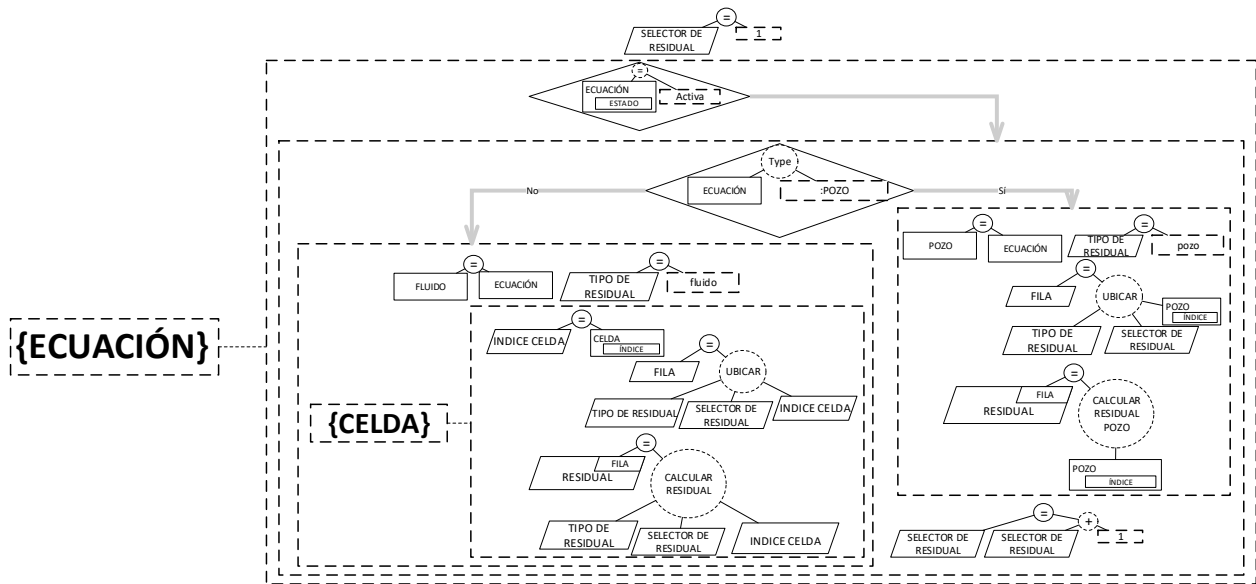


Figura 4-21.: Cálculo de residual para la iteración. Los autores.

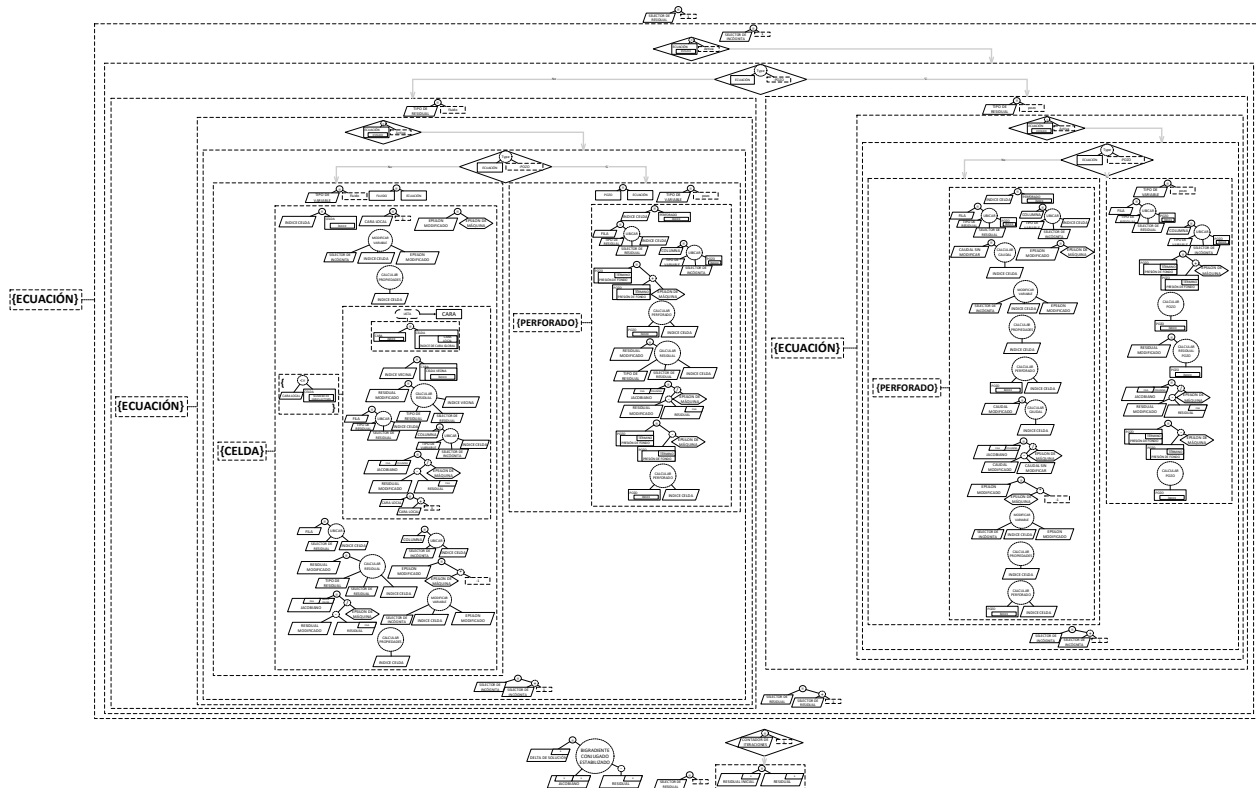


Figura 4-22.: Cálculo y armado de la matriz del jacobiano al término actual para la iteración. Los autores.

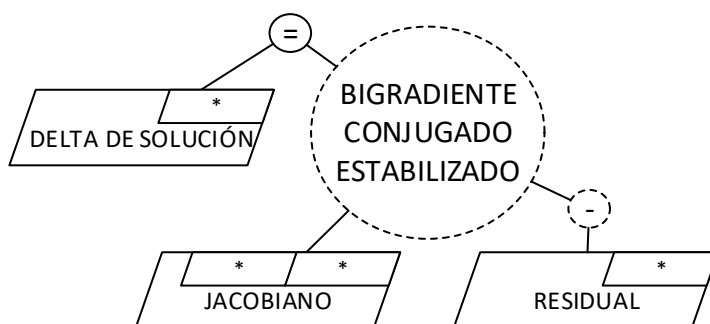


Figura 4-23.: Sistema lineal resultante del método de Newton-Raphson. Los autores.

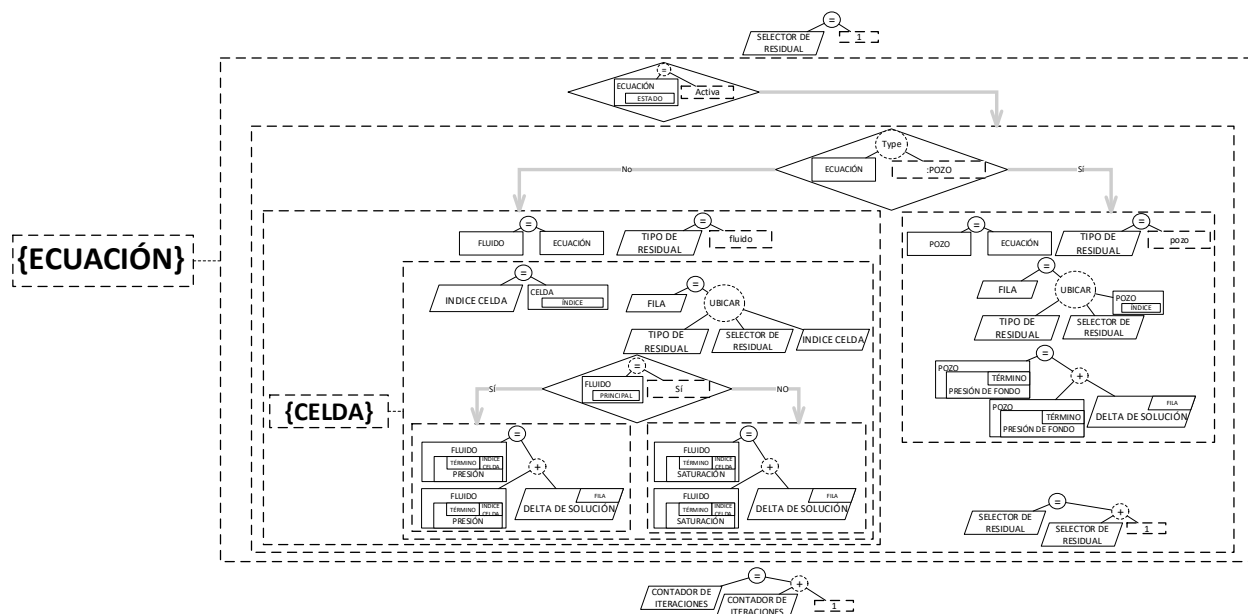


Figura 4-24.: Recálculo de Propiedades al término actual para la iteración. Los autores.

5. Validación y Resultados

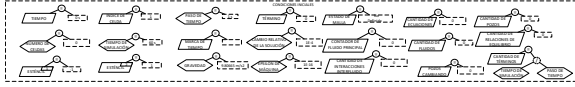
En este capítulo se pretende validar el modelo ejecutable que se realiza a partir del esquema preconceptual. Para esto, se programa el modelo ejecutable en C++ (ISO, 2017). Se elige este lenguaje porque la *Standard Template Library* (STL) tiene facilidades que permiten hacer la consistencia del código con el esquema preconceptual explícita, tal como se muestra en la sección 5.1. Se emula una base de datos a partir de arreglos globales que almacenan cada concepto, y, las claves foráneas que se generan entre conceptos se traducen como punteros. El programa en C++, posteriormente, se valida con un caso de simulación que se usa comúnmente en la literatura, como se expone en la sección 5.2.

5.1. Traducción a C++ y consistencia

A continuación se muestra, a modo de ejemplo, las traducciones de algunos conceptos, funciones, o porciones del EP a código C++ para verificar la consistencia del código con el modelo ejecutable. Primero, se definen los elementos que conforman las condiciones iniciales, y, la base de datos que se emula, es decir, los arreglos que contienen los conceptos que se instancian en la ejecución de las relaciones dinámicas del EP. Posteriormente, se muestran las traducciones a código de dos conceptos clase, “Malla” y “Roca”, y la traducción de la relación dinámica “Petrofísico caracteriza Roca”. Luego, se explica la traducción del cálculo del residual en el evento “Presión del Fluido Varía”.

Las condiciones iniciales, en las que se definen variables globales y constantes, se programan en un *namespace* “Global” que agrupa todas las definiciones, tal como aparecen en la figura 2-7. El código para las condiciones iniciales se expone en la tabla 5.1.

En el código 5.1 se muestra los conceptos que se almacenan en arreglos, estos se iteran en diferentes funciones del código. Es importante notar que, en las precondiciones del EP se establece que sólo se define una única malla y sólo se caracteriza una única roca. Por tanto, en la base de datos que se emula, estos dos conceptos se acceden por medio de un puntero único. También se destaca que, todos los objetos que se instancian de los conceptos clase, se acceden a partir de punteros. Todos los punteros se fundamentan en la STL, que se encarga de hacer la respectiva gestión del uso de la memoria.



Ver figura 2-7.

```
namespace Global{

std::string timestamp="";
double mytime=0;
double simulationtime = 86400;
double timedelta=1;
int wells_quantity=0;
int term=0;
int fluids_quantity=0;
int stencil[2] = {-1,1};
int equilibrium_relations_quantity=0;
int interfluid_interactions_quantity=0;
int cells_number=0;
int changing_wells=0;

};
```

Tabla 5-1.: Traducción a código de las condiciones iniciales. Los autores.

```
std::vector<std::shared_ptr<Equation_Base>> equations =
std::vector<std::shared_ptr<Equation_Base>>();

std::vector<std::shared_ptr<Fluid>> characterized_fluids =
std::vector<std::shared_ptr<Fluid>>();

std::vector<std::unique_ptr<Equilibrium_Relation>> added_equilibrium_relations =
std::vector<std::unique_ptr<Equilibrium_Relation>>();

std::vector<std::unique_ptr<Interfluid_Interaction>> added_interfluid_interactions =
std::vector<std::unique_ptr<Interfluid_Interaction>>();

std::vector<std::shared_ptr<Well>> perforated_wells =
std::vector<std::shared_ptr<Well>>();

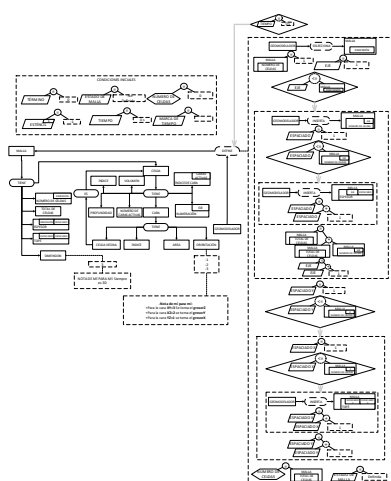
std::unique_ptr<Mesh> mymesh;
std::unique_ptr<Rock> myrock;
```

Tabla 5-2.: Arreglos que conforman la base de datos que se emula. Los autores.

En el código 5.1 se puede observar que, la conceptualización de la malla coincide con el código que se genera para la misma. La malla se propone como un conjunto de celdas. Adicionalmente, se tienen elementos como el espesor que dependen de la cantidad de celdas en cada dirección. Las celdas también se iteran, pero su arreglo correspondiente se almacena dentro del concepto malla, tal como se propone en la sección ??(Ojo, hay que ponerle un label que mande a revisar la conceptualización de la malla).

5.2. Simulación y resultados

Las diferencias de presión son de alrededor de 5 psi en la Figura 5-1. Es posible afirmar que el modelo ejecutable representa la realidad de una manera cercana.



Ver figura 4-5.

```

class Mesh{

private:

using Cells_t = std::vector<std::shared_ptr<Cell>>;
int _dimension;
std::vector<int> _cell_number = std::vector<int>(3);
int _cell_total;
std::vector<std::vector<double>> _thickness;
std::vector<std::vector<double>> _top;
int _defined=0;
Cells_t _cells;

public:

using Cell_iterator = Cells_t::iterator;
using Cell_const_iterator = Cells_t::const_iterator;

Mesh();
int getCellTotal();
void define();
void defineFromFile(std::ifstream& mesh_reader);
void appear(const std::string& _timestamp, const int stencil[2]);

int listCell(int posx, int posy, int posz);
int listCell(std::vector<int> _Numeration);

const std::shared_ptr<Cell>& cell(const int index) const
{return _cells[index];};

const double& thickness(const int axis, const int spacing) const
{return _thickness[axis][spacing];};

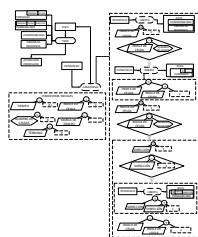
Cell_iterator begin() {return _cells.begin();};
Cell_iterator end()   {return _cells.end();};

Cell_const_iterator begin() const {return _cells.begin();};
Cell_const_iterator end()   const {return _cells.end();};
Cell_const_iterator cbegin() const {return _cells.cbegin();};
Cell_const_iterator cend()   const {return _cells.cend();};

};

```

Tabla 5-3.: Traducción a código del concepto Malla. Los autores.



Ver figura 4-7.

```

class Rock{
private:

double _reference_pressure;
double _compressibility;
std::vector<std::vector<std::vector<double>>> _absolute_permeability;
std::vector<std::vector<double>> _porosity;

public:

Rock(){};
void characterize(const int& cells_number);
void characterizeFromFile(std::ifstream& rock_reader,
const int& cells_number);
void porosity(const int term, const int cell_index,
const double pressure);

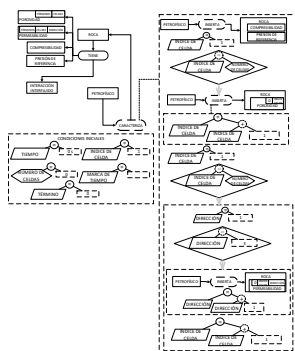
void updateProperties(const int& term);

const double& porosity (const int term, const int cells_number) const {
return _porosity[term][cells_number];
};

const std::vector<double>& absolutePermeability
(const int term, const int cells_number) const {
return _absolute_permeability[term][cells_number];
};
};

```

Tabla 5-4.: Traducción a código del concepto Roca. Los autores.



Ver figura 4-7.

```
void Rock::characterize(const int& cells_number){

std::ostringstream ss = std::ostringstream();
const std::string axisnames[3]={ "x", "y", "z"};

_absolute_permeability = std::vector<std::vector<std::vector<double>>>
(1,std::vector<std::vector<double>>(cells_number,std::vector<double>(3)));
_porosity
    = std::vector<std::vector<double>>(1,std::vector<double>(cells_number));

myRead(std::string("Please insert rock compressibility [1/Pa]"), _compressibility,
std::string("Please insert a valid input"));

myRead(std::string("Please insert reference pressure [Pa]"), _reference_pressure,
std::string("Please insert a valid input"));

for(int cellindex=0; cellindex<cells_number; ++cellindex){

ss << "Please insert initial porosity for the " << cellindex+1 << " cell [-]";
myRead(ss.str(), _porosity[0][cellindex], std::string("Please insert a valid input"));
ss.str("");
ss.clear();

};

for(int cellindex=0; cellindex<cells_number; ++cellindex){
for(int direction=0; direction<3; ++direction){
ss << "Please insert initial absolute permeability for the " << cellindex+1
<< " cell in direction " << axisnames[direction] << " [m2]";
myRead(ss.str(), _absolute_permeability[0][cellindex][direction],
std::string("Please insert a valid input"));
ss.str("");
ss.clear();
};
};
};
```

Tabla 5-5.: Traducción a código de la relación dinámica “Petrofísico caracteriza Roca”. Los autores.

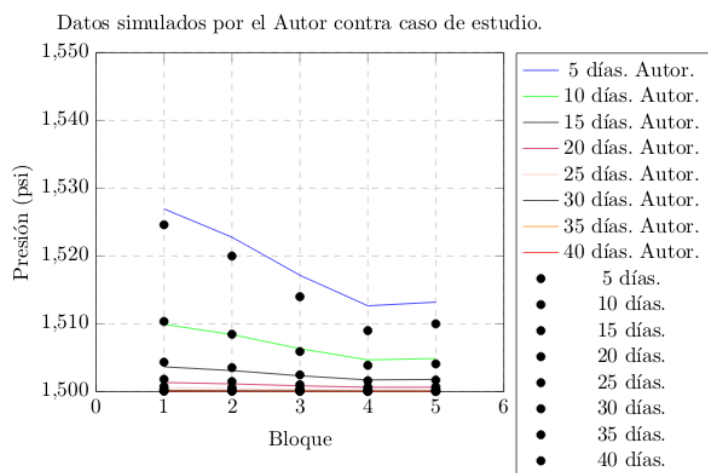


Figura 5-1.: Validación 5 bloques. Los autores.

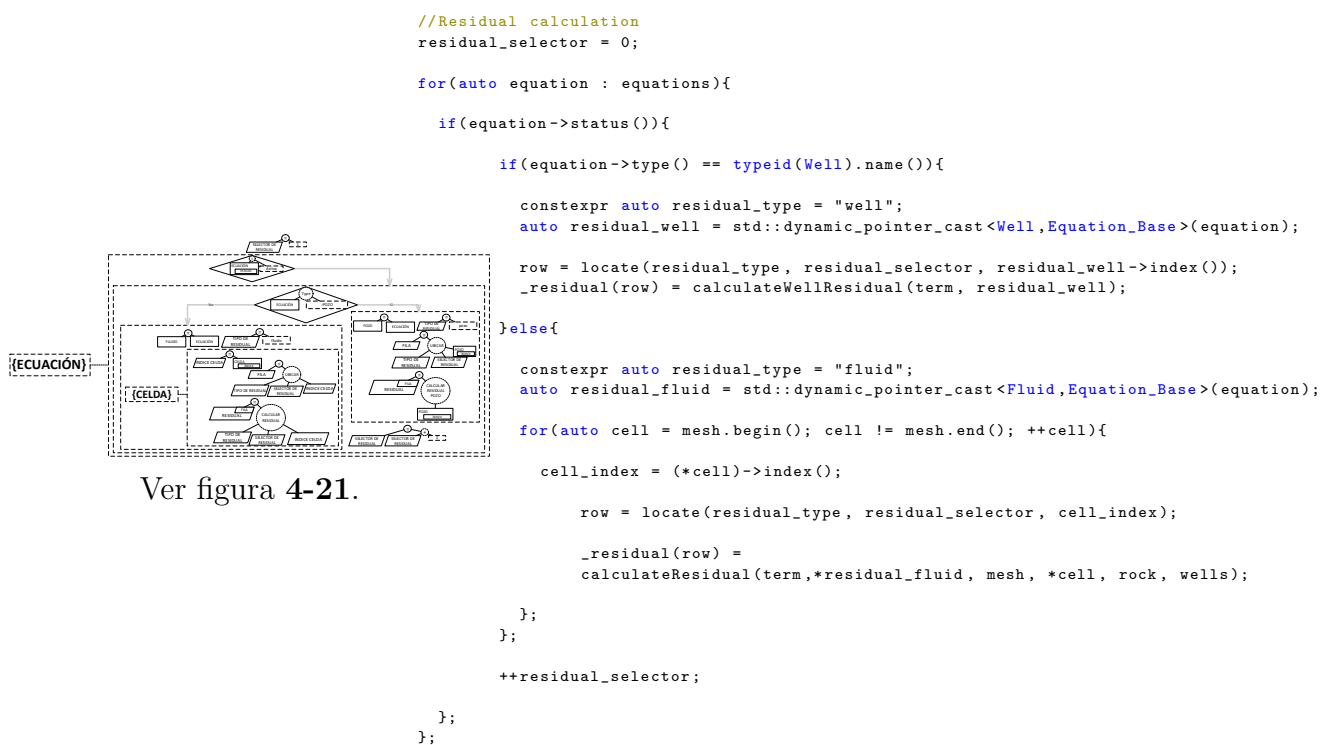


Tabla 5-6.: Traducción a código del cálculo de residual en el evento “Presión del Fluido Varía”. Los autores.

6. Conclusiones y trabajo futuro

6.1. Conclusiones

La concordancia de los resultados con el caso de la literatura indican que el modelo ejecutable desarrollado tiene validez, el desarrollo del esquema preconceptual ejecutable y su respectiva traducción a C++ es una clara muestra de la consistencia que se obtiene al trazar los conceptos y los procesos en el código. La representación en el EP es acorde con la física y la conceptualización de los modelos matemáticos.

6.2. Trabajo futuro

A partir de esta Tesis de Maestría se identifican varias líneas de investigación por desarrollar:

- Representar la fenomenología de diferentes químicos usando el modelo ejecutable definido.
- Modelar un simulador composicional de flujo basado en esquemas preconceptuales.
- Explorar diferentes esquemas de solución numérica para la simulación de procesos de recobro mejorado en yacimientos de petróleo.
- Identificar patrones de diseño en el modelo ejecutable basado en esquemas preconceptuales definido.

A. Anexo: Discretización de las Ecuaciones del BOM

En este apartado se presenta la discretización de las Ecuaciones del BOM 2-6, 2-7, 2-8 que se presentan en la subsección 2.3.1. Recordando:

$$\begin{aligned} \text{aceite: } & \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] - \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) - \tilde{q}_o = 0 \\ \text{gas: } & \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_g}{B_g} + \frac{R_s S_o}{B_o} \right) \right] - \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_g} \vec{u}_g + \frac{R_s}{B_o} \vec{u}_o \right) - \tilde{q}_g = 0 \\ \text{agua: } & \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_w}{B_w} \right) \right] - \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_w} \vec{u}_w \right) - \tilde{q}_w = 0 \end{aligned}$$

Primero, se integran las ecuaciones sobre un intervalo de tiempo $[t, t + \Delta t]$, y una celda de control Ω_i . Se toma como ejemplo la ecuación de conservación para el aceite 2-6. Las ecuaciones para el gas y agua (2-7, 2-8) se discretizan de manera análoga.

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] dV dt - \int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) dV dt \\ - \int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \tilde{q}_o dV dt = 0 \end{aligned}$$

Luego, se desglosan las ecuaciones en sus términos acumulativos, de flujo, y de fuentes y sumideros, debido a que cada uno de estos términos requiere un tratamiento distinto.

$$\begin{aligned} \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] dV dt}_{\text{Término de acumulación}} - \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) dV dt}_{\text{Término de flujo}} \\ - \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \tilde{q}_o dV dt}_{\text{Término de fuentes y sumideros}} = 0 \end{aligned}$$

Empezando por el término acumulativo, se sigue que, por el teorema de Fubini que

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{\Omega_i} \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] dV \right) dt = \int_{\Omega_i} \left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] dt \right) dV$$

Por teorema fundamental del cálculo

$$\int_{\Omega_i} \left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right] dt \right) dV = \int_{\Omega_i} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right]_t^{t+\Delta t} dV$$

Considerando el cambio de la acumulación en un intervalo de tiempo como una constante para una celda de control Ω_i

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} \left[\phi \left(\frac{S_o}{B_o} + \frac{R_v S_g}{B_g} \right) \right]_t^{t+\Delta t} dV &= \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} dV \\ &= |\Omega_i| \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_t^{t+\Delta t} \end{aligned}$$

Donde $|\Omega_i|$ es el volumen para una celda i . Continuando con la discretización del término de flujo, se discretiza primero el tiempo usando un esquema **implícito**, luego

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) dV dt = \Delta t \left[\int_{\Omega_i} \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) dV \right]_t^{t+\Delta t}$$

Posteriormente, se asume que la función vectorial de velocidad \vec{u}_f para cualquier fluido f tiene derivadas de primer orden continuas. Luego, como la celda tiene una superficie cerrada, se aplica el teorema de la divergencia Gauss.

$$\int_{\Omega_i} \nabla \cdot \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) dV = \int_{\partial\Omega_i} \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) \cdot \partial \vec{S}_i$$

Usando celdas rectangulares, la integral sobre la frontera de una celda es la suma del término de flujo que se evalúa en cada cara, así

$$\int_{\partial\Omega_i} \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) \cdot \partial \vec{S}_i = \sum_{c \in S_i} \int_c \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) \cdot \partial \vec{S}_c$$

El valor del término de flujo en cada cara se aproxima usando el teorema del valor medio, luego el producto punto se evalúa como el valor de la función en la cara

$$\sum_{c \in S_i} \int_c \left(\frac{1}{B_o} \vec{u}_o + \frac{R_v}{B_g} \vec{u}_g \right) \cdot \partial \vec{S}_c \approx \sum_{c \in S_i} A_c \left(\frac{1}{B_{o,c}} \vec{u}_{o,c} + \frac{R_{v,c}}{B_{g,c}} \vec{u}_{g,c} \right)$$

Aplicando las velocidades Darcy en la ecuación, se tiene

$$\sum_{c \in S_i} A_c \left(\frac{1}{B_{o,c}} \vec{u}_{o,c} + \frac{R_{v,c}}{B_{g,c}} \vec{u}_{g,c} \right) \cdot \vec{n}_c = \sum_{c \in S_i} A_c \left(\frac{1}{B_{o,c}} \frac{\mathbb{K}_c k_{ro,c}}{\mu_{o,c}} \nabla \Phi_{o,c} + \frac{R_{v,c}}{B_{g,c}} \frac{\mathbb{K}_c k_{rg,c}}{\mu_{g,c}} \nabla \Phi_{g,c} \right)$$

Dónde el gradiente de potencial $\nabla \Phi_{f,c}$, para cualquier fluido f se aproxima como:

$$\nabla \Phi_{f,c} \approx \frac{\Delta \Phi_{f,c}}{\Delta l_c} \approx \frac{\Phi_{f,i} - \Phi_{f,j}}{\Delta l_c}$$

Donde c es la cara que conecta la celda i con la celda j , y el delta de longitud en la cara Δl_c se calcula como:

$$\Delta l_c = \frac{\Delta l_i + \Delta l_j}{2} \quad (\text{A-1})$$

Cabe notar que, los deltas de longitud dependen de la dirección del vector normal \vec{n} . Por último, el término de fuentes y sumideros se aproxima de la misma manera que el termino del flujo, usando el teorema de valor medio. Así

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_i} \tilde{q}_o dV dt \approx \int_t^{t+\Delta t} \tilde{q}_{o,i} |\Omega_i| dt \approx [\tilde{q}_{o,i}]^{t+\Delta t} |\Omega_i| \Delta t$$

tomando los tiempos $t + \Delta t$ como tiempo futuro o $n + 1$ y los tiempo t como tiempo pasado n , se obtiene la discretización de la ecuación de conservación del aceite (2-21) como:

$$|\Omega_i| \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_n^{n+1} - \Delta t \sum_{c \in S_i} A_c \left[\frac{1}{B_{o,c}} \frac{\mathbb{K}_c k_{ro,c}}{\mu_{o,c}} \nabla \Phi_{o,c} + \frac{R_{v,c}}{B_{g,c}} \frac{\mathbb{K}_c k_{rg,c}}{\mu_{g,c}} \nabla \Phi_{g,c} \right]^{n+1} - [\tilde{q}_{o,i}]^{n+1} |\Omega_i| \Delta t = 0$$

Se define el término de transmisividad, en el cual se considera un promedio armónico que se utiliza para estimar el término \mathbb{K}_c y se involucra la Ecuación A-1, de la siguiente forma:

$$T_{o,c} = \left(\frac{2}{(\Delta l_i / A_c K_{l,i}) + (\Delta l_j / A_c K_{l,j})} \right) \frac{k_{ro,c}}{\mu_{o,c} B_{o,c}}$$

$$T_{g,c} = \left(\frac{2}{(\Delta l_i / A_c K_{l,i}) + (\Delta l_j / A_c K_{l,j})} \right) \frac{k_{rg,c}}{\mu_{g,c} B_{g,c}}$$

Luego la ecuación de conservación que se discretiza queda:

$$|\Omega_i| \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_n^{n+1} - \Delta t \sum_{c \in S_i} [T_{o,c} \Delta \Phi_{o,c} + R_{v,c} T_{g,c} \nabla \Phi_{g,c}]^{n+1} - [\tilde{q}_{o,i}]^{n+1} |\Omega_i| \Delta t = 0$$

Considerando $[\tilde{q}_{o,i}]^{n+1} |\Omega_i|$ como un flujo volumétrico $[Q_{o,i}]^{n+1}$ e involucrando la evaluación al tiempo $n + 1$ en cada uno de los términos, se tiene:

$$|\Omega_i| \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_n^{n+1} - \Delta t \sum_{c \in S_i} [T_{o,c}^{n+1} \Delta \Phi_{o,c}^{n+1} + R_{v,c}^{n+1} T_{g,c}^{n+1} \Delta \Phi_{g,c}^{n+1}] - Q_{o,i}^{n+1} \Delta t$$

Finalmente, dividiendo por Δt la ecuación se obtiene:

$$\frac{|\Omega_i|}{\Delta t} \left[\phi_i \left(\frac{S_{o,i}}{B_{o,i}} + \frac{R_{v,i} S_{g,i}}{B_{g,i}} \right) \right]_n^{n+1} - \sum_{c \in S_i} [T_{o,c}^{n+1} \Delta \Phi_{o,c}^{n+1} + R_{v,c}^{n+1} T_{g,c}^{n+1} \Delta \Phi_{g,c}^{n+1}] - Q_{o,i}^{n+1} = 0$$

La discretización de las ecuaciones de conservación para el gas y el agua (2-7, 2-8) se obtienen de manera análoga a la del aceite.

B. Anexo: Traducciones a código de la representación

A final del documento es opcional incluir índices o glosarios. Éstos son listas detalladas y especializadas de los términos, nombres, autores, temas, etc., que aparecen en el mismo. Sirven para facilitar su localización en el texto. Los índices pueden ser alfabéticos, cronológicos, numéricos, analíticos, entre otros. Luego de cada palabra, término, etc., se pone coma y el número de la página donde aparece esta información.

C. Anexo: Nombrar el anexo C de acuerdo con su contenido

MANEJO DE LA BIBLIOGRAFÍA: la bibliografía es la relación de las fuentes documentales consultadas por el investigador para sustentar sus trabajos. Su inclusión es obligatoria en todo trabajo de investigación. Cada referencia bibliográfica se inicia contra el margen izquierdo.

La NTC 5613 establece los requisitos para la presentación de referencias bibliográficas citas y notas de pie de página. Sin embargo, se tiene la libertad de usar cualquier norma bibliográfica de acuerdo con lo acostumbrado por cada disciplina del conocimiento. En esta medida es necesario que la norma seleccionada se aplique con rigurosidad.

Es necesario tener en cuenta que la norma ISO 690:1987 (en España, UNE 50-104-94) es el marco internacional que da las pautas mínimas para las citas bibliográficas de documentos impresos y publicados. A continuación se lista algunas instituciones que brindan parámetros para el manejo de las referencias bibliográficas:

Institución	Disciplina de aplicación
Modern Language Association (MLA)	Literatura, artes y humanidades
American Psychological Association (APA)	Ambito de la salud (psicología, medicina) y en general en todas las ciencias sociales
Universidad de Chicago/Turabian	Periodismo, historia y humanidades.
AMA (Asociación Médica de los Estados Unidos)	Ambito de la salud (psicología, medicina)
Vancouver	Todas las disciplinas
Council of Science Editors (CSE)	En la actualidad abarca diversas ciencias
National Library of Medicine (NLM) (Biblioteca Nacional de Medicina)	En el ámbito médico y, por extensión, en ciencias.
Harvard System of Referencing Guide	Todas las disciplinas
JabRef y KBibTeX	Todas las disciplinas

Para incluir las referencias dentro del texto y realizar lista de la bibliografía en la respectiva sección, puede utilizar las herramientas que Latex suministra o, revisar el

instructivo desarrollado por el Sistema de Bibliotecas de la Universidad Nacional de Colombia¹, disponible en la sección "Servicios", opción "Trámites enlace .^{Entrega de tesis}".

¹Ver: www.sinab.unal.edu.co

D. Sizas Tikz

Ojo! Esto no es un anexo, es solo para pruebas

Datos simulados por el Autor contra caso de estudio.

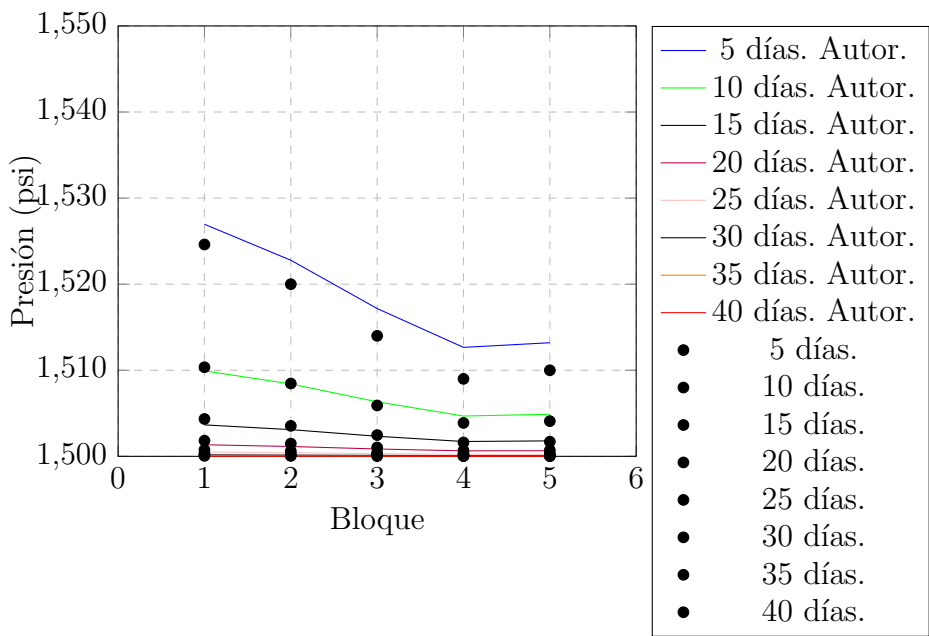


Figura D-1.: gg

Datos simulados por el Autor contra caso de estudio.

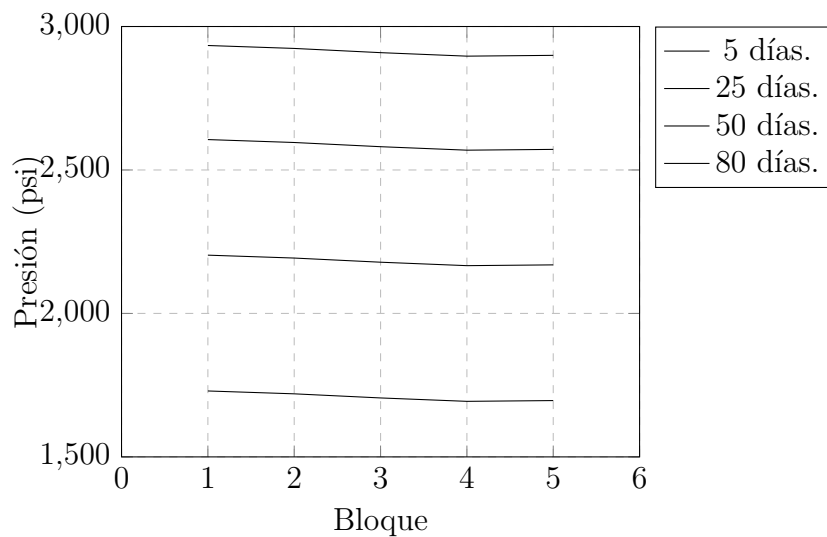


Figura D-2.: gg izi

Datos simulados por el Autor contra caso de estudio.

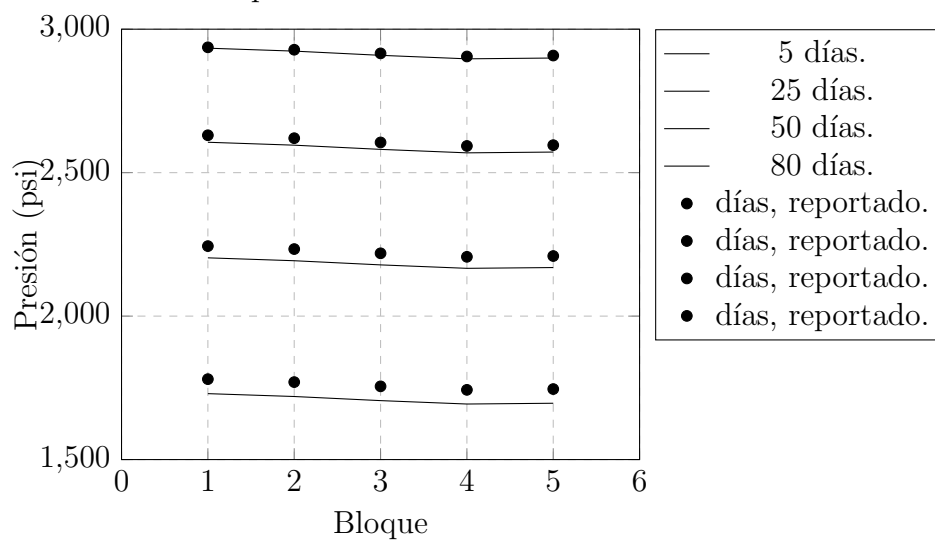


Figura D-3.: gg

Bibliografía

- Abou-Kassem, J., Farouq-Ali, S., y Islam, M. (2006). *Petroleum reservoir simulation: a Basic Approach*. Gulf Publishing Company.
- Atkinson, K. E. (2008). *An introduction to numerical analysis*. John Wiley & Sons.
- Baker, L. (1988). Three-Phase Relative Permeability Correlations. In *SPE Enhanced Oil Recovery Symposium*. Society of Petroleum Engineers.
- Bear, J. (2018). *Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media*, volume 31 of *Theory and Applications of Transport in Porous Media*. Springer International Publishing, Cham.
- Blatt, M., Burchardt, A., Dedner, A., Engwer, C., Fahlke, J., Flemisch, B., Gersbacher, C., Gräser, C., Gruber, F., Grüninger, C., Kempf, D., Klöfkorn, R., Malkmus, T., Müthing, S., Nolte, M., Piatkowski, M., y Sander, O. (2016). The Distributed and Unified Numerics Environment, Version 2.4. *Archive of Numerical Software*, 4(100):13–29.
- Blunt, M. (2000). An Empirical Model for Three-Phase Relative Permeability. *SPE Journal*, 5(04):435–445.
- Calle, J. (2016). Identificación de patrones de diseño para software científico a partir de esquemas preconceptuales. Master's thesis, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín. Línea de Investigación: Ingeniería de software.
- Cao, H. *Development of Techniques for General Purpose Research Simulator*. PhD thesis, Stanford University. Stanford, CA.
- Chaverra, J. (2011). Generación automática de prototipos funcionales a partir de esquemas preconceptuales. Master's thesis, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín.
- Chen, Z. (2007). *Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery*, volume 77. Siam.
- DeBaun, D., Byer, T., Childs, P., Chen, J., Saaf, F., Wells, M., Liu, J., Cao, H., Pianelo, L., Tilakraj, V., Crumpton, P., Walsh, D., Yardumian, H., Zorzynski, R., Lim, K.-T., Schrader, M., Zapata, V., Nolen, J., y Tchelepi, H. (2005). An extensible architecture for next generation scalable parallel reservoir simulation. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers.

- Delshad, M. y Pope, G. A. (1989). Comparison of the three-phase oil relative permeability models. *Transport in Porous Media*, 4(1):59–83.
- Durango, C., Noreña, P., y Zapata, C. (2018). Representación de eventos de ruido ambiental a partir de esquemas preconceptuales y buenas prácticas de educación geoespacial de requisitos. *Research in Computing Science*, 147:337–341.
- Ertekin, T., Abou-Kassem, J. H., y King, G. R. (2001). *Basic Applied Reservoir Simulation*. Society of Petroleum Engineers.
- Fanchi, J. R. (2002). Chapter 7 - measures of rock-fluid interactions. In Fanchi, J. R., editor, *Shared Earth Modeling*, pages 108 – 132. Butterworth-Heinemann, Woburn.
- Fang, W., Jiang, H., Li, J., Wang, Q., Killough, J., Li, L., Peng, Y., y Yang, H. (2017). A numerical simulation model for multi-scale flow in tight oil reservoirs. *Petroleum Exploration and Development*, 44(3):446–453.
- Flemisch, B., Darcis, M., Erbertseder, K., Faigle, B., Lauser, A., Mosthaf, K., Müthing, S., Nuske, P., Tatomir, A., Wolff, M., y Helmig, R. (2011). DuMux: DUNE for multi-{phase,component,scale,physics,...} flow and transport in porous media. *Advances in Water Resources*, 34(9):1102–1112.
- Hu, X., Xu, J., y Zhang, C. (2013). Application of auxiliary space preconditioning in field-scale reservoir simulation. *Science China Mathematics*, 56(12):2737–2751.
- Isaza, C. (2017). Modelo fenomenológico y simulación de la disolución de los asfaltenos depositados en formación usando un solvente químico. Master’s thesis, Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín. Magister en Ingeniería de Petróleos.
- ISO (2017). *ISO/IEC 14882:2017 Information technology — Programming languages — C++*. Fifth edition.
- Kelly, D. (2015). Scientific software development viewed as knowledge acquisition. *J. Syst. Softw.*, 109(C):50–61.
- Mohammad, R. S., Zhao, X., Zhang, S., y Shah, S. J.-u.-D. (2017). Bubble point simulation of reservoir oil and carbon dioxide mixtures. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 42(4):1633–1641.
- Mozo, I. (2017). Desarrollo de un modelo matemático de la estimulación de pozos productores de crudo pesado con nano?uidos reductores de viscosidad. Master’s thesis, Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín.

- Noreña, P. y Zapata, C. (2018a). A pre-conceptual-schema-based representation of time events coming from scientific software domain. In *Proceedings of The 22nd World Multi-Conference on Systemics, Cybernetics and Informatics (WMSCI 2018)*, pages 53–58.
- Noreña, P. y Zapata, C. (2018b). Una representación basada en esquemas preconceptuales de eventos determinísticos y aleatorios tipo señal desde dominios de software científico. *Research in Computing Science*, 147:207–220.
- Noreña, P. y Zapata, C. (2019). Business simulation by using events from pre-conceptual schemas. In *Developments in business simulation and experiential learning: proceedings of the annual Absel conference*, pages 258–263.
- Noreña, P., Zapata, C., y Villamizar, A. (2018). Representación de eventos a partir de estructuras lingüísticas basadas en roles semánticos: Una extensión al esquema preconceptual. *Investigación e innovación en Ingeniería de Software*, 2:69–79.
- Peaceman, D. W. (1983). Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 23(03):531–543.
- Qiao, C., Khorsandi, S., y Johns, R. T. (2017). A General Purpose Reservoir Simulation Framework for Multiphase Multicomponent Reactive Fluids. In *SPE Reservoir Simulation Conference*. Society of Petroleum Engineers.
- Solano, H., Valencia, J., Mejía, J., y Ocampo, A. (2019). A modeling study for foam generation for eor applications in naturally fractured reservoirs using disperse surfactant in the gas stream. In *IOR 2019–20th European Symposium on Improved Oil Recovery*.
- Stephen J. Mellor, M. J. B. (2002). *Executable UML: A Foundation for Model-Driven Architecture*. Addison-Wesley Professional.
- Takhanov, D. (2011). Forchheimer model for non-darcy flow in porous media and fractures.
- Valencia, J. (2016). Modelamiento del flujo y generación de espumas en medios porosos usando surfactante disperso en gas. Master’s thesis, Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín. Línea de Investigación: Recobro Mejorado.
- Valencia, J., Ocampo, A., y Mejía, J. (2018). Development and validation of a new model for in situ foam generation using foamer droplets injection. *Transport in Porous Media*, pages 1–18.
- Wang, K., Liu, H., y Chen, Z. (2015). A scalable parallel black oil simulator on distributed memory parallel computers. *Journal of Computational Physics*, 301:19 – 34.

- Wang, K., Liu, H., Luo, J., y Chen, Z. (2016). A multi-continuum multi-phase parallel simulator for large-scale conventional and unconventional reservoirs. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 33:483–496.
- Wang, K., Liu, H., Luo, J., y Chen, Z. (2017). Development of a Parallel Simulator Utilizing Multiple Interacting Continua and Embedded Discrete Fracture Models in Fractured Unconventional Reservoirs.
- Wang, K., Liu, H., Luo, J., Yu, S., Chen, Z., y Zhang, P. (2016). Parallel simulation of full-field polymer flooding. In *2016 IEEE 2nd International Conference on Big Data Security on Cloud (BigDataSecurity), IEEE International Conference on High Performance and Smart Computing (HPSC), and IEEE International Conference on Intelligent Data and Security (IDS)*, pages 220–225.
- Whitaker, S. (1986). Flow in porous media i: A theoretical derivation of darcy's law. *Transport in Porous Media*, 1(1):3–25.
- Zapata, C. (2007). *Definición de un esquema preconceptual para la obtención automática de esquemas conceptuales de UML*. PhD thesis, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellin, Medellín.
- Zapata, C. (2012). *The UNC-Method revisited: elements of the new approach*. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing.
- Zapata, C., Noreña, P., y González, N. (2013). Representación de eventos disparadores y de resultado en el grafo de interacción de eventos. *Ingenierías USBMed*, 4(2):23–32.
- Zaydullin, R., Voskov, D. V., James, S. C., Henley, H., y Lucia, A. (2014). Fully compositional and thermal reservoir simulation. *Computers and Chemical Engineering*, 63:51 – 65.
- Zaza, A., Awotunde, A. A., Fairag, F. A., y Al-Mouhamed, M. A. (2016). A CUDA based parallel multi-phase oil reservoir simulator. *Computer Physics Communications*, 206:2–16.
- Zhang, J., Delshad, M., y Sepehrnoori, K. (2007). Development of a framework for optimization of reservoir simulation studies. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 59(1):135 – 146.
- Zuo, L., Chen, Y., Dengen, Z., y Kamath, J. (2014). Three-Phase Relative Permeability Modeling in the Simulation of WAG Injection. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 17(03):326–339.