



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

INSTITUTO DE GEOFÍSICA

*EL MÉTODO DE NEWTON RAPHSON EN LA RECUPERACIÓN MEJORADA DEL  
PETRÓLEO*

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS DE LA TIERRA  
P R E S E N T A :  
EMILIO ZAVALA SOSA

DIRECTOR DE TESIS:  
DR. ISMAEL HERRERA REVILLA

CIUDAD UNIVERSITARIA, NOVIEMBRE 2012.



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

Doy gracias al Instituto de Geofísica y a la Universidad Nacional Autónoma de México, por brindarme nuevamente la oportunidad de superarme como persona y como profesionista, queda de mi parte el compromiso de ser un hombre de bien para mi país. Agradezco a mi familia, especialmente mi madre a quien dedico esta tesis, quienes me han dado su apoyo en todo momento. Igualmente manifiesto el gran aprecio que tengo por mis compañeros universitarios y docentes, con los que he compartido esta importante etapa de mi vida y no podría pasar por alto a mis entrenadores de Judo, que me han inculcado una disciplina sin duda formativa en varios aspectos de mi persona.

# Índice general

<b>1. Petrofísica de un yacimiento petrolero</b>	<b>7</b>
1.1. Porosidad . . . . .	7
1.2. Permeabilidad y permeabilidad relativa . . . . .	9
1.3. Presión capilar . . . . .	10
<b>2. Los procesos de la recuperación mejorada</b>	<b>13</b>
2.1. Inyección de agua . . . . .	14
2.2. Inyección de gas . . . . .	14
2.3. Recuperación mejorada por procesos térmicos . . . . .	15
2.4. Recuperación mejorada por inyección de aditivos químicos . . . . .	16
2.5. Recuperación mejorada por inyección de solventes . . . . .	17
<b>3. Formulación axiomática básica de modelos matemáticos en la recuperación mejorada del petróleo</b>	<b>19</b>
3.1. Ecuaciones de balance . . . . .	20
3.2. Sistemas multifásicos . . . . .	20
3.3. Modelo del Petróleo Negro . . . . .	21
3.4. Modelo bifásico, incompresible e inmiscible . . . . .	25
<b>4. El método de Newton-Raphson</b>	<b>27</b>
4.1. Aplicaciones del método de Newton-Raphson . . . . .	29
4.1.1. Problemas de optimización . . . . .	29
4.1.2. Sistemas de ecuaciones no lineales de una variable . . . . .	30
4.1.3. Sistemas de ecuaciones no lineales de dos variables . . . . .	30
4.1.4. Sistemas de ecuaciones no lineales de N variables . . . . .	30
4.1.5. Ecuaciones Diferenciales Parciales no lineales en general . . . . .	32
4.2. Aplicación a ecuaciones de flujo monofásico . . . . .	34
<b>5. Newton-Raphson en modelos de petróleo</b>	<b>37</b>
5.1. Modelo Buckley-Leverett . . . . .	37
5.1.1. Modelo en 1D . . . . .	38
5.1.2. Modelo en 2D . . . . .	43
5.1.3. Modelo en 3D . . . . .	46
5.2. Modelo bifásico incompresible e inmiscible . . . . .	48
5.3. Análisis de resultados . . . . .	50
5.3.1. Análisis de convergencia con el incremento de $\Delta t$ . . . . .	52
5.3.2. Análisis de error de aproximación . . . . .	55
5.3.3. Validación y Comparación: IMPES vs Newton-Raphson . . . . .	57
<b>6. Conclusiones</b>	<b>61</b>



# Introducción

Los modelos básicos de la producción petrolera que simulan el comportamiento de un yacimiento durante la extracción del crudo, están representados por sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales.

Las herramientas matemáticas disponibles actualmente, que resuelven numéricamente estos problemas son eficientes casi exclusivamente para ecuaciones lineales. El método de Newton-Raphson permite tratar ecuaciones no lineales mediante una solución iterativa de ecuaciones lineales. El método consiste de un tratamiento del sistema no lineal, dicho tratamiento es la linealización que resulta en la construcción de su Jacobiano asociado, que al ser resuelto se aproxima a la solución del sistema de ecuaciones original (no lineal). La construcción y solución del Jacobiano se realiza de manera iterativa hasta que la solución converge, para un sólo paso del tiempo, de esta forma a cada paso del tiempo le corresponde un ciclo iterativo del método de Newton.

Haciendo uso de la formulación axiomática de sistemas terrestres (Herrera et al. 2006 [1]), se aborda el modelo básico de un sistema de flujo multifásico, a partir del cual se deriva el modelo de petróleo negro (Chen et al, 2006 [2]). El cual es un modelo trifásico que tiene como objetivo predecir el comportamiento de los fluidos agua, aceite y gas, contenidos dentro de un yacimiento petrolero, en el que se resuelven simultáneamente las variables independientes  $p_o$ ,  $S_w$ ,  $S_g$  (presión aceite, saturación agua y saturación gas). Este modelo nos muestra un panorama completo de las variables y parámetros involucrados en un modelo típico de petróleo. Sin embargo, el objetivo de esta tesis es desarrollar y aplicar el método de Newton en un modelo de petróleo de forma clara y didáctica, para lograrlo es necesario reducir la complejidad matemática del modelo. Por lo tanto, se resolverá un modelo de flujo bifásico que es una versión mucho más simple del modelo de petróleo negro, donde se resuelven los campos  $p_o$ ,  $S_w$  simultáneamente. Además, se plantean dos versiones del modelo bifásico, con una deferencia sutil, simplemente uno de éstos incluye la presión capilar con el que se espera obtener mayor estabilidad numérica.

La no linealidad de los modelos bifásicos es producida por uno de sus coeficientes, conocidos como movilidades, éstas pueden ser lineales o cuadráticas, lo que marca un cambio notable en el comportamiento de las soluciones de los campos de presión ( $p_o$ ) y saturación ( $S_w$ ). Los sistemas de ecuaciones de dichos modelos son discretizados con el método de Volumen Finito y se resuelve el problema de discontinuidad de las saturaciones en las paredes del volumen de control, utilizando el esquema *upwind*.

Las soluciones de los modelos bifásicos son resueltas con un código implementado en `python`, con el cual, se ha elaborado un análisis de desempeño del método de Newton-Raphson, junto con un análisis de error de aproximación al refinar la malla. Por último, se hace una comparación de las soluciones obtenidas con el método de linealización IMPES (*Implicit Pressure Explicit Saturation*) utilizando el software TUNAM, mismo con el que se hace la validación.



# Capítulo 1

## Petrofísica de un yacimiento petrolero

### 1.1. Porosidad

La porosidad puede definirse como la medida de la capacidad de almacenar fluidos dentro de un cuerpo de roca. Consecuentemente, el registro de datos de porosidad son usados para estimar cuantitativa y cualitativamente, el volumen de almacenamiento de hidrocarburos en un yacimiento petrolero. Es una de las propiedades de roca mas importante por sus aplicaciones; es utilizada en la caracterización de facies litológicas, cálculo de la saturación de fluidos, cálculo del volumen de los fluidos en el reservorio y estimación de la permeabilidad utilizando transformaciones permeabilidad-porosidad. Las medidas de la porosidad pueden hacerse de manera directa en laboratorio analizando núcleos de pozos o indirectamente por registros geofísicos de pozos, tales como: **Densidad**, medición de la atenuación de rayos gama, **Neutrón**, captura de neutrones o rayos gama, **Registros Acústicos**, refracción de ondas y **Respuesta Magnética Nuclear**, excitación de átomos de hidrógeno en espacio de poros.

El espacio poroso de una roca puede encontrarse en dos formas: una con interconexión entre los poros que permite el flujo del fluido contenido, y se conoce como **porosidad efectiva**, figura (1.1), la otra es un estado poroso sin conexión entre poros que impide el flujo. Lo segundo, no es considerado en los modelos de EOR (Enhanced Oil Recovery). La porosidad frecuentemente es registrada en porcentaje, pero en cálculos siempre debe de ser representada como una fracción y se calcula como la razón del volumen poroso a el volumen total de la roca (bulk volume), el volumen de la fase sólida o matriz será la diferencia entre el volumen de poro y el volumen total, en adelante no se hará distinción entre **porosidad** y **porosidad efectiva** para fines prácticos son iguales.

$$porosidad = \frac{VolumenPoro}{VolumenTotal}$$
$$\phi = \frac{V_p}{V_T} \quad (1.1)$$

Los valores de la porosidad mas comúnmente encontrados en formaciones naturales están dentro del rango 0.1 a 0.4. La porosidad de un medio permeable depende fuertemente de la variación del poro local o distribución del tamaño de grano, y depende débilmente del tamaño de poro promedio.

En una roca pueden presentarse dos tipos de porosidad, conocidas como **porosidad primaria** y **secundaria**. La **porosidad primaria** es aquella que se formó al tiempo del proceso de sedimentación que generó la roca. La **porosidad secundaria** se forma después de la formación de la roca, generalmente es producida por procesos químicos como disolución en rocas carbonatadas o por procesos físicos, como fracturas por fallas y cambios de temperatura.

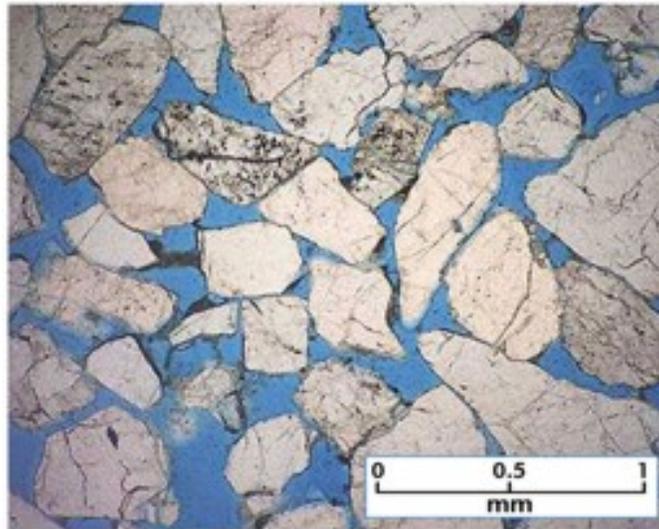


Figura 1.1: Imagen en microscopio de un núcleo de pozo, porosidad efectiva de una arenisca.

## 1.2. Permeabilidad y permeabilidad relativa

La permeabilidad es la medida de la capacidad de una roca de transmitir un fluido a través de sus poros. En el caso de un medio poroso completamente saturado por un fluido, es decir, éste fluido ocupa el 100 % del volumen de poro, la medida de la permeabilidad se le conoce como **permeabilidad absoluta**. Si sólo hay un fluido, la permeabilidad es una propiedad intrínseca de la roca y no depende de las propiedades del fluido. Cuando el medio poroso está ocupado por más de un fluido, hay una medida de la permeabilidad correspondiente a cada fluido debido a la presencia de los demás; y se le denomina **permeabilidad efectiva**. A partir de estos conceptos se define la **permeabilidad relativa**, que es la razón de la permeabilidad efectiva entre la permeabilidad absoluta. Considerando un medio poroso que contiene  $\alpha$  fluidos o fases, la razón se expresa de la siguiente forma:

$$k_{r\alpha} = \frac{k_{\alpha}}{k_a} \quad (1.2)$$

En la ecuación (1.1),  $k_{r\alpha}$  denota la permeabilidad relativa de la fase  $\alpha$ , el término  $k_{\alpha}$  es la permeabilidad efectiva de la fase  $\alpha$  y  $k_a$  es la permeabilidad absoluta intrínseca del medio poroso.

Por ejemplo, en un medio poroso saturado por tres fases: agua, aceite y gas ( $w, o, y g$ ). Sus respectivas permeabilidades relativas se expresan:

$$k_{rw} = \frac{k_w}{k_a} \quad k_{ro} = \frac{k_o}{k_a} \quad k_{rg} = \frac{k_g}{k_a} \quad (1.3)$$

La permeabilidad absoluta  $k_a$  es medida en laboratorio con núcleos de pozo, a partir de mediciones de velocidades de flujo a distintas presiones con un fluido de viscosidad conocida. Cualquier fluido puede usarse para determinar la permeabilidad absoluta. En la práctica se utiliza aire, ya que resulta más práctico secar los poros del núcleo para lograr que el medio poroso esté 100 % saturado (Nnaemeka, [8]).

Las principales formas de medir la permeabilidad son a través de registros geofísicos de pozos, pruebas de presión transitoria y análisis de núcleos. Cada técnica de medición da resultados a diferentes escalas y algunas dan información a mayor penetración dentro de la roca y sirven para calibrar lecturas entre sí. Finalmente, toda esta información se integra para caracterizar la permeabilidad del yacimiento.

La estimación de la permeabilidad relativa, al igual que la permeabilidad absoluta, pueden calcularse a partir de datos por registros geofísicos de pozo y análisis de núcleos mencionados anteriormente, o bien por correlaciones empíricas. Estas correlaciones deben ser usadas cuando no hay datos de campo disponibles. Las ecuaciones de correlación más usadas en la industria para la estimación de la permeabilidad relativa son modificaciones de las

ecuaciones de Corey, (Nnaemeka, [8]). La expresión básica de las ecuaciones de Corey son:

$$\begin{aligned} k_{rwp} &= (S_{wp}^*)^4 \\ k_{rnwp} &= (1 - S_{wp}^*)^2 \left[ 1 - (S_{wp}^*)^2 \right] \end{aligned} \quad (1.4)$$

Donde,  $k_{rwp}$  = permeabilidad relativa de la fase mojadora;  $S_{wp}^*$  = saturación normalizada de la fase mojadora y  $k_{rnwp}$  = permeabilidad relativa de la fase no mojadora. Para procesos de drenaje, la saturación normalizada de la fase mojadora se expresa:

$$S_{wp}^* = \frac{S_{wp} - S_{wpr}}{1 - S_{wpr}} \quad (1.5)$$

Para un proceso de imbibición, la expresión de la saturación normalizada de la fase mojadora será:

$$S_{wp}^* = \frac{S_{wp} - S_{wpr}}{1 - S_{wpr} - S_{nwpr}} \quad (1.6)$$

En las ecuaciones (1.4) y (1.5),  $S_{wp}$  = saturación de la fase mojadora;  $S_{wpr}$  = saturación residual de la fase mojadora;  $S_{nwpr}$  = saturación residual de la fase no mojadora. Ahora, al aplicar las ecuaciones de Corey (1.3) a un sistema donde la fase mojadora es el agua y la fase no mojadora es el aceite, y asumiendo un proceso de desplazamiento de aceite por imbibición. Se puede replantear la ecuación (1.5) con la expresión:

$$S_w^* = \frac{S_w - S_{wi}}{1 - S_{wi} - S_{orw}} \quad (1.7)$$

En la ecuación (1.6),  $S_w$  = fracción de la saturación del agua;  $S_{wi}$  = fracción de la saturación inicial del agua;  $S_{orw}$  = fracción de la saturación residual del aceite debido al agua. Al sustituir la ecuación (1.6) en la primera ecuación de (1.3) tenemos.

$$k_{rw} = \left( \frac{S_w - S_{wi}}{1 - S_{wi} - S_{orw}} \right)^4 \quad (1.8)$$

Esta nueva expresión de la permeabilidad relativa del agua  $k_{rw}$ , queda en función de la saturación residual del aceite. De manera análoga se obtienen las permeabilidades relativas del aceite y del gas.

$$k_{ro} = \left( \frac{1 - S_w - S_{orw}}{1 - S_{wi} - S_{orw}} \right)^2 \quad (1.9)$$

$$k_{rg} = \left( \frac{S_g - S_{gc}}{1 - S_{wi} - S_{org} - S_{gc}} \right)^2 \quad (1.10)$$

La ecuación (1.8), corresponde a la permeabilidad relativa del aceite en función de la saturación inicial del agua  $S_{wi}$ . En la ecuación (1.9) tenemos la permeabilidad relativa del gas en función de la saturación residual del aceite (Nnaemeka, [8]). Mas adelante se introducirá el concepto de movilidad que es función de la saturación, eligiendo la expresión conveniente de acuerdo al problema que se este tratando.

Las medidas de la permeabilidad relativa en la practica son medidas en sistemas de dos fases, para sistemas trifásicos resulta muy complicado hacer estos cálculos por lo que se apoya en los resultados de sistemas bifásicos. En la figura (1.2) se muestran las curvas típicas de un sistema agua-aceite, donde el agua desplaza al aceite. El valor  $S_{wi}$  es la saturación a la que el agua empieza a fluir y puede llamarse saturación crítica o saturación inicial. Al extremo opuesto tenemos  $1 - S_{orw}$  la saturación residual, en la cual el aceite deja de desplazarse.

El concepto de permeabilidad relativa como una constante de proporcionalidad, rige la velocidad de flujo del fluido y es demostrado con la ecuación de Darcy en una sola fase, para un flujo horizontal en un medio poroso. Tema que se abordara al introducir las ecuaciones constitutivas del modelo del petroleo negro.

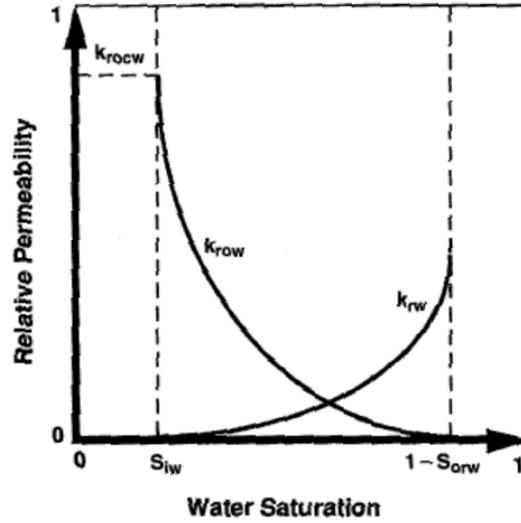


Figura 1.2: Curvas de permeabilidad relativa de un sistema agua-aceite. El agua es la fase mojadora (Turgay, [9]).

### 1.3. Presión capilar

La presión capilar se presenta cuando en el espacio poroso de una roca se encuentra saturado por dos o más fases. En un sistema de dos fases, la presión capilar es por definición; la presión de la fase no mojadora menos la presión de la fase mojadora.

$$p_{cow} = p_o - p_w = f(S_w) \quad (1.11)$$

La ecuación (1.10) representa la presión capilar de un sistema agua-aceite. La presión del aceite  $P_o$  correspondiente a la fase no mojadora, y la presión del agua  $P_w$  correspondiente a la fase mojadora.

$$p_{cgo} = p_g - p_o = f(S_g) \quad (1.12)$$

En el caso de un sistema bifásico de gas y aceite, su presión capilar estará representado por la ecuación (??).

La presión capilar se puede plantear en función de la saturación y del historial de la saturación, esto quiere decir que depende del proceso, ya sea de drenaje o imbibición. Estos procesos dependerán de las condiciones dadas de un yacimiento con fluidos a temperatura y composición constantes (Turgay, [9]).

En la figura (1.3), se muestra la dependencia de la presión capilar  $p_{cow}$  con el proceso (imbibición o drenaje), la saturación inicial y la saturación residual del aceite. Se puede ver como la saturación de la fase mojadora (agua) no puede ser desplazada al aplicar un gradiente de presión, cuando el drenaje se encuentre en la saturación  $S_{wi}$ . De la misma forma, la saturación de la fase no mojadora (aceite) no puede ser desplazada al aplicar un gradiente de presión, cuando la saturación esta en  $S_{orw}$ , para un proceso de imbibición.

La figura (1.4) representa la dependencia de la presión capilar  $p_{cgo}$  con la saturación del gas y el historial de la saturación (drenaje o imbibición). En éste caso, el aceite siempre sera la fase mojadora y el gas la fase no mojadora, la saturación de fase-mojadora irreductible sera  $S_{org}$  y la saturación de fase-no-mojadora irreductible sera  $S_{gc}$ . Nuevamente, los puntos limite de saturación de las curvas de presión capilar son congruentes con los puntos limite de saturación de las curvas de permeabilidad relativa de un sistema aceite-gas.

Cuantitativamente las curvas de presión capilar indican el grado de mojabilidad de la roca, la distribución del tamaño de poro y su saturación de agua congénita.

Las ecuaciones presentadas en este capítulo se utilizaran en el resto del texto. Al introducir todas estas ecuaciones evitaremos derivaciones repetitivas en los siguientes capítulos.

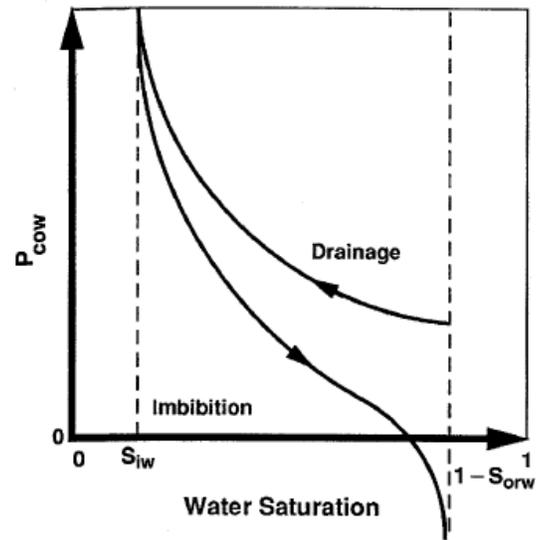


Figura 1.3: Presión capilar de un sistema agua-aceite. El agua es la fase mojadora (Turgay, [9]).

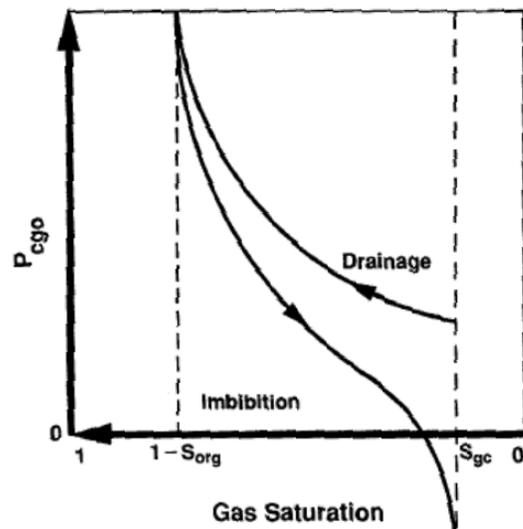


Figura 1.4: Presión capilar de un sistema aceite-gas. El aceite es la fase mojadora (Turgay, [9]).



## Capítulo 2

# Los procesos de la recuperación mejorada

La vida de un pozo de producción pasa por tres fases principales, en las que se utilizan diversas técnicas para mantener la producción del crudo en su máximo nivel. El objetivo principal de éstas técnicas consiste en forzar el flujo del crudo hacia la cabeza del pozo de producción donde puede ser bombeado a la superficie. Las fases de recuperación en la vida de un pozo comúnmente son.

- Recuperación Primaria. Se utiliza la presión natural del yacimiento para la extracción del crudo, la cual es producida por el gas ya existente en condiciones naturales.
- Recuperación Secundaria. Una vez agotada la presión natural del yacimiento se mantiene la presión mediante la inyección de agua o gas.
- Recuperación Terciaria. En esta etapa se introducen fluidos que pueden reducir la viscosidad del aceite y mejorara el flujo del crudo, generalmente son gases miscibles con el aceite como el  $CO_2$  y otros agentes como el vapor, oxígeno, soluciones con polímeros, gel, surfactantes, soluciones polímero-surfactantes, soluciones alcalino-polímero-surfactante o soluciones con microorganismos.

Cabe mencionar que en la práctica no siempre se aplica éste orden en las fases de explotación, la aplicación de cada una de éstas etapas o procesos de recuperación esta sujeta a las características del yacimiento. Por ejemplo, se puede dar el caso de un yacimiento con aceite sumamente viscoso y a baja presión, en tal caso resulta lógico primero reducir la viscosidad del crudo con la aplicación de algún polímero (terciaria) y posteriormente, aumentar la presión del yacimiento seguido de un proceso de barrido del crudo por inyección de gas o agua (secundaria). Sin embargo, antes de hacer uso de algún método de EOR (Enhanced Oil Recovery), se requiere de un extenso trabajo de estudio para determinar los métodos y soluciones óptimas para la explotación del yacimiento.

Con muy pocas excepciones, las técnicas de recuperación mejorada entran en una de las siguientes categorías: Termal, Química o métodos Disolventes. Cada una de éstas puede dividirse en procesos individuales como se muestra en la tabla (2.1). A continuación se describirán algunos de los procesos mas usados y algunos otros procesos emergentes en la recuperación mejorada del petróleo.

Cuadro 2.1: Clasificaciones EOR

<u>Categorías</u>	<u>Procesos</u>
Termal	Vapor Combustión insitu Agua (caliente)
Químico	Polímero micelar Polímero Alcalinos
Solventes	Hidrocarburos miscibles $CO_2$ miscible $CO_2$ inmisible Nitrógeno Gases de combustión (miscible e inmisible)

## 2.1. Inyección de agua

La inyección de agua es un proceso en el cual el petróleo es desplazado hacia los pozos de producción por el agua, siendo esto posible por ser fluidos inmiscibles. Esta técnica ha sido una práctica común desde la década de los cuarenta.

Bajo condiciones favorables, la inyección de agua es un método efectivo para recuperar petróleo adicional de un reservorio, véase esquema de inyección figura (2.1). Los factores que son favorables para una alta recuperación por inyección de agua incluyen: baja viscosidad del petróleo, permeabilidad uniforme y continuidad del reservorio. Muchos proyectos de inyección de agua son "patrones de inyección" donde los pozos de inyección y producción son alternados en un patrón regular.

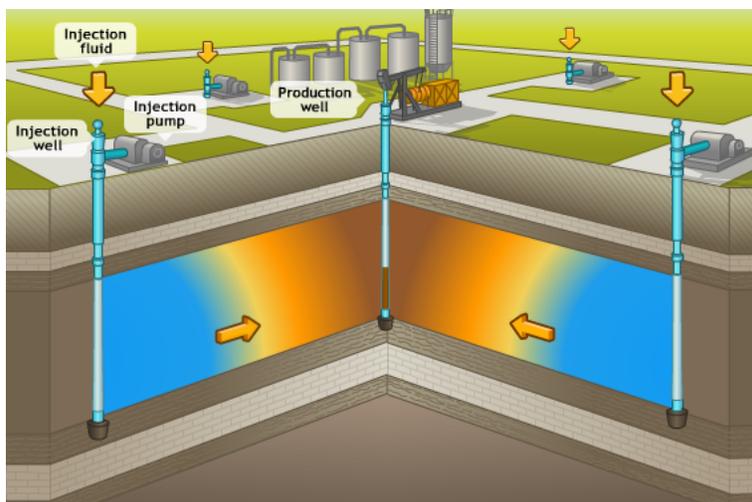


Figura 2.1: Inyección de agua. Imagen tomada de [www.snf-oil.com](http://www.snf-oil.com)

Una de las primeras consideraciones en la planificación de un proyecto de inyección de agua es localizar una fuente accesible de agua para su inyección. El agua salada es preferible al agua fresca, y en algunos casos se prohíbe el uso de agua fresca para la inyección.

La geometría y continuidad del reservorio son consideraciones fundamentales para el diseño del proceso de inyección. Si el reservorio tiene buzamiento, una inyección periférica podría tener mayor eficiencia de barrido que un patrón de inyección. La eficiencia del barrido puede cuantificarse como la fracción de la formación que está en contacto con el fluido inyectado. La continuidad desde el pozo de inyección hacia el productor es esencial para el éxito de la inyección, en cambio, reservorios muy fracturados son pobres candidatos para la inyección.

La profundidad del reservorio es otro factor importante a considerar en el diseño de una inyección de agua. El agua tiene que ser inyectada a una presión adecuada de manera que no fracture la formación. Si la "presión de fracturamiento" se excede, el agua inyectada podría fluir a través de una fractura hacia algún pozo de producción.

## 2.2. Inyección de gas

### Gas inmisible

El gas puede ser inyectado en el reservorio de petróleo, no solo para incrementar su recuperación, sino también para reducir la declinación de la tasa de producción y conservar el gas para la venta posterior. La reinyección del gas natural producido es una técnica bastante utilizada en la industria desde principios del siglo XX. Esta práctica también es conocida como "mantenimiento de presión", pero siendo éste un proceso para incrementar la recuperación de petróleo puede ser clasificado como un proyecto de recuperación mejorada.

El éxito de un proyecto de éste tipo, dependerá de la eficiencia con la que el gas inyectado desplaza al petróleo y de la fracción del reservorio que es barrido por el gas inyectado.

En un reservorio que es delgado y no tiene buzamiento, el gas es usado para desplazar petróleo de la misma manera que el agua, utilizando un patrón de inyección. A dicho proceso se le llama *inyección dispersa de gas* y usualmente no resulta en una alta recuperación, ya que el gas puede canalizar entre el pozo inyector y productor sin desplazar mucho petróleo. La recuperación de hidrocarburo por inyección de gas es un proceso inmisible a menos que el gas inyectado se efectuó a alta presión o enriquecido con hidrocarburos livianos. La presión requerida para la inmiscibilidad depende de la composición del petróleo y el gas inyectado.

### Gas a alta presión o miscible

La inyección de gas a alta presión es un proceso miscible, significa que el gas inyectado se mezclará con el petróleo del reservorio para formar una fase homogénea simple. El proceso de recuperación miscible reducirá la saturación residual de petróleo virtualmente a cero en las partes del reservorio que son barridas por el flujo miscible.

Un barrido de eficiencia pobre con gas inmisible es común, sin embargo los procesos miscibles son usualmente mas costosos que la inyección de agua o inyección inmisible de gas. La mínima presión para el desplazamiento miscible del petróleo con gas a alta presión es aproximadamente 3,000 [psi]; por lo tanto, la profundidad del reservorio está limitada a un mínimo de 5,000 pies. El petróleo del reservorio debe contener suficiente cantidad de hidrocarburos intermedios (C2 - C6) y debe estar substancialmente bajo saturado con respecto al gas inyectado.

La recuperación de petróleo por el proceso de inyección de gas a alta presión es función de la presión de inyección. Las altas recuperaciones ilustradas en la literatura son las obtenidas en el laboratorio pero no son alcanzadas en el campo, debido principalmente a la baja eficiencia de barrido. Aunque un incremento en la presión aumentará la recuperación del crudo, esto incrementa también los requerimientos del gas y costos de inyección.

## 2.3. Recuperación mejorada por procesos térmicos

### Inyección de Vapor

Es un método muy utilizado en yacimientos que producen petróleo de baja gravedad *API* (alta viscosidad). La inyección de vapor puede ser cíclica o continua, la segunda es utilizada cuando se tiene petróleo de muy alta viscosidad pero el costo capital es mucho mayor que la cíclica, considerando además que el yacimiento cumpla con ciertas condiciones (profundidad, temperatura y presión) adecuadas para la inyección continua.

El propósito de la inyección de vapor es reducir la viscosidad del petróleo. En un proceso de inyección cíclica se puede utilizar un mismo pozo para la extracción y producción. Los ciclos consisten en una inyección continua de vapor durante dos a tres semanas a una razón de 1,000 barriles de agua por día (en forma de vapor), con un periodo de cierre con el tiempo suficiente para que el vapor condense sin disipar la presión substancialmente. Después del periodo de cierre, el pozo producirá petróleo por un periodo que puede durar de un mes a un año. El ciclo de inyección, cierre y producción se repite mientras que el método mantenga al yacimiento en producción, usualmente cada ciclo tiene una producción menor al ciclo previo. Algunos proyectos de inyección cíclica terminan por convertirse en inyección continua si las condiciones del yacimiento lo permiten.

Una de las ventajas de la inyección cíclica es el bajo costo de probar el proceso en el reservorio, así como los costos de desarrollo comparados con otros procesos termales alternativos. Las desventajas del proceso cíclico incluye el riesgo de que una expansión térmica cause daños al tubo de revestimiento (casing) del pozo mientras el vapor esta siendo inyectado.

La recuperación del hidrocarburo por inyección cíclica de vapor es usualmente menor que la que se puede obtener por inyección continua de vapor.

### Combustión in situ

El proceso de *combustión in situ* se clasifica en dos tipos; combustión hacia delante (*forward*) y combustión reversa (*reverse*).

En el proceso de combustión hacia adelante, el reservorio es incendiado al combinar el hidrocarburo con aire y provocando la combustión de forma tal, que el frente de combustión se propaga a través del reservorio desde los pozos de inyección de aire hasta el pozo de producción mas cercano.

En el proceso de combustión reversa el frente de combustión se propaga desde el pozo de producción hacia el pozo de inyección de aire. Ya que el petróleo producido se mueve a través del frente de combustión, ocurrirá un *craqueo* térmico provocando que una porción del hidrocarburo forme vapor. Este método es aplicable en yacimientos con petróleo de muy alta viscosidad. Sin embargo, hasta la fecha no se han reportado proyectos comercialmente exitosos.

En la actualidad, la *combustión in situ* se limita al buzamiento de yacimientos homogéneos. La aplicación esta limitada por la falta un modelo fiable para simular la propagación del frente de combustión.

## 2.4. Recuperación mejorada por inyección de aditivos químicos

### Inyección de soluciones alcalinas

El agua de inyección puede ser convertida en una solución alcalina adicionando de uno a cinco por ciento en peso de hidróxido de sodio al agua. Otros agentes alcalinos utilizados son; ortosilicato de sodio, metasilicato de sodio y carbonato de sodio, con un ph de la solución inyectada en el rango de 11 a 13. Estos reactivos químicos reaccionan con los ácidos orgánicos presentes naturalmente en los hidrocarburos, con lo cual se logra generar y activar surfactantes naturales que traen como consecuencia directa mejoras en la movilidad del crudo a través del yacimiento y hacia los pozos productores, bien sea por reducción de la tensión interfacial, por un mecanismo de emulsificación espontánea o por cambios de la mojabilidad.

El hidrocarburo debe contener componentes ácidos para que reaccione con la solución inyectada. Se considera que el numero ácido mínimo para que el hidrocarburo responda a la solución alcalina sea del orden de 0.2 a 0.5 mg/g.

Aún cuando el método ha resultado eficiente para crudos con altos contenidos de ácidos orgánicos, uno de los mayores problemas de éste proceso es la reacción química de las soluciones alcalinas con los minerales dentro de la formación, fenómeno conocido como *formación de escamas*.

### Inyección de polímero

Este proceso consiste en reducir la movilidad de los fluidos desplazantes, al hacer el agua mas viscosa con la adición de un polímero soluble en agua, lo que conduce a una mejoría en la relación movilidad agua-petróleo, mejorando la eficiencia del barrido y por tanto un mejor porcentaje de recuperación. En la figura (2.2) se presenta un esquema a grandes rasgos del funcionamiento del método.

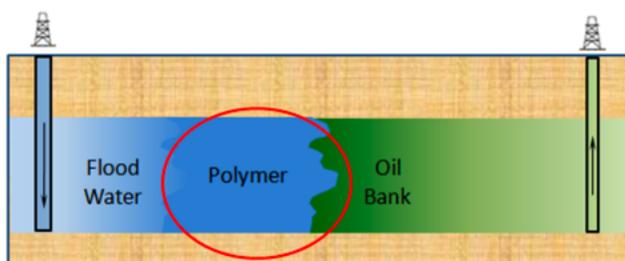


Figura 2.2: Esquema de inyección de una mezcla de polímero seguida de inyección de agua. Figura tomada de [www.petrotel.com](http://www.petrotel.com)

Algunos de los polímeros utilizados en la industria son los polisacáridos (o biopolímeros) y las poliacrilamidas

(PAA) y sus derivados. A bajas salinidades, las PAA presentan una mayor relación de movilidad debido al incremento de la viscosidad del agua y de la disminución de la permeabilidad al agua de la formación. Los biopolímeros son menos sensibles a los efectos de la salinidad, sin embargo son más costosos debido a los procesos de pretratamiento que requieren.

Además de la eficiencia del barrido, se le dan otros usos a la inyección de polímeros, tal como tratamientos en pozos de producción en donde intencionalmente se reduce el flujo de fluidos desde zonas que emiten cantidades excesivas de agua. En tratamientos de pozos de inyección se utiliza los polímeros para reducir el volumen de agua que ingresa a zonas de alta permeabilidad.

## 2.5. Recuperación mejorada por inyección de solventes

### Inyección de $CO_2$

La inyección de dióxido de carbono es uno de los procesos mas utilizados en la recuperación mejorada. Al ser inyectado dentro del reservorio ya sea en estado liquido o gas de acuerdo a las condiciones de presión y temperatura, genera un frente de desplazamiento que siendo miscible se mezcla con el hidrocarburo durante este proceso. Además, el  $CO_2$  puede también contribuir a la recuperación del petróleo al reducir la viscosidad de éste.

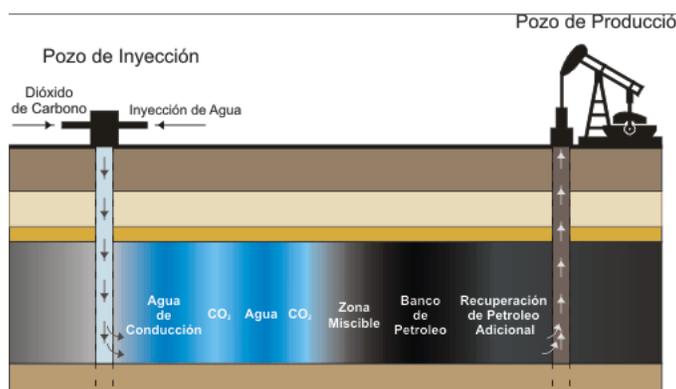


Figura 2.3: Proceso de inyección WAG. Imagen obtenida de [www.perisai.com](http://www.perisai.com)

Existen esencialmente dos métodos de inyección de  $CO_2$ . Uno de estos, es inyectar el  $CO_2$  en la periferia de un campo donde la producción ha ido decayendo por medios de recobro primario, barriendo el petróleo hacia los pozos de producción. En dicho proceso, el agua es usualmente inyectada alternadamente con el  $CO_2$  (*Water Alternating Gas* WAG), esquema de inyección ver figura (2.3). De esta forma se evita tener dos problemas comunes asociados con la inyección continua de dióxido de carbono: una saliente viscosa de  $CO_2$  a través del yacimiento y/o rebasamiento por gravedad del petróleo. Ambos factores reducen la eficiencia de barrido con el  $CO_2$ .

El otro método de recobro es el proceso "Huff and Puff" (Inyección Alterna). Donde el  $CO_2$  es inyectado dentro del pozo y es cerrado por dos o cuatro semanas. Más tarde el  $CO_2$  y el petróleo son extraídos de vuelta por el mismo pozo. Este ciclo de producción e inyección generalmente es repetido 2 o 3 veces. Cada ciclo de producción que se hace tiene una recuperación menor al ciclo previo, hasta que ya no es viable económicamente inyectar mas  $CO_2$ .

La mínima presión requerida para la miscibilidad es cerca de  $1500[psi]$ . El volumen de dióxido de carbono requerido frecuentemente es de 5 a 10 MCF por barril de petróleo recuperado. La factibilidad económica de dicho proceso está determinado por los precios locales de  $CO_2$ .

### Inyección de Nitrógeno

Los altos costos y limitaciones de disponibilidad de  $CO_2$  y gas natural, han hecho del nitrógeno una alternativa más para recuperación mejorada del petróleo con el uso de la técnica de un frente de desplazamiento con un gas

miscible. Además del costo, el uso del nitrógeno ofrece la ventaja de ser un agente no-corrosivo. La determinación del MMP ("Minimum Miscibility Pressure") del nitrógeno para un determinado tipo de petróleo es fundamental para asegurar un proceso exitoso del flujo miscible dentro del yacimiento. Esto implica una investigación previa para la establecer una MMP adecuada para cada reservorio en particular. La inyección de nitrógeno es un proceso emergente que aun requiere de mucho trabajo de investigación principalmente en la determinación de la MMP.

Una de las características principales del uso del nitrógeno para un desplazamiento miscible es la disminución de la pérdida de energía. El impacto que tiene la inyección de nitrógeno es la temperatura que alcanza comparados con los demás agentes utilizados. Esto permite conservar los fluidos calientes en su ascenso al cabezal, manteniendo baja la viscosidad del petróleo que fluye dentro de la tubería de producción, lo que implica a su vez mayor velocidad de flujo, menor tiempo de permanencia en el pozo y una tendencia a disminuir las pérdidas de energía en todo el proceso a pesar de que sus temperaturas de flujo sean mas elevadas.

## Capítulo 3

# Formulación axiomática básica de modelos matemáticos en la recuperación mejorada del petróleo

Empezaremos éste capítulo mencionando algunos conceptos fundamentales de la formulación axiomática de los modelos de *sistemas continuos* (Herrera et al, [1]).

Un cuerpo material llena completamente el espacio físico que ocupa; un cuerpo está compuesto por un conjunto de partículas que a cualquier tiempo ocupan un lugar en el espacio o *dominio*, dicho cuerpo será denotado por  $B$  y el dominio que ocupa estará denotado por  $B(t)$ . Cada partícula del cuerpo se identifica por sus coordenadas  $\underline{x} \equiv (X_1, X_2, X_3)$  tal que  $\underline{X} \in B$ , a su vez, cada punto material está asociado a un vector de posición  $p(\underline{X}, t)$  que indica su posición en el espacio físico en el instante  $t$ , es decir,  $B$  caracteriza al cuerpo, y la región que éste ocupa a través del tiempo es denotado por  $B(t)$ . El rango del tiempo puede ser cualquier número real dentro del intervalo  $(-\infty, \infty)$ . Aunque para fines prácticos y en la mayor parte de los casos de estudio, se considera un intervalo finito. Un supuesto básico de la teoría establece que dado un cuerpo  $B$  en cualquier tiempo  $t \in (-\infty, \infty)$ , a cada punto  $\underline{x} \in B(t)$  del espacio ocupado en un tiempo  $t$ , existe una y solamente una partícula correspondiente a ese punto en el cuerpo.

### Propiedades Intensivas

A cada partícula de un cuerpo material  $B$ , se le atribuyen propiedades representadas por funciones propias del problema que se está estudiando, éstas pueden ser densidad, porosidad, temperatura, etc. A dicha función se le llama *propiedad intensiva*, pueden ser funciones escalares o vectoriales y son función de  $\underline{X}$  y de  $t$ .

Una propiedad intensiva con valores vectoriales es equivalente a tres valores escalares, correspondientes a cada uno de sus componentes. Esta propiedad puede ser representada de dos formas dependiendo del enfoque en que se aborde el problema. La representación *Lagrangeana* denotada por  $\phi(\underline{X}, t)$  utiliza como sistema coordinado las coordenadas materiales, poniendo al observador sobre el cuerpo  $B$ , frecuentemente éste enfoque es utilizado en el estudio de cuerpos sólidos dado que los desplazamientos de las partículas son relativamente cortos. Por otro lado se tiene la representación *Euleriana*  $\psi(\underline{x}, t)$  cuyo sistema de referencia es el espacio físico, este enfoque es apropiado para el estudio de dinámica de fluidos por los largos desplazamientos que sufren las partículas. Los nombres de estas representaciones son en honor a los matemáticos *Joseph Louis Lagrange* (1736-1813) y *Leonard Euler* (1707-1783) respectivamente. Ambas representaciones asociadas a una misma propiedad, están relacionadas por la siguiente identidad.

$$\phi(\underline{X}, t) \equiv \psi(p(\underline{X}, t), t) = \psi(\underline{x}, t) \quad (3.1)$$

Es necesario ser específico en que  $\phi(\underline{X}, t) \neq \psi(\underline{x}, t)$  además, la ecuación anterior implica:

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \phi(p^{-1}(\underline{x}, t), t) \quad (3.2)$$

### Propiedades Extensivas

Consideremos ahora, funciones (propiedades) definidas para cada cuerpo  $B$  de un sistema continuo. Se define a la *propiedad extensiva* de un cuerpo material  $E(B,t)$ , como la integral de una propiedad intensiva sobre el dominio que ocupa su cuerpo:

$$E(B,t) \equiv \int_{B(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (3.3)$$

La ecuación (3.3) establece una correspondencia biunívoca entre las propiedades extensivas e intensivas, porque dada la representación *Euleriana*  $\psi(\underline{x}, t)$  de cualquier propiedad intensiva, su integral sobre el dominio ocupado por cualquier cuerpo define una propiedad extensiva.

Las propiedades intensivas se pueden definir por *unidad de volumen* como se ha hecho hasta el momento, o por *unidad de masa*, el uso de la primer definición ofrece mayor consistencia teórica, así como una correspondencia entre propiedades más directa. Sin embargo, frecuentemente se define a la propiedad intensiva por *unidad de masa*, se puede pasar de un concepto a otro con tan solo incluir en la propiedad intensiva la densidad de la masa. Cuando una propiedad intensiva es definida como una asociación de una propiedad extensiva por *unidad de masa*, es necesario ser riguroso y sistemático en el uso tal concepto. Por lo tanto, la propiedad intensiva asociada con la masa como una propiedad extensiva es la unidad y no la densidad (Herrera,[1]). Del cálculo integral se sabe que

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{E(t)}{V} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\int_{B(t)} \psi(\underline{\xi}, t) d\underline{\xi}}{V} \quad (3.4)$$

La ecuación (3.4) proporciona un procedimiento para determinar las propiedades extensivas experimentalmente; se mide la propiedad extensiva en un volumen pequeño del sistema, se le divide entre el volumen y el cociente que se obtiene es una buena aproximación de la propiedad extensiva. Con ésto, el uso del concepto de propiedad extensiva es consistente.

## 3.1. Ecuaciones de balance

Abordaremos los modelos matemáticos con dos tipos de ecuaciones de balance, las globales y las locales (Herrera, [1]). La *ecuación de balance global* (3.5) está asociada a la propiedad extensiva  $E(t)$ , esta ecuación establece el balance que un cuerpo material debe tener en su transcurso en el tiempo. Por ejemplo, si una propiedad extensiva fuese la masa de un cuerpo la ecuación de balance contabiliza los procesos de producción y destrucción de masa dentro del cuerpo, así como la masa que perdería o ganaría a través de su frontera. Este ejemplo de la masa como propiedad extensiva desde el punto de vista físico puede contradecir el *principio de conservación de la materia* al considerar procesos de producción y destrucción de materia, pero matemáticamente el concepto es válido, simplemente hay que ajustar la ecuación al modelo que se esta abordando.

$$\frac{dE(t)}{dt} = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \tau(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (3.5)$$

El primer integrando  $g(\underline{x}, t)$  representa las fuentes en el interior del cuerpo, si se tuviesen pérdidas en el interior del cuerpo basta con cambiar el signo de dicho término. La segunda integral representa los cambios de la propiedad extensiva a través de la frontera  $\partial B(t)$ , el término  $\tau(\underline{x}, t)$  representa el flujo de la propiedad,  $\underline{n}(\underline{x}, t)$  es el vector normal sobre la frontera, las mismas consideraciones con el signo son tomadas en cuenta si existe perdida de la propiedad extensiva a través de la frontera.

La *ecuación de balance local* (3.6) se define en términos de la propiedad intensiva. Esta se deriva a partir de la *ecuación de balance global* al aplicar el teorema de Gauss generalizado y hacer una correspondencia entre la propiedad intensiva y extensiva, además, de aplicar el concepto de velocidad de superficie (Herrera, [1]). Surge entonces la ecuación de balance local junto con la condición de salto, ésta última no se utilizara en éste trabajo dado que no se consideraran discontinuidades dentro del sistema.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \tau + g \quad (3.6)$$

La ecuación (3.6) también se conoce como *ecuación diferencial de balance local*. El término  $\psi$  es la propiedad intensiva,  $\underline{v}$  es la velocidad con la que se desplaza la propiedad,  $g$  y  $\nabla \cdot \tau$  son las fuentes en el interior y el flujo a

través de la frontera respectivamente. La asociación a los términos en éstas ecuaciones cambian dependiendo del contexto físico que se está tratando.

La aplicación de las ecuaciones de balance en sistemas continuos, se hace de manera local, es decir, las propiedades extensivas no son directamente usadas para expresar las condiciones de balance, sino que los balances son expresados en términos de las propiedades intensivas. La substitución de las propiedades extensivas por sus correspondientes propiedades intensivas es factible por la equivalencia que existe entre las ecuaciones de balance global (3.5) y local (3.6). En adelante se utilizará la *ecuación diferencial de balance local* para la formulación de los modelos matemáticos.

## 3.2. Sistemas multifásicos

En un sistema multifásico cada fase se asocia a un material con determinadas propiedades mecánicas, cuando se tiene más de una fase líquida, éstas pueden ser inmiscibles como es el caso del modelo de petróleo negro. Las fases se diferencian una de otra porque las partículas de cada fase se desplazan a distintas velocidades que precisamente es lo que distingue a un sistema multifásico. Por lo tanto, en este tipo de sistemas se definen tantas velocidades como fases existan.

Los modelos matemáticos básicos de los sistemas continuos están caracterizados por una familia de propiedades extensivas ( $E^1, E^2, \dots, E^N$ ) definidas cada una de ellas por (3.3).

$$E^\alpha(t) = \int_{B(t)} \psi_\alpha(\underline{x}, t) d\underline{x}$$

A partir del sistema de *ecuaciones diferenciales parciales* (3.6), que constituye el modelo matemático básico de un sistema, se obtiene una expresión para sistemas multifásicos al aplicar la *ecuación diferencial de balance* en términos de cada propiedad intensiva ( $\psi_\alpha$ ). De modo que el modelo básico resulta ser:

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi_\alpha v_\alpha) = \nabla \cdot \tau_\alpha + g_\alpha \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N. \quad (3.7)$$

El término  $\alpha$  indica la fase, consecuentemente se tienen  $N$  ecuaciones correspondientes a cada fase. De ésta forma, podemos plantear el procedimiento para construir un modelo multifásico con tan solo modificar ligeramente el procedimiento explicado en la sección anterior. Estos pasos son:

- Identificar una familia de propiedades extensivas.
- Cada propiedad extensiva se asocia a su correspondiente propiedad intensiva vinculada a cada fase del sistema.
- Se aplican las condiciones de balance a cada propiedad intensiva, utilizando la velocidad de partícula que corresponde a cada fase.

## 3.3. Modelo del Petróleo Negro

El modelo del petróleo negro es un sistema trifásico, que simula el flujo de las fases agua, aceite y gas, a través de un medio poroso. Los volúmenes de cada fase están bien definidos por los límites entre sus interfaces, al ser estas fases inmiscibles entre sí, a excepción de las fases gas y aceite, pero su inmiscibilidad depende de la presión a la que se encuentran. La matriz (roca porosa) puede considerarse como otra fase ya que también ocupa un volumen en el espacio físico, sin embargo es irrelevante dado que es una fase estática, por lo que no se considera en el modelo. De esta forma, el volumen del poro de la matriz será el volumen total  $V_{total} = V_{poro}$ , en el caso de un medio saturado, el volumen del poro estará totalmente ocupado por las fracciones de volumen  $V_w, V_o$  y  $V_g$ , que corresponden al volumen del agua (water), aceite (oil) y gas (gas) respectivamente<sup>1</sup>. Consecuentemente, surge una de las ecuaciones constitutivas asociada a la saturación.

Sea la fracción de volumen de cada fase denotada por:

$$S_\alpha = \frac{V_\alpha}{V_{poro}}, \quad \alpha = w, o, g;$$

<sup>1</sup>Resulta conveniente por claridad en las ecuaciones, ser consistente con la notación utilizada en la literatura escrita en idioma inglés.

Como ya se había mencionado, en un medio saturado el volumen total es:

$$V_{poro} = V_w + V_o + V_g$$

Por lo tanto, en el caso de un yacimiento saturado por las tres fases se cumple lo siguiente:

$$S_w + S_o + S_g = 1 \quad (3.8)$$

Se considera también, que en la fase agua no existe concentración de hidrocarburos al considerar la baja solubilidad del aceite y el agua, tampoco existe solubilidad entre en agua y el gas. El intercambio de masa entre el aceite y el gas se integra en el modelo al considerar en la fase-aceite una parte volátil y otra no volátil, este cambio de masa depende de la presión a la que se encuentra el yacimiento; o bien, su evolución durante la extracción del crudo. La presión en la que ocurre este cambio de fases se conoce como *punto de burbuja*.

El objetivo principal del modelo del petróleo negro es predecir el comportamiento de los fluidos contenidos en un yacimiento petrolero. Lo que implica calcular la distribución espacial y temporal de las variables presión ( $P_\alpha$ ) y saturación ( $S_\alpha$ ) en cada fase, así como la fracción de masa de la fase aceite que corresponde al gas disuelto y la porción de masa de aceite no volátil. Resumiendo, se plantean a continuación las hipótesis básicas del modelo del petróleo negro (Herrera, [1]):

1. Existen tres fases de fluidos en el yacimiento: fase-agua (w), fase-aceite (o) y fase-gas (g).
2. La solubilidad de hidrocarburos en la fase agua es despreciable y no es considerada en el modelo.
3. La fase aceite esta compuesta por una porción de gas disuelto y otra porción de gas no volátil.
4. Existe intercambio de masa entre la fase-aceite y fase-gas; es decir, el gas disuelto puede pasar a la fase-gas, e inversamente, el gas de la fase-gas puede disolverse en la fase-aceite.
5. Los procesos de difusión de masa de los fluidos en el yacimiento son despreciables.

#### Familia de propiedades extensivas

A continuación identificaremos las propiedades intensivas asociadas a cada fase. Como se había indicado antes la fase-agua consiste solamente de una componente y su propiedad intensiva asociada será su densidad  $\rho_w$ , las consideraciones son las mismas para la fase-gas  $\rho_g$ . En cambio para la fase-aceite que tiene dos componentes, su densidad será denotada por:

$$\rho_o = \rho_{Oo} + \rho_{Go}$$

La expresión anterior utiliza una nomenclatura con la que se hace explícita la componente (mayúsculas) y la fase (minúsculas). Es decir,  $\rho_{Oo}$  indica la densidad de la componente aceite en la fase aceite (porción no volátil),  $\rho_{Go}$  corresponde a la densidad de la componente gas disuelto en la fase aceite (porción volátil), ambos contenidos en el volumen  $V_o$ . Para las fases gas y agua resulta superfluo utilizar esta nomenclatura, será suficiente con tan solo indicar la fase.

Tenemos entonces como propiedades extensivas las masas de cada uno de los componentes.

$$\begin{aligned} M_w(t) &\equiv \int_{B_w(t)} \varepsilon S_w \rho_w d\mathbf{x} \\ M_{Oo}(t) &\equiv \int_{B_o(t)} \varepsilon S_o \rho_{Oo} d\mathbf{x} \\ M_{Go}(t) &\equiv \int_{B_o(t)} \varepsilon S_o \rho_{Go} d\mathbf{x} \\ M_g(t) &\equiv \int_{B_g(t)} \varepsilon S_g \rho_g d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (3.9)$$

En las ecuaciones (3.9), el término  $\varepsilon$  es la porosidad,  $S_w$ ,  $S_o$  y  $S_g$  son las fracciones de las saturación de cada fase. Ahora, es posible identificar la familia de propiedades intensivas dadas por el producto  $\varepsilon S_\alpha \rho_\alpha$  para  $\alpha = w, o, g$ . Al

aplicar la ecuación de balance local (3.7), obtenemos el sistema de ecuaciones básico del modelo trifásico (Herrera et al, [1]).

$$\frac{\partial \varepsilon S_w \rho_w}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon S_w \rho_w \underline{v}_w) = q_w \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \varepsilon S_o \rho_o}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon S_o \rho_o \underline{v}_o) = q_o \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \varepsilon S_o \rho_{G_o}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon S_o \rho_{G_o} \underline{v}_o) = q_o^o \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \varepsilon S_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon S_g \rho_g \underline{v}_g) = q_g^g \quad (3.13)$$

Además, se ha considerado que no existe intercambio de masa entre el agua y el gas, pero es posible tener fuentes como pozos de inyección o extracción, ecuaciones (3.10) y (3.11). Existe intercambio de masa entre las fases aceite y gas, los términos  $q_o^o$ ,  $q_g^g$  respectivos a las ecuaciones (3.12) y (3.13), son considerados como fuentes. A la variación por unida de volumen del gas que se disuelve en el aceite estará dado por  $q_o^o$ . La razón de cambio del gas que es liberado por la fase aceite hacia la fase gas está dada por  $q_o^g$ . Expuesto lo anterior, podemos expresar la conservación de masa entre fases con la siguiente ecuación.

$$q_o^o + q_o^g = 0 \quad (3.14)$$

Finalmente, podemos simplificar las ecuaciones (3.12) y (3.13), al sumarlas y sustituir (3.14).

$$\frac{\partial (\varepsilon (S_o \rho_{G_o} + S_g \rho_g))}{\partial t} + \nabla \cdot \{ \varepsilon (S_o \rho_{G_o} \underline{v}_o + S_g \rho_g \underline{v}_g) \} = 0 \quad (3.15)$$

Se ha planteado hasta aquí, el sistema de ecuaciones del modelo básico del petróleo negro, a partir de la formulación axiomática y balance de masas. Para establecer un modelo completo, es necesario incluir las *ecuaciones constitutivas* que incorporan información adicional del comportamiento físico, condiciones del yacimiento e información técnica.

### Ley de Darcy

La ley de Darcy es un modelo matemático que describe el flujo de modelos monofásicos en medios porosos. En la industria petrolera sirve para determinar el valor de la permeabilidad haciendo pruebas de laboratorio, con ciertas limitaciones. Una versión modificada de ecuación de Darcy (Muskat, 1949), se extendió a fin de modelar la velocidad de flujo en modelos multifásicos.

$$\phi \underline{u} = -\frac{1}{\mu} \underline{k} (\nabla p - \rho \hat{g} \nabla z) \quad (3.16)$$

Donde,  $\phi$  = porosidad,  $\underline{u}$  = velocidad de partícula del fluido,  $\underline{k}$  = tensor de permeabilidad,  $\mu$  = viscosidad dinámica del fluido,  $\hat{g}$  = aceleración gravitacional y  $\nabla z$  = vector direccional de la gravedad. La velocidad de Darcy se define como el producto  $\underline{u} = \phi \underline{u}$ . Esta ecuación constitutiva relaciona la velocidad del fluido con la presión del mismo, así como, su distribución espacial.

La ecuación (3.16), puede plantearse ahora en términos de la fase a la que se asocia.

$$\underline{u}_\alpha = -\frac{1}{\mu_\alpha} \underline{k}_\alpha (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \hat{g} \nabla z) \quad ; \quad \alpha = w, o, g. \quad (3.17)$$

Al plantear esta ecuación (3.17), debe considerarse el efecto del flujo simultaneo de las fases. Dado que la ecuación de Darcy esta definida para un sistema monofásico, surge un cambio conceptual de la permeabilidad efectiva  $\underline{k}_\alpha$ . Se incorpora entonces, la permeabilidad relativa, y se relaciona con la permeabilidad efectiva de la siguiente forma.

$$\underline{k}_\alpha = k_{r_\alpha} \underline{k} \quad ; \quad \alpha = w, o, g. \quad (3.18)$$

La permeabilidad relativa  $k_{r_\alpha}$  es una función que indica la tendencia de la fase ( $\alpha$ ) de mojar el medio poroso. Además, dada la interferencia que existe entre las fases, las permeabilidades efectivas  $\underline{k}_\alpha$  no pueden ser mayores que

la permeabilidad absoluta  $\mathbf{k}$ .

Sustituyendo la ecuación (3.17) en el sistema de ecuaciones del modelo básico del petróleo negro, ecuaciones (3.10), (3.11) y (3.15). Notéis que la velocidad de Darcy está definida como  $\mathbf{u}_\alpha = \varepsilon S_\alpha \mathbf{v}_\alpha$

$$\frac{\partial \varepsilon S_w \rho_w}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_w \mathbf{u}_w) = q_W \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \varepsilon S_o \rho_o}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_o \mathbf{u}_o) = q_O \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial (\varepsilon (S_o \rho_{G_o} + S_g \rho_g))}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{G_o} \mathbf{u}_o + \rho_g \mathbf{u}_g) = q_G \quad (3.21)$$

### Presión capilar

En el capítulo 2, se definió el concepto de presión capilar. Por claridad plantearemos nuevamente estas ecuaciones constitutivas establecidas para un modelo bifásico. Las ecuaciones (1.10) y (??) son respectivamente:

$$p_{cow} = p_o - p_w \quad ; \quad p_{cgo} = p_g - p_o$$

Estas ecuaciones son aplicables al modelo trifásico ya que las presiones de cada fase ( $p_w$ ,  $p_o$ ,  $p_g$ ) pueden ser planteadas en términos de estas dos ecuaciones.

### Factor Volumétrico de Formación y Razón de solución gas-aceite

Para el modelo del petróleo negro es conveniente trabajar con ecuaciones de conservación de *volúmenes estándar* en vez de las ecuaciones de conservación de masa (Chen, [2]). El término **Volumen Estándar**, se refiere al volumen del crudo una vez estabilizado a presión y temperatura de superficie, también conocido en la industria petrolera como *stock-tank oil*. Precisamente por cuestiones económicas, las reservas de petróleo son medidas en volúmenes de *stock-tank oil* en vez de volúmenes a condiciones del yacimiento. A la proporción del volumen de *stock-tank oil* con el volumen bajo condiciones del yacimiento se le conoce como **Factor Volumétrico de formación** (*Formation Volume Factor*) y se denota como:

$$B_o(p, T) = \frac{V_o(p, T)}{V_{O_s}} \quad (3.22)$$

Donde;  $V_o(p, T)$  es el volumen del aceite en el yacimiento y  $V_{O_s}$  es el volumen del aceite en condiciones estándar ( $O_s$  por sus siglas en ingles, *Oil standard*). Este factor volumétrico de formación se aplica a cada una de las fases. Por lo tanto, definimos los volúmenes en condiciones estándar para cada una de las fases como:

$$V_{W_s} = \frac{W_W}{\rho_{W_s}} \quad ; \quad V_{O_s} = \frac{W_O}{\rho_{O_s}} \quad ; \quad V_{G_s} = \frac{W_G}{\rho_{G_s}} \quad (3.23)$$

Ahora, las densidades de cada fase bajo condiciones de presión y temperatura del yacimiento:

$$\rho_w = \frac{W_W}{V_w} \quad ; \quad \rho_o = \frac{W_O + W_G}{V_o} \quad ; \quad \rho_g = \frac{W_G}{V_g} \quad (3.24)$$

Enseguida definiremos la fracción de masa de las componentes aceite y gas en la fase aceite, denominada como **razón de solubilidad aceite-gas**. También medida en condiciones estándar.

$$\mathbf{R}_{so}(p, T) = \frac{V_{G_s}}{V_{O_s}} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{R}_{so} = \frac{W_G \rho_{O_s}}{W_O \rho_{G_s}} \quad (3.25)$$

Al sustituir las expresiones (3.22) en (3.23) en sus respectivas fases y luego sustituimos (3.23) y (3.24) en el sistema de ecuaciones del modelo del petróleo negro (3.18), (3.19) y (3.20). Obtenemos nuestro sistema de ecuaciones en términos de "Volúmenes Estándar".

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\varepsilon S_w \rho_{W_s}}{B_w} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\rho_{W_s} \mathbf{u}_w}{B_w} \right) &= q_W \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\varepsilon S_o \rho_{O_s}}{B_o} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\rho_{O_s} \mathbf{u}_o}{B_o} \right) &= q_O \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon \left( \frac{S_o R_{so} \rho_{G_s}}{B_o} + \frac{S_g \rho_{G_s}}{B_g} \right) \right) + \nabla \cdot (R_{so} \rho_{G_s} \mathbf{u}_o + \rho_{G_s} \mathbf{u}_g) &= q_G \end{aligned} \quad (3.26)$$

Desarrollando la ecuación de Darcy (3.17), introduciremos los términos potenciales, considerando que la densidad  $\rho_\alpha$  no varía en el espacio.

$$\Phi_\alpha = p_\alpha - \rho_\alpha \hat{g}z \quad ; \quad \alpha = w, o, g. \quad (3.27)$$

Y definiendo el término de transmisibilidad:

$$\mathbf{T}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha B_\alpha} \mathbf{k} \quad ; \quad \alpha = w, o, g. \quad (3.28)$$

Sustituimos ahora, los términos (3.26) y (3.27) en el sistema de ecuaciones (3.25), despejando los términos de advección y dividiendo entre las densidades estándar siendo éstas constantes.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\varepsilon S_w}{B_w} \right) &= \nabla \cdot (\mathbf{T}_w \nabla \Phi_w) + \frac{q_w}{\rho_{W_s}} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\varepsilon S_o}{B_o} \right) &= \nabla \cdot (\mathbf{T}_o \nabla \Phi_o) + \frac{q_o}{\rho_{O_s}} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \varepsilon \left( \frac{S_o R_{so}}{B_o} + \frac{S_g}{B_g} \right) \right) &= \nabla \cdot (R_{so} \mathbf{T}_o \nabla \Phi_o + \mathbf{T}_g \nabla \Phi_g) + \frac{q_G}{\rho_{G_s}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Hasta este punto las ecuaciones (3.28) plantean el modelo de petróleo negro completamente. Abarcando de manera general los parámetros involucrados de un modelo isotérmico, y es posible reducir estas ecuaciones al aplicarlas a un problema bien planteado. Enseguida analizaremos la dependencia de los términos hasta ahora definidos y las variables independientes del modelo. De acuerdo con Chen [2], este modelo está planteado para tener 3 variables independientes que se resolverán simultáneamente ( $p_o$ ,  $S_w$ ,  $S_o$ ), para el caso del estado saturado ( $S_g \neq 0$ ). En adelante se considera a la presión del aceite simplemente como la presión  $p_o = p$ , las demás presiones se incorporan en términos de la presión capilar. La porosidad es función de la presión  $\varepsilon(p)$ , y sus **potenciales y transmisibilidades** son variables dependientes tal que:  $\Phi_\alpha(p)$  y  $\mathbf{T}_\alpha(p, S_w, S_o)$ .

La **porosidad** se aproximará por una función lineal:

$$\varepsilon = \varepsilon^0 (1 + c_R (p - p^0)) \quad (3.30)$$

Donde,  $\varepsilon^0$  es la porosidad a la presión de referencia  $p^0$  y  $c_R$  es la compresibilidad de la roca.

Las **transmisibilidades** (3.27)  $\mathbf{T}_\alpha$ , son función de las permeabilidades, viscosidad y factor volumétrico de formación y cada uno de estos factores se aproximan de la siguiente forma.

Para un sistema de tres fases la determinación de las **permeabilidades relativas** es mucho más complejo que en un sistema bifásico. De acuerdo con Leverett y Lewis (1941), éstas mediciones han sido experimentales y muestran que las permeabilidades relativas para las fases mojadoras y no-mojadoras en un sistema trifásico, son función de sus respectivas saturaciones al igual que en un sistema bifásico, a excepción de la fase intermedia aceite.

$$k_{rw} = k_{rw}(S_w) \quad , \quad k_{rg} = k_{rg}(S_g) \quad , \quad k_{ro} = k_{ro}(S_w, S_g)$$

Para simplificar la carga de trabajo en el cálculo numérico, es recomendable utilizar los modelos *I* y *II* de Stone para las formulaciones de las permeabilidades relativas (Chen, [2]).

**Viscosidades**  $\mu_\alpha$ . La viscosidad del agua es considerada como constante mientras que para las demás fases son función de la presión.

$$\begin{aligned} \mu_o &= \mu_{ob}(p_b) (1 + c_\mu (p - p_b)) \\ \mu_g &= \mu_g(p) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Donde,  $\mu_{ob}$  es la viscosidad a presión  $p_b$  y  $c_\mu$  es la compresibilidad viscosa del aceite, y tenemos a la viscosidad del gas como función de la presión.

El **factor volumétrico de formación**  $B_\alpha$ , estará definido por las ecuaciones (3.21) y (3.22).

Los términos **potenciales** (3.26), serán función de la presión y de la densidad (a condiciones de yacimiento), que a su vez, también son función de la presión. Las densidades están dadas por:

$$\begin{aligned}\rho_w &= \frac{\rho_{W_s}}{B_{wi}} (1 + c_w(p - p_0)) \\ \rho_o &= \rho_{O_o} + \rho_{G_o} \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{\rho_{O_s}}{B_o} + \frac{R_{so}\rho_{G_s}}{B_o} \\ \rho_g &= \frac{\rho_{G_s}}{B_g}\end{aligned}\tag{3.32}$$

Donde,  $B_{wi}$  es el factor volumétrico de formación del agua a condiciones iniciales de la presión de formación  $p_0$ ,  $c_w$  es la compresibilidad del agua, la viscosidad del agua  $\mu_w$  es constante. El factor volumétrico de formación del aceite ( $B_o$ ) es función de la presión y para el gas ( $B_g$ ) es función de la presión y temperatura:

$$\begin{aligned}B_o &= B_{ob}(p_b) (1 - c_o(p - p_b)) \\ B_g &= \frac{ZT}{p} \frac{p_s}{T_s}\end{aligned}\tag{3.33}$$

Siendo  $B_{ob}$  el factor volumétrico de formación a presión  $p_b$  *bubble point pressure*,  $c_o$  es la compresibilidad del aceite,  $Z$  es factor de desviación del gas,  $T$  es la temperatura, por último  $p_s$  y  $T_s$  son la presión y temperatura a condiciones estándar.

### 3.4. Modelo bifásico, incompresible e inmisible

El modelo bifásico inmisible e incompresible, describe el comportamiento de un proceso de inyección de agua para desplazar petróleo, con un desplazamiento inmisible. Este modelo bifásico consiste en la inyección de agua al borde de una entrada, extrayendo al mismo tiempo agua y petróleo en un borde de salida. La roca porosa o matriz del reservorio, es mojable al agua por lo que se trata de un proceso de imbibición.

Se considera un flujo incompresible; consecuentemente, el caudal de agua inyectada sera igual a la suma del caudal de agua y del caudal de petróleo, que a su vez será igual al caudal total. El medio poroso se establece como homogéneo y de permeabilidades constantes, estimando un valor promedio de dichos parámetros con medidas de campo.

Bajo estas condiciones, básicamente se tiene un flujo lineal por lo que un modelo con dominio unidimensional describe perfectamente el desplazamiento del aceite en la dirección de flujo.

A partir de la *ecuación diferencial de balance de masa* de sistemas multifásicos (3.7) podemos desarrollar la ecuación de este sistema bifásico.

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi_\alpha v_\alpha) = \nabla \cdot \tau_\alpha + g_\alpha \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N.$$

Siendo la masa la propiedad extensiva del fluido, su correspondiente propiedad intensiva (integrando)  $\psi$  estará dada por  $\psi_\alpha = \varepsilon S_\alpha \rho_\alpha$ . Al sustituir la propiedad intensiva y la ley de Darcy (3.17) en la *ecuación de balance de masa*. Donde la velocidad de Darcy está definida por  $\mathbf{u}_\alpha = \varepsilon S_\alpha v_\alpha$ .

$$\frac{\partial \varepsilon S_\alpha \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = g_\alpha \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N.$$

El término  $\nabla \cdot \tau_\alpha$  se cancela al no haber transporte de masa sobre la frontera. Reescribiendo la ecuación (3.17) y definiendo el factor de movilidad  $\lambda_\alpha$ .

$$\mathbf{u}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbf{k} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \hat{g} \nabla z) \quad ; \quad \alpha = w, o, g.$$

$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$$

Sustituimos las expresiones anteriores en la ecuación de balance de masa

$$\frac{\partial \varepsilon S_\alpha \rho_\alpha}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho_\alpha \lambda_\alpha \mathbf{k} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \hat{g} \nabla z)) = g_\alpha \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N. \quad (3.34)$$

La ecuación (??) representa un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales para  $N$  fases. Continuamos con las formulaciones constitutivas que integran la dependencia entre las variables, al utilizar el conocimiento científico y tecnológico del problema en estudio.

Del capítulo 1 tomaremos la expresión de la presión capilar de una interfase agua-aceite (1.10). Junto con la formulación de saturación (3.8) adaptada a un sistema bifásico, obtenemos las siguientes formulaciones constitutivas adicionales.

$$S_w + S_o = 1 \quad (3.35)$$

$$p_c \equiv p_{cow} = p_o - p_w$$

Al desarrollar la ecuación (??) para el sistema bifásico agua-aceite;  $\alpha = w, o$ , y utilizando la fórmula de la presión capilar, los campos de presiones quedan en función de  $p_o$  y  $p_c$  únicamente.

$$\frac{\partial \varepsilon S_o \rho_o}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho_o \lambda_o \mathbf{k} (\nabla p_o - \rho_o \hat{g} \nabla z)) = g_o \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial \varepsilon S_w \rho_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho_w \lambda_w \mathbf{k} (\nabla p_o - \nabla p_c - \rho_w \hat{g} \nabla z)) = g_w \quad (3.37)$$

La combinación de las ecuaciones (3.33), (3.34) y (3.35) producen un sistema de ecuaciones fuertemente acoplado.

Considerando que la porosidad es constante ( $\varepsilon$ ), densidad de los fluidos ( $\rho_w, \rho_o$ ) constantes y los efectos de la fuerza de gravedad despreciables ( $\hat{g}$ ). Finalmente, con un tratamiento algebraico entre las ecuaciones de presión (3.34), saturación (3.35) y las ecuaciones constitutivas restantes (3.33) podemos reducir todavía el sistema de ecuaciones (Chen et al, [2]):

$$-\nabla \cdot \left( \lambda \mathbf{k} \nabla p_o + \lambda_w \mathbf{k} \frac{dp_c}{dS_w} \nabla S_w \right) = q_o + q_w \quad (3.38)$$

$$\varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \lambda_w \mathbf{k} \nabla p_o + \lambda_w \mathbf{k} \frac{dp_c}{dS_w} \nabla S_w \right) = q_w \quad (3.39)$$

Donde los coeficientes  $\lambda$  y  $\lambda_w$  son las movilidades:

Se define a la movilidad total  $\lambda$  como

$$\lambda = \frac{1}{(1 - S_{rw} - S_{ro})^\omega} \left[ \frac{(S_w - S_{rw})^\omega}{\mu_w} + \frac{(1 - S_{ro} - S_w)^\omega}{\mu_o} \right] \quad (3.40)$$

y la movilidad de la fase agua  $\lambda_w$

$$\lambda_w = \frac{1}{\mu_w} \left( \frac{S_w - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{ro}} \right)^\omega \quad (3.41)$$

Las movilidades son los coeficientes que producen la no linealidad al ser función de la saturación. El término  $\omega$  puede tomar los valores 1 ó 2. Cuando  $\omega = 1$ , se tiene un coeficiente de movilidad lineal y un coeficiente cuadrático cuando  $\omega = 2$ .

Las fuentes se han redefinido como:  $q_o = \frac{g_o}{\rho_o}$ ;  $q_w = \frac{g_w}{\rho_w}$ . Y por último,  $\mu_o$ : viscosidad de la fase aceite,  $\mu_w$ : viscosidad de la fase agua,  $S_{rw}$ : la saturación residual de la fase agua,  $S_{ro}$ : saturación residual de la fase aceite y  $S_w$  es el grado de libertad de la saturación asociada a la fase agua. Véase capítulo 1 para la definición de éstos parámetros.



## Capítulo 4

# El método de Newton-Raphson

La modelación matemática aplicada en problemas reales generalmente resultan en modelos planteados por Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) no lineales. Esta no linealidad resulta de la complejidad del problema y la dependencia entre las variables que se están resolviendo en las ecuaciones. Para darse una idea de lo complejo que puede ser un modelo terrestre considere las variables que podrían describir un ambiente geológico tales como presión, temperatura, porosidad, permeabilidad, saturación de fluidos, composición química y la distribución espacial de dichas propiedades, además de la dependencia de cada uno de estas variables o parámetros. Un sistema de ecuaciones no lineal, no puede ser resuelto numéricamente por las herramientas algebraicas hasta ahora disponibles y requieren de cierto tratamiento. El tratamiento que reciben las EDPs no lineales en éste trabajo es una linealización de las ecuaciones aplicando el método de Newton-Raphson.

### Reseña histórica

El método de Newton o también conocido como el método de Newton-Raphson fue escrito por *Isaac Newton* y publicado por primera vez en 1685 en *A Treatise of Algebra both Historical and Practical*. En 1690, *Joseph Raphson* publicó una descripción simplificada del método de Newton en *Analysis aequationum universalis*, que al igual que Newton, *Raphson* describe el método restringido al uso de polinomios pero incluye una secuencia sucesiva de aproximaciones de  $x_n$  en vez de una complicada secuencia de polinomios planteados por *Newton*. Posteriormente en 1740, *Thomas Simpson* plantea el método de Newton como un método iterativo para resolver ecuaciones no lineales usando cálculo de fluxiones, en la misma publicación *Simpson* da una generalización de la solución a sistemas de dos ecuaciones donde se da cuenta que el método de Newton puede ser usado para resolver problemas de optimización haciendo el gradiente cero.

### Principio del método

Antes de la explicación del método aplicado a la linealización de EDPs no lineales, se abordará la idea básica del método, en la aproximación de raíces de una función.

El método se puede deducir a partir de un análisis geométrico. Sea  $x_r$  la raíz de la función  $f(x)$  y  $x_n$  la aproximación a la raíz  $x_r$ . Se traza una recta tangente a  $f(x)$  en un punto  $(x_0, f(x_0))$ , siendo  $x_0$  una aproximación inicial a la raíz. El punto en que la recta tangente cruza al eje de las abscisas será la nueva raíz  $x_1$  que es una mejor aproximación a la anterior ( $x_0$ ), como se muestra en la figura (4.1). Esta nueva raíz es calculada al igualar a cero la ecuación de la tangente en dicho punto, es decir:

Sea la ecuación de la tangente a la curva  $f(x)$  en el punto inicial  $x_0$ .

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0) \quad (4.1)$$

Donde  $f'(x_0)$  es la pendiente de la recta tangente en dicho punto. Para encontrar una mejor aproximación que la inicial se busca el punto de intersección de la recta tangente con el eje de las abscisas haciendo  $y = 0$ ; y despejando  $x$ .

$$-f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0) \quad \Rightarrow \quad x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (4.2)$$

La solución de la ecuación (4.2) será una mejor aproximación a la raíz, que la estimación inicial. Si denotamos esta primera solución como  $x_1 = x$ , damos inicio al ciclo iterativo de Newton.

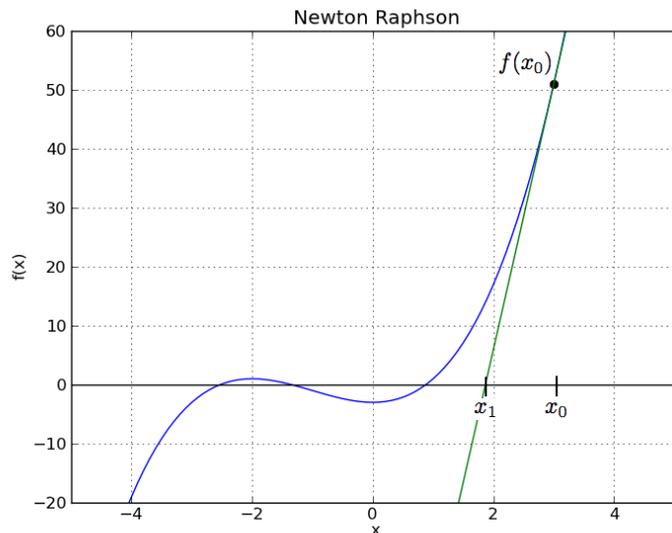


Figura 4.1: Primera aproximación a una de las raíces de  $f(x) = x^3 + 3x - 3$ , con Newton Raphson.

Asumiendo que una función  $f(x)$  es diferenciable y definida en un intervalo  $[a, b]$  con valores en los reales  $f : [a, b] \rightarrow \mathbf{R}$ . Se puede evaluar la expresión (4.2) para cada nueva aproximación encontrada  $x_i$ , exigiendo que para cada una de éstas, se cumpla que  $f'(x_i) \neq 0$ , teniendo así, en cada paso  $i$  un valor más cercano a la raíz, como se muestra en la figura (4.2). De esta forma, se llega a la fórmula iterativa (4.3), que por lo regular converge a la raíz en  $n$  pasos, con un orden de error cuadrático en la vecindad del cero (raíz).

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (4.3)$$

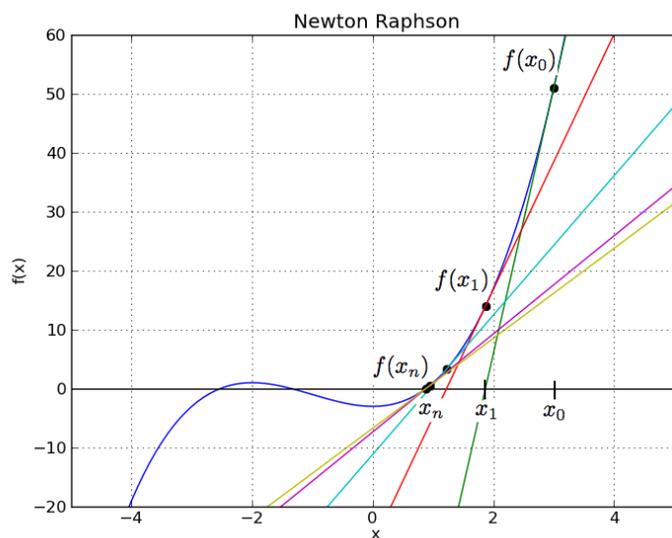


Figura 4.2: Aproximación de la raíz de  $f(x) = x^3 + 3x - 3$ , en la  $n$ -ésima iteración de Newton Raphson.

A partir de la fórmula iterativa (4.3), podemos inferir la expresión de un sistema de ecuaciones lineal al incremento de la variable, cuando  $f(x)$  es una función no lineal.

$$x_{i+1} - x_i = -\frac{f(x)}{\nabla f(x)}$$

Para una partición del dominio  $x$  en  $x_i$  con  $i = 0, 1, 2, \dots, n$  tal que  $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ , un incremento será  $\delta x = x_{i+1} - x_i$ , al sustituir.

$$\nabla \mathbf{F} \delta x = -\mathbf{F}(x) \quad (4.4)$$

La expresión (??) produce la linealización de la función  $\mathbf{F}$ , generando una relación lineal con  $\delta x$ . Al calcular el gradiente  $\nabla F$  y resolver el sistema de ecuaciones se obtiene un incremento que añadido al valor de la variable inicial se aproxima a la solución. Siguiendo este procedimiento iterativamente se espera que la solución se alcance en  $k + 1$  pasos, con un error de convergencia de orden cuadrático en la vecindad de  $x^{k+1}$ .

$$x^{k+1} = x^k + \delta x^k; \quad k = \text{numero iteraciones}$$

Se puede llegar al mismo resultado al aplicar a una función no lineal su expansión en series de Taylor, hasta el término de primer orden. Desarrollo que se abordará en la siguiente sección.

## 4.1. Aplicaciones del método de Newton-Raphson

### 4.1.1. Problemas de optimización

En muchos problemas de matemáticas particularmente en cálculo se requiere de la identificación de *puntos estacionarios*, puntos donde una función  $f(x)$  deja de crecer o decrecer. Este problema se reduce a localizar máximos o mínimos relativos o su equivalente a  $\nabla f(x) = 0$  (pendiente nula).

De manera análoga a la obtención de raíces, se busca una secuencia en  $x_n$  que a partir de un valor inicial conocido  $x_0$  alcance un límite en una  $x_c$ , tal que,  $f'(x_c) = 0$  donde  $x_c$  queda definido como un *punto estacionario* de  $f(x)$ .

Consideremos ahora, una función  $f(x)$  que es  $k + 1$  veces diferenciable en un intervalo abierto  $I$ . Para cualquier punto  $x$  y  $x + h$  dentro del intervalo, existe entonces, un punto  $w$  entre  $x$  y  $x + h$  tal que su expansión en series de Taylor se expresa como:

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2} + \dots + \frac{f^k(x)h^k}{k!} + \frac{f^{k+1}(x)(w)h^{k+1}}{(k+1)!} \quad (4.5)$$

Se puede demostrar que  $h$  tiende a cero a mayor orden de la ecuación (4.4) y  $w$  tiende a cero mucho más rápidamente que  $h$ . Por lo tanto para valores pequeños de  $h$  se tiene:

$$f(x + h) \approx f(x) + f'(x)h \quad (4.6)$$

La expresión (4.5) es la aproximación de primer orden en series de Taylor de la función  $f(x)$ .

Supongamos ahora que se quiere encontrar el punto  $x_c$  que maximiza una función  $f(x)$  con segunda derivada continua en su intervalo  $I$ , se tiene ahora la aproximación de segundo orden en series de Taylor.

$$f(x + h) \approx f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 \quad (4.7)$$

Siendo consistentes con la notación (4.6) expresemos ahora  $\nabla f(x)$  como una aproximación en series de Taylor:

$$f'(x + h) \approx f'(x) + f''(x)h \quad (4.8)$$

Al aplicar la condición necesaria para identificar un punto estacionario  $\nabla f(x) = 0$ , se obtiene la condición de primer orden para maximizar la función  $f(x + h)$

$$0 = f'(x) + f''(x)\hat{h} \quad (4.9)$$

Al despejar  $\hat{h}$  de la ecuación (4.8) tenemos el valor que maximiza a la función aproximada de segundo orden en series de Taylor (4.6).

$$\hat{h} = -\frac{f'(x)}{f''(x)} \quad (4.10)$$

Finalmente:

$$x + \hat{h} = x - \frac{f'(x)}{f''(x)} \quad (4.11)$$

Llegamos a una expresión modificada de la fórmula iterativa del método de Newton-Raphson (4.3) para aproximar puntos estacionarios.

#### 4.1.2. Sistemas de ecuaciones no lineales de una variable

Dada una función no lineal, por ejemplo un polinomio  $P(x)$  de tercer grado de una sola variable (una dimensión).

$$P(x) = \sum_{i=0}^3 a_i x^i = 0$$

La expresión lineal de  $P(x)$  se obtiene al aplicar la ecuación (??), o bien haciendo una expansión en series de Taylor hasta el término de primer orden como se hizo en (4.5). Al evaluar el gradiente  $\nabla F$  y resolver la ecuación para  $\delta x$  en cada iteración, empezando con una estimación inicial  $x^0$ , obtenemos el método de Newton como se indica a continuación.

Primer paso

$$\frac{dP(x^0)}{dx}(\delta x)^0 = -P(x^0)$$

$$x^1 = x^0 + (\delta x)^0, \text{ en } k = 0$$

k-ésimo paso

$$\frac{dP(x^k)}{dx}(\delta x)^k = -P(x^k)$$

$$x^{k+1} = x^k + (\delta x)^k, \text{ en } k = 1, 2, \dots, n.$$

El ciclo iterativo termina cuando  $x^{k+1}$  converge a la solución, es decir, dada una tolerancia  $\epsilon$  tal que  $\{\epsilon \in \mathbf{R}; \epsilon > 0\}$ , se cumple la condición  $(\delta x)^k < \epsilon$ .

#### 4.1.3. Sistemas de ecuaciones no lineales de dos variables

Sea un sistema de ecuaciones de dos variables independientes denotadas por el vector  $\bar{x} = (x_1, x_2)$  y dos polinomios o funciones  $P_1(x_1, x_2)$  y  $P_2(x_1, x_2)$ , ambas funciones no lineales, expresadas en su forma residual.

$$P_1(x_1, x_2) = 0$$

$$P_2(x_1, x_2) = 0$$

Al aplicar (??), se establece un nuevo sistema de ecuaciones lineal en  $\delta x_1$  y  $\delta x_2$ .

$$\frac{\partial P_1(x_1, x_2)}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial P_1(x_1, x_2)}{\partial x_2} \delta x_2 = -P_1(x_1, x_2)$$

$$\frac{\partial P_2(x_1, x_2)}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial P_2(x_1, x_2)}{\partial x_2} \delta x_2 = -P_2(x_1, x_2)$$

De manera explícita, su expresión matricial es.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_2} \\ \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -P_1(\bar{x}) \\ -P_2(\bar{x}) \end{bmatrix}$$

La matriz de las derivadas es conocido como el Jacobiano del sistema de ecuaciones  $P_i(\bar{x})$ , comúnmente se denota como.

$$\mathbf{J}_{ij}(\bar{x}) \delta x_j = -\mathbf{P}_i(\bar{x}) \quad ; i, j = 1, 2. \quad (4.12)$$

#### 4.1.4. Sistemas de ecuaciones no lineales de N variables

Dado un sistema de ecuaciones con  $N$  ecuaciones no lineales y  $N$  incógnitas denotadas por el vector  $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ , su expresión en forma residual será.

$$\begin{aligned} P_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) &= 0 \\ P_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) &= 0 \\ &\vdots \\ P_N(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) &= 0 \end{aligned}$$

Se linealiza el sistema de ecuaciones al aplicar (??), extendiendo los índices  $i, j = 1, 2, \dots, N$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_2} \delta x_2 + \dots + \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_N} \delta x_N &= -P_1(\bar{x}) \\ \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_2} \delta x_2 + \dots + \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_N} \delta x_N &= -P_2(\bar{x}) \\ &\vdots \\ \frac{\partial P_N(\bar{x})}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial P_N(\bar{x})}{\partial x_2} \delta x_2 + \dots + \frac{\partial P_N(\bar{x})}{\partial x_N} \delta x_N &= -P_N(\bar{x}) \end{aligned}$$

Explícitamente tenemos.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial P_1(\bar{x})}{\partial x_N} \\ \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial P_2(\bar{x})}{\partial x_N} \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial P_N(\bar{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial P_N(\bar{x})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial P_N(\bar{x})}{\partial x_N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \\ \vdots \\ \delta x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -P_1(\bar{x}) \\ -P_2(\bar{x}) \\ \vdots \\ -P_N(\bar{x}) \end{bmatrix}$$

Si reducimos este sistema de ecuaciones linealizado, a su notación indicial obtenemos:

$$\sum_{j=1}^N \frac{\partial P_i(\bar{x})}{\partial x_j} (\delta x_j) = -P_i(\bar{x}), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.13)$$

Dada una estimación inicial  $\bar{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)$  planteamos (4.11) dentro del ciclo iterativo.

$$\bar{v}^k = \bar{x}^0, \quad \text{en } k = 0$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{\partial P_i(\bar{v}^k)}{\partial x_j} (\delta x_j)^k = -P_i(\bar{v}^k), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.14)$$

$$v_j^{k+1} = v_j^k + (\delta x_j)^k, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

Para  $k = 1, 2, \dots, n.$ , hasta que la solución converge cuando se cumple que la norma euclidiana  $\|\bar{v}^{k+1} - \bar{v}^k\|$  es menor a un valor  $\epsilon > 0$ , prescrito.

### 4.1.5. Ecuaciones Diferenciales Parciales no lineales en general

Una ecuación diferencial no lineal ya sea ordinaria o parcial, es aquella que tiene al menos una de las siguientes características:

- La variable (o variables) dependientes o alguna de sus derivadas son de orden mayor a uno.
- Existe una función no lineal de la variable dependiente o de sus derivadas.
- Al menos un coeficiente de la ecuación depende de la variable dependiente.

#### Ejemplos de ecuaciones no lineales

**Ecuación de Burger**, utilizada en modelos de mecánica de fluidos, tales como dinámica de gases y tráfico de flujo.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k\nabla u + \gamma(\nabla u)^2$$

La no linealidad se encuentra en el término cuadrático  $(\nabla u)^2$ , caso (a).

**Ecuación del péndulo simple**, describe el movimiento oscilatorio de un péndulo, sin fricción con el aire y masa del brazo despreciable.

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{L}\text{sen}(\theta) = 0$$

En la cual, la no linealidad esta dada por la función no lineal  $\text{sen}(\theta)$ , caso (b).

**Ecuaciones de Navier-Stokes de un flujo en espiral**, se utilizan en modelos de flujos de huracanes, galaxias y drenajes en sumideros. Comportamiento que ocurre cuando no hay presión suficiente para soportar un flujo hacia dentro (interno). En coordenadas cilíndricas ...

$$\begin{aligned} u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_\phi \frac{\partial u_r}{\partial \phi} &= F_r \\ u_r \frac{\partial (ru_\phi)}{\partial r} + u_\phi \frac{\partial (ru_\phi)}{\partial \phi} &= 0 \\ \frac{1}{r} \frac{\partial (ru_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (ru_\phi)}{\partial \phi} &= 0 \end{aligned}$$

Estas tres ecuaciones son no lineales al tener coeficientes que son función de sus variables independientes  $u_r$ ,  $u_\phi$  y un coeficiente que es la variable misma  $\frac{1}{r}$ , correspondiendo así con el caso (c).

#### Tratamiento para la linealización de ecuaciones no lineales

Considérese un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales expresado en términos de un operador lineal:

$$\mathfrak{S}_m\{F_m[\mathbf{p}(x)]\} = f_m(x) \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad x \in \Omega \quad (4.15)$$

Donde  $\mathfrak{S}_m$  denota un operador diferencial lineal,  $F_m(\mathbf{p})$  es una función no lineal,  $\mathbf{p}(x) = (p_1, p_2, \dots, p_M)^T$  es un vector de variables dependientes,  $f_m$  es un vector dado y  $M$  es el número de ecuaciones (Chen et al [2]). La solución del sistema de ecuaciones (4.12) con Newton-Raphson requiere, establecer un nuevo sistema de ecuaciones iterativo y linealizado. Este tratamiento consiste en aplicar la expansión en series de Taylor a la función no lineal  $F_m(\mathbf{p} + \delta\mathbf{p})$  hasta el término de primer orden.

$$F_m(\mathbf{p} + \delta\mathbf{p}) = F_m(\mathbf{p}) + \nabla F_m(\mathbf{p}) \cdot \delta\mathbf{p} + O(|\delta\mathbf{p}|^2) \quad (4.16)$$

El término  $O(|\delta\mathbf{p}|^2)$  es el error de orden cuadrático hasta donde la serie es truncada,  $|\delta\mathbf{p}|$  es la norma Euclidiana del incremento  $\delta\mathbf{p}$ , siendo  $\mathbf{p}$  función de la variable independiente. Tal y como se desarrollo en la ecuación (4.5). De esta forma se tiene una aproximación a  $F_m(\mathbf{p} + \delta\mathbf{p})$ .

$$F_m(\mathbf{p} + \delta\mathbf{p}) \approx F_m(\mathbf{p}) + \nabla F_m(\mathbf{p}) \cdot \delta\mathbf{p} \quad (4.17)$$

Al sustituir (4.14) en el sistema de ecuaciones (4.12), obtenemos un sistema de ecuaciones iterativo:

$$\mathfrak{S}_m\{F_m(\mathbf{p}^l) + \nabla F_m(\mathbf{p}^l) \cdot \delta\mathbf{p}^l\} = f_m(x), \quad m = 1, 2, \dots, M, x \in \Omega \quad (4.18)$$

Denotando con el superíndice  $l$  los pasos de la iteración. El término  $\mathbf{p}^l$  es la  $l$ -ésima solución de  $\mathbf{p}$  y  $\nabla F_m(\mathbf{p}^l)$  es  $\nabla F_m(\mathbf{p})$  para  $\mathbf{p} = \mathbf{p}^l$ , asumiendo una estimación inicial  $\mathbf{p}^0$ . En éste sistema de ecuaciones (4.15), el vector de corrección  $\delta\mathbf{p}$  será el vector de incógnitas del sistema iterativo. Reescribiremos ahora dicha ecuación, al dejar del lado izquierdo el producto del gradiente (Jacobiano) con el vector incógnita, y despejamos al lado derecho los términos con las variables resueltas en el paso anterior del ciclo iterativo.

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_m\{\nabla F_m(\mathbf{p}^l) \cdot \delta\mathbf{p}^l\} &= f_m(x) - \mathfrak{S}_m\{F_m(\mathbf{p}^l)\} \\ \mathfrak{S}_m\{\nabla F_m(\mathbf{p}^l) \cdot \delta\mathbf{p}^l\} &= g_m(x) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Los términos  $F_m(\mathbf{p}^l)$  y  $\nabla F_m(\mathbf{p}^l)$  son tratados como valores fijos (constantes). Ahora, el sistema de ecuaciones es lineal para  $\delta\mathbf{p}^l$  y cualquier método convencional para resolver sistemas de ecuaciones lineales puede ser aplicado.

Una nueva solución del vector  $\mathbf{p}^{l+1}$  se obtiene al añadir el vector de corrección  $\delta\mathbf{p}^l$  resuelto en una iteración previa.

$$\mathbf{p}^{l+1} = \mathbf{p}^l + \delta\mathbf{p}^l \quad (4.20)$$

Este procedimiento iterativo (4.17) continua hasta que la norma Euclidiana de  $\delta\mathbf{p}^l$  sea menor a un valor prescrito (Chen et al [2]).

## 4.2. Aplicación a ecuaciones de flujo monofásico

Sea la expresión general de una Ecuación Diferencial Parcial de un problema de flujo de una sola fase, parabólica, en tres dimensiones, siendo la presión ( $p$ ) la variable del sistema, que produce la no linealidad en los coeficientes. Esta ecuación está definida dentro de un dominio  $\Omega$ , con frontera  $\Gamma$ , en un intervalo de tiempo  $J, \in [0, T]$ .

$$\begin{aligned} c(p) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (a(p) \nabla p) &= f(p) & ; & \quad \in \Omega \times J, \\ a(p) \nabla p \cdot \mathbf{v} &= 0 & ; & \quad \Gamma \times J \\ p(\cdot, 0) &= p_0 & ; & \quad \in \Omega \end{aligned} \quad (4.21)$$

Donde;  $c(p) = c(\mathbf{x}, t, p)$ ;  $a(p) = a(\mathbf{x}, t, p)$  y  $f(p) = f(\mathbf{x}, t, p)$ , son función del espacio, tiempo y presión. El vector normal unitario  $\mathbf{v}$ , indica la dirección perpendicular exterior, de la superficie  $\Gamma$ , la función  $p_0$  es información dada de las condiciones iniciales, y  $t$ ;  $t \in J$ , es el tiempo dentro del intervalo de interés.

Una vez establecido un problema bien planteado, el siguiente paso es discretizar la ecuación. En este ejemplo se utiliza el Método de Elemento Finito para la discretización, ya que se maneja una notación matricial de la ecuación bastante simple y resulta conveniente a manera de ejemplo. Sin embargo, se puede elegir cualquier otro método de discretización que se desee. Mas adelante (capítulo 5), se utiliza el Método de Volumen Finito para discretizar una ecuación de flujo bifásico, con una expresión de la ecuación discretizada un poco más elaborada, pero facilita la implementación del código utilizando MVF.

Asumiendo que los coeficientes  $c(p)$ ,  $a(p)$  y  $f(p)$  son continuos en  $p$  (Lipschitz continuas, Donea et al [10]), y además, la ecuación (4.18) admite una sola solución, se resume la discretización de la siguiente forma.

Sea un subespacio de Sobolev  $V = H^1(\Omega)$  (conjunto de funciones con sus primeras derivadas continuas y cuadrado integrables), tal que:

$$V = \{v \in H^1(\Omega) \mid v = 0 \text{ en } \Gamma\}$$

Al aplicar el producto interno definido en el subespacio  $V$  a la ecuación (4.18), obtenemos su expresión en forma variacional <sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \left( c(p) \frac{\partial p}{\partial t}, v \right) + (a(p) \nabla p, \nabla v) &= (f(p), v) & ; & \quad \forall v \in V, t \in J \\ p(\mathbf{x}, 0) &= p_0 & ; & \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Sea  $V_h$  un espacio discreto del subespacio de  $V$  de elementos finitos, que al sustituir en (4.19) la ecuación se plantea sobre el dominio discreto, tal que se busca  $p_h : J \rightarrow V_h$ . Después de introducir las funciones base de  $V_h$  e integrar por partes la versión discretizada de (4.19), podemos plantear la ecuación en forma matricial.

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\mathbf{p}^n) \frac{\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{n-1}}{\Delta t^n} + \mathbf{A}(\mathbf{p}^n) \mathbf{p}^n &= \mathbf{f}(\mathbf{p}^n) \\ \mathbf{Bp}(0) &= \mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.23)$$

El tiempo ha sido discretizado en  $n$  pasos del tiempo, es decir;  $t^n$  es una partición de  $J$  tal que  $0 = t^0 < t^1 < t^2 \dots < t^N$ , además,  $\Delta t = t^n - t^{n-1}$  para  $n = 1, 2, \dots, N$ . Ver detalles en el desarrollo de la discretización de (4.20) en apéndice A.

Tenemos ahora, un sistema de ecuaciones no lineal en  $p^n$ , que debe ser resuelto a cada paso del tiempo a través del método de Newton-Raphson. Reescribiremos la ecuación (4.20) al despejar todos los términos al lado izquierdo (expresión residual).

$$\left( \frac{1}{\Delta t^n} C(p^n) + A(p^n) \right) p^n - \frac{p^{n-1}}{\Delta t^n} C(p^n) - f(p^n) = 0 \quad (4.24)$$

y la denotamos como:

$$\mathbf{F}(p^n) = 0 \quad (4.25)$$

<sup>1</sup>Para mayores detalles de la aplicación del Método de Elemento Finito, referirse a la bibliografía correspondiente.

Aplicando la expansión en series de Taylor en la expresión residual (4.22), tal y como se hizo en (4.4) y desarrollando hasta el término de primer orden.

$$\mathbf{F}(p^n + \delta p^n) = \mathbf{F} + \nabla \mathbf{F} \cdot \delta p^n + O(|\delta p^n|^2) \quad (4.26)$$

Despreciando el término  $O(|\delta p|^2)$  obtenemos una aproximación de  $\mathbf{F}(p + \delta p)$ .

$$\mathbf{F}(p^n + \delta p^n) \approx \mathbf{F} + \nabla \mathbf{F} \cdot \delta p^n \quad (4.27)$$

La aproximación es válida para valores pequeños de  $\delta p$ . De la ecuación en forma residual (4.22) y su aproximación (4.24) tenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} + \nabla \mathbf{F} \delta p &= 0 \\ \nabla \mathbf{F} \delta p &= -\mathbf{F} \end{aligned} \quad (4.28)$$

La expresión anterior resulta en un sistema de ecuaciones donde su vector incógnita es  $\delta p$  y el término  $\nabla \mathbf{F}$  es el *Jacobiano* de  $\mathbf{F}$ . El gradiente de  $F$  puede ser evaluado con algún método numérico ó derivando analíticamente la ecuación discretizada (4.21). La solución del sistema (4.25) nos da un factor de corrección que sumado a la estimación inicial nos aproxima a la solución  $p^n$ .

$$v^1 = (\delta p)^0 + p^{n-1}$$

$$v^1 \approx p^n$$

Donde  $p^{n-1}$  es la estimación inicial y  $v^1$  la primera aproximación del método de Newton-Raphson. Con la primera aproximación se evalúa nuevamente el Jacobiano, al resolverlo, se tiene una nueva  $(\delta p)^1$  que mejora la aproximación con  $v^2$ .

$$\sum_{j=0}^M \frac{\partial F_i(v^1)}{\partial p_j} (\delta p)_j^1 = -F_i(v^1) \quad i=0,1,2 \dots, N. \quad (4.29)$$

$$v^2 = (\delta p)^1 + v^1$$

La expresión (??), es un sistema de  $N$  ecuaciones con  $M$  incógnitas, evaluando el Jacobiano  $\nabla F$  y  $F$  en la aproximación anterior. Al realizar este proceso de manera iterativa el método deberá converger en la solución  $p^n$ , lo cual implica  $\delta p \approx 0$ .

Dicho procedimiento se realiza para cada paso del tiempo  $n$ . En términos generales el método iterativo es el siguiente:

$$v^0 = p^{n-1} \quad \text{primera estimación}$$

*k*-ésima iteración

$$\sum_{j=0}^M \frac{\partial F_i(v^k)}{\partial p_j} (\delta p)_j^k = -F_i(v^k) \quad i=0,1,2 \dots, N. \quad (4.30)$$

$$v^{k+1} = v^k + (\delta p)^k \quad k = 0, 1, \dots, k_{converge} \quad (4.31)$$

En la construcción del sistema de ecuaciones los términos  $F_i(v)$  y  $\nabla F_i(v)$  se toman como valores fijos, de esta forma (4.26) es un sistema lineal con  $\delta p$ . Si la matriz  $\frac{\partial F_i(v^k)}{\partial p_j}$  es no singular y las segundas derivadas parciales de  $\mathbf{F}$  están acotadas, el método de Newton Raphson converge cuadráticamente en la vecindad de  $p^n$  (Chen et al, [2]). Es decir, existen las constantes  $\epsilon > 0$  y  $C$  tal que si es cierto que la norma euclidiana  $\|v^{k-1} - p^n\| \leq \epsilon$ , entonces:

$$\|v^k - p^n\| \leq C \|v^{k-1} - p^n\|^2 \quad (4.32)$$

La principal dificultad con el método de Newton-Raphson, es el obtener una buena primera estimación  $v^0$ , lo suficientemente cercana a la solución  $p^n$  para que el método converja. Una forma rápida de saber si el método no converge es ver si las primeras aproximaciones no se asientan, dado que el método converge muy rápidamente de tener una estimación inicial apropiada. Para corregir este problema de convergencia basta con ajustar una nueva estimación inicial e iniciar nuevamente el método.



## Capítulo 5

# Newton-Raphson en modelos de petróleo

### 5.1. Modelo Buckley-Leverett

El modelo de Buckley-Leverett es una versión simplificada del modelo planteado por las ecuaciones (3.36) y (3.37). Plantea un problema de flujo de dos fases (agua y aceite) a través de un medio poroso, el problema consiste en desplazar el aceite, que en un estado inicial ocupa completamente el volumen de poro, al inyectar agua a una razón de flujo constante a través de una sección de la frontera, el aceite desplazado sale por un pozo de extracción o una sección de la frontera hasta que el volumen de poro es reemplazado por la fase agua.

El modelo consta de dos ecuaciones acopladas; la ecuación de presión y la ecuación de saturación, derivadas de las ecuaciones (3.36) y (3.37) respectivamente, las incógnitas a resolver en cada paso del tiempo son, la presión ( $p_o$ ) del aceite y saturación ( $S_w$ ) del agua.

Ecuación de presión

$$-\nabla \cdot (\underline{k} \lambda(S_w) \nabla p_o) = 0 \quad (5.1)$$

Ecuación de Saturación

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{k} \lambda^w(S_w) \nabla p_o) = 0 \quad (5.2)$$

Las ecuaciones han sido simplificadas al considerar  $p_c \equiv q_w \equiv q_o \equiv 0$  (presión capilar, fuentes de masa del agua y fuentes de masa de aceite, respectivamente).

Ecuaciones constitutivas

$$\begin{aligned} \text{Permeabilidad relativa} \quad k_{rw} &= S_e^\omega \\ k_{ro} &= (1 - S_e)^\omega \\ \text{Saturación efectiva} \quad S_e &= \frac{S_w - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{ro}} \end{aligned}$$

Donde  $\lambda$  es la movilidad total y  $\lambda^w$  la movilidad de la fase agua, ambos coeficientes son función de la saturación  $S_w$ , provocando la no linealidad en (5.1) y (5.2). Estos coeficientes pueden ser lineales si  $\omega = 1$  y cuadráticos si  $\omega = 2$ .

$$\lambda = \frac{1}{(1 - S_{rw} - S_{ro})^\omega} \left[ \frac{(S_w - S_{rw})^\omega}{\mu_w} + \frac{(1 - S_{ro} - S_w)^\omega}{\mu_o} \right] \quad (5.3)$$

$$\lambda^w = \frac{1}{\mu_w} \left( \frac{S_w - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{ro}} \right)^\omega \quad (5.4)$$

Se tienen como parámetros constantes  $S_{rw}$ ,  $S_{ro}$ ,  $\mu_w$  y  $\mu_o$ .

El tensor de permeabilidad absoluta  $\underline{k}$  es la matriz diagonal.

$$\underline{k} \equiv \begin{bmatrix} k_{11} & 0 & 0 \\ 0 & k_{22} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{bmatrix}$$

Parámetro	valor
Longitud del dominio	300 m
Porosidad $\varepsilon$	0,2 m <sup>2</sup>
Permeabilidad absoluta $\underline{k}$	$1 \times e^{-15}$
Viscosidad del aceite $\mu_o$	$1 \times e^{-3} Pa \cdot s$
Viscosidad del agua $\mu_w$	$1 \times e^{-3} Pa \cdot s$
Saturación residual de aceite $S_{ro}$	0,2
Saturación residual de agua $S_{rw}$	0,0
Velocidad de inyección $g_{in}^p$	$3,4722 \times e^{-7} m/s$
Velocidad de producción $p_{out}$	$10 \times e^7 Pa$

Cuadro 5.1: Valor promedio de los parámetros del modelo Buckley-Leverett

Con los elementos de la diagonal ( $k_{ii}$ ) constantes.

Los datos para resolver un problema bien planteado se presentan en la tabla (5.1) .

Para fines prácticos la notación de las incógnitas (grados de libertad) se reduce simplemente a:

$$S = S_w \quad ; \quad p = p_o$$

### 5.1.1. Modelo en 1D

En éste modelo se considera un medio unidimensional de 300 [m] de longitud, inicialmente saturado con aceite ( $S_w = 0$ ). Se inyecta agua a una razón de flujo constante en el extremo izquierdo del dominio (extremo A), desplazando el aceite hasta el extremo derecho donde la presión permanece constante (extremo B).

	Saturación	Presión
Condición Inicial	$S(t_0) = 0$	$p(t_0) = 10^7 [Pa]$
Condición Frontera	$S_A = 0,8$	$g_A^p = 3,4722 \times 10^{-7} [m/s]$
	$S_B = 0$	$p_B = 10^7 [Pa]$

Cuadro 5.2: Condiciones del modelo

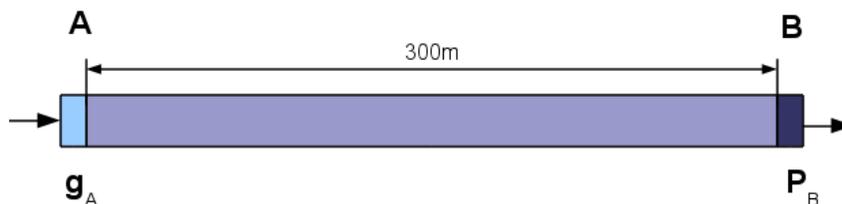


Figura 5.1: Dominio

### Discretización de ecuaciones con el método de Volumen Finito

La ecuación de presión (5.1) en una dimensión.

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( \underline{k} \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right) = -\underline{k} \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right)$$

Integrando sobre el volumen de control (Donea et al, [10]).

$$\begin{aligned} -\underline{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right) dx dt &= -\underline{k} \int_{\Delta t} \left[ \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right]_W^E dt = 0 \\ -\underline{k} \int_{\Delta t} \left\{ \left[ \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right]_E - \left[ \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right]_W \right\} dt &= 0 \end{aligned}$$

Al evaluar la integral sobre el espacio (figura 5.2) y aproximar las derivadas en las caras del volumen ( $W = i - \frac{1}{2}$  y  $E = i + \frac{1}{2}$ ).

$$-\underline{k} \int_{\Delta t} \left\{ \lambda(S_E) \left[ \frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x} \right] - \lambda(S_W) \left[ \frac{p_i - p_{i-1}}{\Delta x} \right] \right\} dt = 0$$

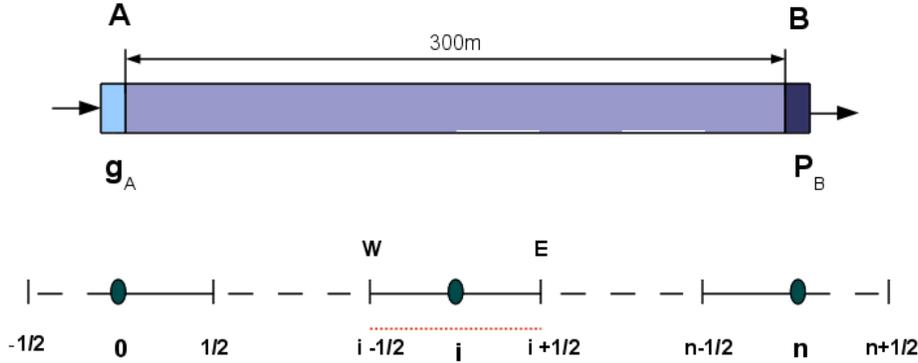


Figura 5.2: Discretización de dominio en 1D (líneas punteadas color rojo: *volumen de control*)

Integrando sobre el tiempo con la intención de plantear un sistema de ecuaciones totalmente implícito, finalmente tenemos la ecuación de presión discretizada en tiempo y espacio.

$$-\underline{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+\frac{1}{2}}^n) p_{i+1}^n - \left( \lambda(S_{i+\frac{1}{2}}^n) + \lambda(S_{i-\frac{1}{2}}^n) \right) p_i^n + \lambda(S_{i-\frac{1}{2}}^n) p_{i-1}^n \right] = 0 \quad (5.5)$$

En una dimensión la ecuación de saturación (5.2) se simplifica a:

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \underline{k} \lambda^w(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right) = 0$$

Integrando sobre el volumen de control (figura 5.2).

$$\phi \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \frac{\partial S}{\partial t} dt dx - \underline{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda^w(S) \frac{\partial p}{\partial x} \right) dx dt = 0$$

La segunda integral es similar a la ecuación de presión, solo difieren en  $\lambda^w$ , evaluaremos entonces estas integrales tal y como se hizo con (5.1), nos limitaremos a resolver el primer término de (5.2).

$$\phi \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \frac{\partial S}{\partial t} dt dx = \phi \int_{\Delta t} \left[ \frac{\partial S}{\partial t} \right]_i \Delta x dt = \phi \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}]$$

La ecuación de saturación discretizada en tiempo y espacio se expresa:

$$\phi \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] - \underline{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda^w(S_{i+\frac{1}{2}}^n) p_{i+1}^n - \left( \lambda^w(S_{i+\frac{1}{2}}^n) + \lambda^w(S_{i-\frac{1}{2}}^n) \right) p_i^n + \lambda^w(S_{i-\frac{1}{2}}^n) p_{i-1}^n \right] = 0 \quad (5.6)$$

Las ecuaciones (5.4) y (5.5) se encuentran en su forma residual naturalmente al no haber fuentes. Denotemos las ecuaciones de presión y saturación en función de sus variables sobre el dominio discreto (nodos) y en pasos del tiempo ( $n$ ).

$$\begin{aligned} F_o(S, p) &\Rightarrow F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i, S_{i+1}, p_{i+1}) \\ F_w(S, p) &\Rightarrow F_w^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i, S_{i+1}, p_{i+1}) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Con la notación anterior distinguiremos ambas ecuaciones al asociarlas con la fase, siendo la ecuación de saturación la asociada con la fase agua  $w$  y la ecuación de presión asociada a la fase aceite  $o$ .

Finalmente el sistema de ecuaciones en un esquema totalmente implícito, será.

$$\begin{aligned} F_o^n &= -\underline{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{i+\frac{1}{2}}^n) p_{i+1}^n - \left( \lambda(S_{i+\frac{1}{2}}^n) + \lambda(S_{i-\frac{1}{2}}^n) \right) p_i^n + \lambda(S_{i-\frac{1}{2}}^n) p_{i-1}^n \right] = 0 \\ F_w^n &= \phi \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] - \underline{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda^w(S_{i+\frac{1}{2}}^n) p_{i+1}^n - \left( \lambda^w(S_{i+\frac{1}{2}}^n) + \lambda^w(S_{i-\frac{1}{2}}^n) \right) p_i^n + \lambda^w(S_{i-\frac{1}{2}}^n) p_{i-1}^n \right] = 0 \end{aligned} \quad (5.8)$$

### Linealización del sistema de ecuaciones acoplado (5.6)

Desarrollando las ecuaciones (5.6) en expansión en series de Taylor hasta el término de primer orden.

$$\begin{aligned} F_o(S + \delta s, p + \delta p) &= F_o + \nabla_S F_o \delta s + \nabla_p F_o \delta p + O(\delta s, \delta p) = 0 \\ F_w(S + \delta s, p + \delta p) &= F_w + \nabla_S F_w \delta s + \nabla_p F_w \delta p + O(\delta s, \delta p) = 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

Discretizando el operador diferencial en términos del  $i$ -ésimo nodo sobre el dominio y despejando el término de orden cero.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i-1}} \delta p_{i-1} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i-1}} \delta s_{i-1} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_i} \delta p_i + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_i} \delta s_i + \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i+1}} \delta p_{i+1} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i+1}} \delta s_{i+1} &= -F_{oi} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i-1}} \delta p_{i-1} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i-1}} \delta s_{i-1} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_i} \delta p_i + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_i} \delta s_i + \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i+1}} \delta p_{i+1} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i+1}} \delta s_{i+1} &= -F_{wi} \end{aligned} \quad (5.10)$$

El sistema de ecuaciones (5.7) se puede expresar como.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i-1}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i-1}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i-1}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i-1} \\ \delta s_{i-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_i} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_i} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_i} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_i \\ \delta s_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i+1}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i+1}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i+1}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i+1} \\ \delta s_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -F_{oi} \\ -F_{wi} \end{bmatrix}$$

Al desarrollar el Jacobiano sobre los nodos del dominio se genera un sistema de ecuaciones lineal para  $\delta p$  y  $\delta S$ . Cuando se evalúan los nodos en la frontera ( $i = 0, i = n - 1$ ), las ecuaciones son modificadas al aplicar las condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} F_o^n(S, p)|_{i=0} &= F_o^n(S_i, p_i, S_{i+1}, p_{i+1}) \\ F_w^n(S, p)|_{i=0} &= F_w^n(S_i, p_i, S_{i+1}, p_{i+1}) \\ F_o^n(S, p)|_{i=n-1} &= F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i) \\ F_w^n(S, p)|_{i=n-1} &= F_w^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Las ecuaciones en la frontera son función únicamente de las variables que se indican, ya que la contribución en la frontera se introduce como términos constantes. Tomando esto en cuenta, las condiciones de frontera en el Jacobiano serán cero, porque al tener términos constantes sobre los nodos frontera éstos se anulan al evaluar su derivada. Por lo tanto, las condiciones de frontera que evaluaremos a continuación solo aplican al lado derecho del sistema de ecuaciones lineal.

### Condiciones de frontera

Como puede apreciarse en la discretización del dominio (figura 5.2), las condiciones de frontera aplican en los casos  $i = 0$ ,  $i = n$ .

En el nodo  $i = 0$  extremo A del dominio, se tiene una inyección de flujo constante, descrito por la velocidad de inyección sobre la pared de la frontera  $\bar{v} \cdot \hat{n}$ . Donde  $\hat{n}$  es el vector normal a la superficie en la frontera A, y  $\bar{v}$  es la velocidad de Darcy (3.16) despreciando el factor gravitacional.

$$\bar{v} = \frac{k_{r\alpha} \mathbf{k}}{\mu} \nabla p; \quad \lambda = \frac{k_{r\alpha}}{\mu}$$

$$\bar{v} \cdot \hat{n} = -\lambda_A \mathbf{k} \frac{dp}{dx} = g_A^p = 3,4722 \times 10^{-7} \left[ \frac{m}{s} \right]$$

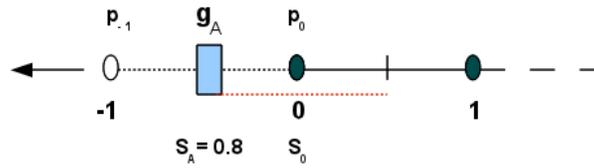


Figura 5.3: Neumann en frontera A

Tenemos de ésta forma, condición de frontera tipo Neumann. Aproximando la derivada de  $p$  sobre la cara del volumen de control para el nodo  $i = 0$

$$-\lambda_A \mathbf{k} \frac{p_0 - p_{-1}}{\Delta x} = g_A$$

y al despejar  $p_{-1}$

$$p_{-1} = p_0 + \frac{\Delta x}{\lambda_A \mathbf{k}} g_A$$

Asignamos las condiciones del frontera al sustituir  $p_{-1}$  y  $S_{-\frac{1}{2}} = 0,8$ ; en las ecuaciones (5.6) cuando  $i = 0$ .

$$F_o^n(S, p)|_{i=0} = -\frac{k}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda(S_{\frac{1}{2}}^n) p_1^n - \left( \lambda(S_{\frac{1}{2}}^n) + \lambda(0,8) \right) p_0^n + \lambda(0,8) \left( p_0 + \frac{\Delta x}{\lambda(0,8) \mathbf{k}} g_A \right) \right] = 0$$

$$F_w^n(S, p)|_{i=0} = \phi \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] - \frac{k}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda^w(S_{\frac{1}{2}}^n) p_1^n - \left( \lambda^w(S_{\frac{1}{2}}^n) + \lambda^w(0,8) \right) p_0^n + \lambda^w(0,8) \left( p_0 + \frac{\Delta x}{\lambda(0,8) \mathbf{k}} g_A \right) \right] = 0$$

En el nodo  $i = n$  extremo B, de acuerdo a las condiciones del modelo (tabla 5.1) se tiene una presión constante ( $p_B = 10^7 [Pa]$ ), condiciones Dirichlet. El valor (flujo) en la cara de volumen de control en dicho nodo se aproxima evaluando un promedio utilizando un nodo ficticio ( $p_{n+1}$ ).

$$p_B = \frac{p_{n+1} + p_n}{2} \quad \Rightarrow \quad p_{n+1} = 2p_B - p_n$$

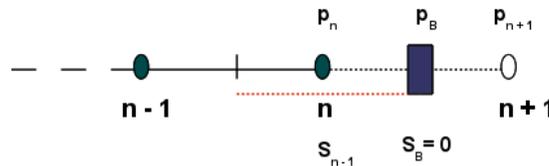


Figura 5.4: Dirichlet en frontera B

Despejando  $p_{n+1}$  de la expresión anterior y sustituyendo junto con  $S = 0$  en (5.6) cuando  $i = n$ , se tiene la ecuación de las condiciones de frontera en B.

$$F_o^n(S, p)|_{i=n} = -k \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda(0) (\mathbf{2p}_B - \mathbf{p}_n) - \left( \lambda(0) + \lambda(S_{n-\frac{1}{2}}^n) \right) p_n^n + \lambda(S_{n-\frac{1}{2}}^n) p_{n-1}^n \right] = 0$$

$$F_w^n(S, p)|_{i=n} = \phi \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] - k \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda^w(0) (\mathbf{2p}_B - \mathbf{p}_n) - \left( \lambda^w(0) + \lambda^w(S_{n-\frac{1}{2}}^n) \right) p_n^n + \lambda^w(S_{n-\frac{1}{2}}^n) p_{n-1}^n \right] = 0$$

La estructura de la matriz Jacobiano desarrollada para los  $i$ -ésimos nodos puede verse en el Apéndice B (sistema de ecuaciones linealizado).

### Evaluación de las derivadas parciales y esquema *upwind* (en castellano aguas arriba) utilizado para la evaluación de la saturación en las caras de los volúmenes de control.

En estos problemas de flujo multifásicos existe una discontinuidad (salto) de la saturación en el frente de desplazamiento de la curva de saturación. En las ecuaciones, este problema de salto se manifiesta en la continuidad que debe de haber entre las caras de los *volúmenes de control*. El esquema *upwind* es una forma de resolver dicha discontinuidad. Este método consiste en hacer una comparación entre los valores de la presión en los nodos vecinos a la cara del volumen  $(i + \frac{1}{2}, i - \frac{1}{2})$ , eligiendo la dirección de flujo (menor presión). Definiendo los potenciales:

$$\Delta\psi^+ = p_{i+1} - p_i$$

$$\Delta\psi^- = p_i - p_{i-1}$$

La saturación en las caras  $S_{i+\frac{1}{2}}$  y  $S_{i-\frac{1}{2}}$  se evaluarán de la siguiente forma.

$$S_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} S_{i+1}; & \Delta\psi^+ > 0 \\ S_i; & \Delta\psi^+ < 0 \end{cases}$$

$$S_{i-\frac{1}{2}} = \begin{cases} S_i; & \Delta\psi^- > 0 \\ S_{i-1}; & \Delta\psi^- < 0 \end{cases}$$

El esquema expuesto resulta en 4 casos posibles para la evaluación de la saturación en las caras del volumen de control en (5.6)

$$\begin{aligned} \text{caso(1)} & \quad \Delta\psi^+ > 0, \Delta\psi^- > 0 \\ \text{caso(2)} & \quad \Delta\psi^+ > 0, \Delta\psi^- < 0 \\ \text{caso(3)} & \quad \Delta\psi^+ < 0, \Delta\psi^- > 0 \\ \text{caso(4)} & \quad \Delta\psi^+ < 0, \Delta\psi^- < 0 \end{aligned}$$

Para nuestro problema consideramos únicamente el caso (4), dado que la inyección en el extremo A siempre producirá un frente de menor presión hacia la dirección de flujo.

### Evaluación del Jacobiano.

Para este problema aproximaremos numéricamente las derivadas parciales del Jacobiano (5.7), utilizando el método de diferenciación numérica conocido como **(n + 1) puntos** (Burden [6]).

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L'_k(x_j) + \frac{f^{n+1}(\xi(x_j))}{(n+1)!} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n (x_j - x_k) \quad (5.12)$$

La ecuación anterior permite aproximar la derivada de  $f(x_j)$ , siendo  $x_j$  un conjunto de  $(n + 1)$  números distintos  $\{x_0, x_1, x_3, \dots, x_n\}$ . Si utilizamos más puntos en la evaluación de la ecuación (5.9) obtenemos mejor precisión, aunque esto no es del todo conveniente, dada la cantidad de evaluaciones funcionales y el aumento del orden del error de redondeo. Las fórmulas comúnmente utilizadas son las que abarcan tres y cinco puntos de evaluación.

La **fórmula de tres puntos** se deriva de la ecuación (5.9) al desarrollar el *polinomio de coeficiente de Lagrange* ( $L_k(x)$ ) en tres puntos. Posterior a un tratamiento algebraico se obtienen dos expresiones de la fórmula de tres puntos, siempre y cuando se mantenga un espaciamiento regular entre cada  $x_j$  dado por  $h$ .

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0) \quad (5.13)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1) \quad (5.14)$$

Los errores en (5.10) y (5.11) son de orden cuadrático ( $O(h^2)$ ). El error de la ecuación (5.11) es aproximadamente la mitad del error obtenido por (5.10), debido a que en (5.11) se emplean datos en ambos lados del punto en que se evalúa la derivada ( $x_{j-h}$ ,  $x_{j+h}$ ). En cambio, (5.10) utiliza únicamente los puntos de un lado ( $x_j$ ,  $x_{j+h}$ ,  $x_{j+2h}$ ).

La ecuación (5.10) es útil para evaluar la derivada en valores que se encuentran en los límites del rango establecido ya que podrían generarse evaluaciones incorrectas, mientras que (5.11) será utilizada para evaluaciones de  $f$  con valores dentro de su intervalo. Cabe mencionar que la *fórmula de cinco puntos* utiliza dos puntos más, cuyo término del error tiene la forma  $O(h^4)$  (Burden [6]), esta fórmula no se utilizara por el costo computacional que implica evaluar cinco veces a la función  $f$  para un solo punto.

### Evaluación numérica de las derivadas parciales

Reescribiendo el sistema de ecuaciones (no lineal) (5.6), aplicando el caso (4) del esquema *upwind* tenemos

$$\begin{aligned} F_o^n &= -\underline{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda(S_i^n) p_{i+1}^n - (\lambda(S_i^n) + \lambda(S_{i-1}^n)) p_i^n + \lambda(S_{i-1}^n) p_{i-1}^n] = 0 \\ F_w^n &= \phi \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_{i-1}^{n-1}] - \underline{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda^w(S_i^n) p_{i+1}^n - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) p_i^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) p_{i-1}^n] = 0 \end{aligned} \quad (5.15)$$

Para expresar de manera simple las derivadas parciales del Jacobiano (5.7), planteemos (5.12) en función de sus variables.

$$\begin{aligned} F_o^n &= F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i, p_{i+1}) \\ F_w^n &= F_w^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i, p_{i+1}) \end{aligned}$$

Sean los espaciamentos entre cada punto discreto de las variables independientes sus correspondientes  $h_p$  y  $h_S$ .

Cuando se evalúan valores dentro de su rango establecido se aplica (5.11) para aproximar las derivadas parciales.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_o^n}{\partial S_{i-1}} &\approx \frac{1}{2h_S} [F_o^n(\mathbf{S}_{i-1} + \mathbf{h}_S, p_{i-1}, S_i, p_i, p_{i+1}) - F_o^n(\mathbf{S}_{i-1} - \mathbf{h}_S, p_{i-1}, S_i, p_i, p_{i+1})] \\ \frac{\partial F_o^n}{\partial p_{i-1}} &\approx \frac{1}{2h_p} [F_o^n(S_{i-1}, \mathbf{p}_{i-1} + \mathbf{h}_p, S_i, p_i, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, \mathbf{p}_{i-1} - \mathbf{h}_p, S_i, p_i, p_{i+1})] \\ \frac{\partial F_o^n}{\partial S_i} &\approx \frac{1}{2h_S} [F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i + \mathbf{h}_S, p_i, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i - \mathbf{h}_S, p_i, p_{i+1})] \\ \frac{\partial F_o^n}{\partial p_i} &\approx \frac{1}{2h_p} [F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i + \mathbf{h}_p, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i - \mathbf{h}_p, p_{i+1})] \\ \frac{\partial F_o^n}{\partial S_{i+1}} &\approx 0 \\ \frac{\partial F_o^n}{\partial p_{i+1}} &\approx \frac{1}{2h_p} [F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i, \mathbf{p}_{i+1} + \mathbf{h}_p) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, p_i, \mathbf{p}_{i+1} - \mathbf{h}_p)] \end{aligned}$$

Las mismas operaciones se realizan para las derivadas parciales de la ecuación de saturación  $F_w^n$ .

En el caso de una evaluación con un valor fuera del rango establecido, éste se omite y sus derivadas parciales son aproximadas sobre puntos de un solo lado (5.10).

Por ejemplo:

$$\frac{\partial(F_o^n)}{\partial S_i} \approx \frac{1}{2h_s} [-3F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i, p_i, p_{i+1}) + 4F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i + \mathbf{h}_s, p_i, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i + 2\mathbf{h}_s, p_i, p_{i+1})]$$

$$\frac{\partial(F_o^n)}{\partial p_i} \approx \frac{1}{2h_p} [-3F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i, p_{i+1}) + 4F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i + \mathbf{h}_p, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i + 2\mathbf{h}_p, p_{i+1})]$$

O bien.

$$\frac{\partial(F_o^n)}{\partial S_i} \approx \frac{1}{2h_s} [-3F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i, p_i, p_{i+1}) + 4F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i - \mathbf{h}_s, p_i, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, \mathbf{S}_i - 2\mathbf{h}_s, p_i, p_{i+1})]$$

$$\frac{\partial(F_o^n)}{\partial p_i} \approx \frac{1}{2h_p} [-3F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i, p_{i+1}) + 4F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i - \mathbf{h}_p, p_{i+1}) - F_o^n(S_{i-1}, p_{i-1}, S_i, \mathbf{p}_i - 2\mathbf{h}_p, p_{i+1})]$$

Una vez construido el Jacobiano a partir de una estimación inicial dada ( $p = p^0$ ,  $S = S^0$ ),

$$v^0 = p^0$$

$$u^0 = S^0$$

Se resuelve el sistema de ecuaciones (5.7) para los vectores incógnitas  $(\delta S, \delta p)$ . En notación indicial (5.7) se puede expresar como

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}(v^0, u^0)}{\partial p_j} & \frac{\partial F_{oi}(v^0, u^0)}{\partial S_j} \\ \frac{\partial F_{wi}(v^0, u^0)}{\partial p_j} & \frac{\partial F_{wi}(v^0, u^0)}{\partial S_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\delta p_j)^0 \\ (\delta S_j)^0 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_{oi}(v^0, u^0) \\ F_{wi}(v^0, u^0) \end{bmatrix} \quad i = 0, 1, 2 \dots N.$$

Donde  $j$  recorre los nodos incógnita con los índices  $[i-1, i, i+1]$  y  $N$  es el número de ecuaciones. El vector de correcciones obtenido con esta primera solución del sistema, es sumado a la estimación inicial

$$v^1 = v^0 + (\delta p)^0$$

$$u^1 = u^0 + (\delta S)^0.$$

Y se evalúa nuevamente el Jacobiano ahora con los campos actualizados en una mejor aproximación ( $S = u^1$ ,  $p = v^1$ ). Continuando así con la segunda iteración del método, al resolver el sistema de ecuaciones lineal (5.7).

La solución del Jacobiano y la actualización de los campos o variables dependientes, se hace de manera iterativa hasta que convergen a la solución en  $k$  iteraciones, para un paso del tiempo de  $n-1$  a  $n$ .

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}(v^k, u^k)}{\partial p_j} & \frac{\partial F_{oi}(v^k, u^k)}{\partial S_j} \\ \frac{\partial F_{wi}(v^k, u^k)}{\partial p_j} & \frac{\partial F_{wi}(v^k, u^k)}{\partial S_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\delta p_j)^k \\ (\delta S_j)^k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_{oi}(v^k, u^k) \\ F_{wi}(v^k, u^k) \end{bmatrix} \quad i = 0, 1, 2 \dots N. \quad (5.16)$$

$$v^{k+1} = v^k + (\delta p)^k$$

$$u^{k+1} = u^k + (\delta S)^k$$

El método de Newton-Raphson converge cuadráticamente a la solución hasta alcanzar una tolerancia  $\epsilon_o$  y  $\epsilon_w$ , tal que los incrementos  $(\delta p)^k < \epsilon_o$ ,  $(\delta S)^k < \epsilon_w$ , o bien:

$$\|v^{k+1} - v^k\| \leq \epsilon_o$$

$$\|u^{k+1} - u^k\| \leq \epsilon_w$$

Una vez obtenida una aproximación satisfactoria, la solución ( $p^n = v^{k+1}$ ,  $S^n = u^{k+1}$ ) servirá como una estimación inicial para la solución en el siguiente paso del tiempo. Continuando con esta metodología hasta cubrir con el intervalo de tiempo de interés.

### 5.1.2. Modelo en 2D

Extender la solución del modelo bifásico a un dominio bidimensional no tiene mayor dificultad mas que agregar los términos de las caras del *volumen de control* correspondientes al eje de la dimensión adicional (eje y). Estos términos adicionales se obtienen al integrar sobre el área del dominio 2D.

Sea un dominio rectangular de dimensiones  $L_x = 300$  por  $L_y = 20$  bajo las mismas condiciones del problema planteado para las ecuaciones (5.1) y (5.2), solo que las condiciones de frontera son una sección de la frontera (5.2).

Saturación	Presión
$S_A(0, y) = 0,8$	$g_A^p(0, y) = 3,4722 \times 10^{-7} [m/s]$
$S_B(L_x, y) = 0$	$p_B(L_x, y) = 10^7 [Pa]$

Cuadro 5.3: Condiciones frontera modelo 2D

Al aplicar la discretización por el Método de Volumen Finito se deberán resolver las integrales

$$\begin{aligned} & -\underline{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta y} \int_{\Delta x} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right) \cdot \left( \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x \partial y} \right) dx dy dt \\ & \phi \int_{\Delta t} \int_{\Delta y} \int_{\Delta x} \frac{\partial p}{\partial t} dx dy dt - \underline{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta y} \int_{\Delta x} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right) \cdot \left( \lambda^w(S) \frac{\partial p}{\partial x \partial y} \right) dx dy dt \end{aligned} \quad (5.17)$$

Las ecuaciones 5.14 corresponden a la ecuación de presión y saturación respectivamente.

Al integrar sobre el área del *volumen de control* (figura 5.4), integrando sobre el tiempo y planteando un sistema de ecuaciones totalmente implícito obtenemos las ecuaciones discretas tal y como se hizo en (5.6). Siendo consistente con la notación planteada en (??) el problema bifásico (5.1, 5.2) en 2D, se puede expresar en función de sus variables discretas.

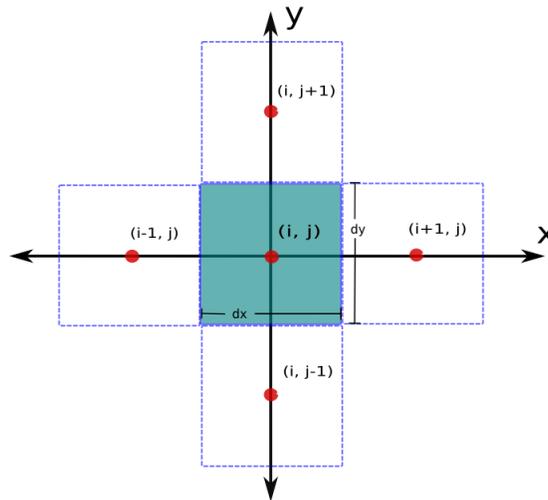


Figura 5.5: Área del *volumen de control* en 2D

$$\begin{aligned}
F_o(p, S) &\Rightarrow F_o^n(p_{i,j-1}, S_{i,j-1}, p_{i-1,j}, S_{i-1,j}, p_{i,j}, S_{i,j}, p_{i+1,j}, S_{i+1,j}, p_{i,j+1}, S_{i,j+1}) \\
F_w(p, S) &\Rightarrow F_w^n(p_{i,j-1}, S_{i,j-1}, p_{i-1,j}, S_{i-1,j}, p_{i,j}, S_{i,j}, p_{i+1,j}, S_{i+1,j}, p_{i,j+1}, S_{i,j+1})
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Desarrollando la expansión en series de Taylor en ambas ecuaciones.

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i,j-1}} \delta p_{i,j-1} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i,j-1}} \delta S_{i,j-1} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i-1,j}} \delta p_{i-1,j} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i-1,j}} \delta S_{i-1,j} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i,j}} \delta p_{i,j} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i,j}} \delta S_{i,j} + \\
&+ \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i+1,j}} \delta p_{i+1,j} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i+1,j}} \delta S_{i+1,j} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i,j+1}} \delta p_{i,j+1} + \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i,j+1}} \delta S_{i,j+1} = -F_{oi} \\
&\frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i,j-1}} \delta p_{i,j-1} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i,j-1}} \delta S_{i,j-1} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i-1,j}} \delta p_{i-1,j} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i-1,j}} \delta S_{i-1,j} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i,j}} \delta p_{i,j} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i,j}} \delta S_{i,j} + \\
&+ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i+1,j}} \delta p_{i+1,j} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i+1,j}} \delta S_{i+1,j} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i,j+1}} \delta p_{i,j+1} + \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i,j+1}} \delta S_{i,j+1} = -F_{wi}
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Factorizando como la suma de productos matriz-vector:

$$\begin{aligned}
&\begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i,j-1}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i,j-1}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i,j-1}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i,j-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i,j-1} \\ \delta S_{i,j-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i-1,j}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i-1,j}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i-1,j}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i-1,j}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i-1,j} \\ \delta S_{i-1,j} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i,j}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i,j}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i,j}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i,j}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i,j} \\ \delta S_{i,j} \end{bmatrix} + \\
&+ \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i+1,j}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i+1,j}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i+1,j}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i+1,j}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i+1,j} \\ \delta S_{i+1,j} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}}{\partial p_{i,j+1}} & \frac{\partial F_{oi}}{\partial S_{i,j+1}} \\ \frac{\partial F_{wi}}{\partial p_{i,j+1}} & \frac{\partial F_{wi}}{\partial S_{i,j+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p_{i,j+1} \\ \delta S_{i,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -F_{oi} \\ -F_{wi} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Nuevamente, utilizando notación indicial simplificamos la expansión en series de Taylor en la expresión del método iterativo de Newton del sistema linealizado, al igual que (5.13). Sólo que ahora el índice de la sumatoria  $q$  toma los valores de los pares coordenados  $\{[i, j-1], [i-1, j], [i, j], [i+1, j], [i, j+1]\}$ .

$$\begin{aligned}
v^k &= p^0 \\
u^k &= S^0 \quad ; \quad k = 0
\end{aligned}$$

$$\sum_{q=i,j-1}^{i,j+1} \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}(v^k, u^k)}{\partial p_q} & \frac{\partial F_{oi}(v^k, u^k)}{\partial S_q} \\ \frac{\partial F_{wi}(v^k, u^k)}{\partial p_q} & \frac{\partial F_{wi}(v^k, u^k)}{\partial S_q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\delta p)^k \\ (\delta S)^k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_{oi}(v^k, u^k) \\ F_{wi}(v^k, u^k) \end{bmatrix} \quad i = 0, 1, 2 \dots N. \tag{5.20}$$

$$\begin{aligned}
v^{k+1} &= v^k + (\delta p)^k \\
u^{k+1} &= u^k + (\delta S)^k
\end{aligned}$$

Para  $k = 1, 2, \dots, K$ , hasta que la solución converge cuando se cumplen las condiciones  $(\delta p)^k < \epsilon_o$ ,  $(\delta S)^k < \epsilon_w$ .

La construcción del Jacobiano se hace derivando numéricamente con el método de  $(n+1)$  puntos (utilizando 3 puntos) en cada elemento de la matriz.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F_o^n}{\partial p_{i,j-1}} &\approx \frac{1}{2h_p} [F_o^n(\mathbf{p}_{i,j-1} + \mathbf{h}_p, S_{i,j-1}, p_{i-1,j}, S_{i-1,j}, p_{i,j}, S_{i,j}, \\
&\quad p_{i+1,j}, S_{i+1,j}, p_{i,j+1}, S_{i,j+1}) \\
&\quad - F_o^n(\mathbf{p}_{i,j-1} - \mathbf{h}_p, S_{i,j-1}, p_{i-1,j}, S_{i-1,j}, p_{i,j}, S_{i,j}, \\
&\quad p_{i+1,j}, S_{i+1,j}, p_{i,j+1}, S_{i,j+1})]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F_o^n}{\partial S_{i,j-1}} &\approx \frac{1}{2h_S} [F_o^n(p_{i,j-1}, \mathbf{S}_{i,j-1} + \mathbf{h}_S, p_{i-1,j}, S_{i-1,j}, p_{i,j}, S_{i,j}, \\
&\quad p_{i+1,j}, S_{i+1,j}, p_{i,j+1}, S_{i,j+1}) \\
&\quad - F_o^n(p_{i,j-1}, \mathbf{S}_{i,j-1} - \mathbf{h}_S, p_{i-1,j}, S_{i-1,j}, p_{i,j}, S_{i,j}, \\
&\quad p_{i+1,j}, S_{i+1,j}, p_{i,j+1}, S_{i,j+1})]
\end{aligned}$$

⋮

### 5.1.3. Modelo en 3D

Resolver el modelo de flujo bifásico en un dominio tridimensional solo requiere integrar el *volumen de control* planteado en un dominio sobre los tres ejes cartesianos.

Por ejemplo, si se supone un dominio conformado por un prisma rectangular de dimensiones:  $L_x = 300$ ,  $L_y = 20$ ,  $L_z = 20$ ; donde consideraremos las mismas condiciones iniciales y de frontera, en este caso las fronteras son superficies. La formulación de la discretización de las ecuaciones (5.1) y (5.2) con el *Método de Volumen Finito* sobre el dominio tridimensional se obtiene al integrar sobre el volumen del *volumen de control* (figura 5.5):

$$\phi \int_{\Delta t} \int_{\Delta z} \int_{\Delta y} \int_{\Delta x} \frac{\partial p}{\partial t} dx dy dz dt - \underline{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta z} \int_{\Delta y} \int_{\Delta x} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left( \lambda(S) \frac{\partial p}{\partial x \partial y \partial z} \right) dx dy dz dt - \underline{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta z} \int_{\Delta y} \int_{\Delta x} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left( \lambda^w(S) \frac{\partial p}{\partial x \partial y \partial z} \right) dx dy dz dt \quad (5.21)$$

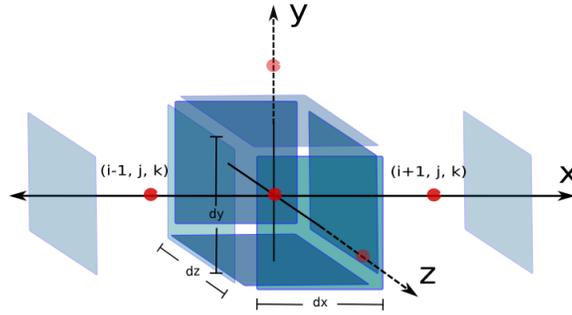


Figura 5.6: Volumen del volumen de control en 3D

Si siguiendo los mismos pasos realizados en la discretización del modelo en 1D, llegamos a un sistema de ecuaciones discretizado similar a (5.6), estableciendo también un esquema totalmente implícito al discretizar sobre el tiempo. Nuevamente denotamos este sistema discretizado como funciones de sus variables discretas, que en tres dimensiones tenemos  $2 \times 7$  variables:

$$F_o^n(p_{i,j,k-1}, S_{i,j,k-1}, p_{i,j-1,k}, S_{i,j-1,k}, p_{i-1,j,k}, S_{i-1,j,k}, p_{i,j,k}, S_{i,j,k}, p_{i+1,j,k}, S_{i+1,j,k}, p_{i,j+1,k}, S_{i,j+1,k}, p_{i,j,k+1}, S_{i,j,k+1})$$

$$F_w^n(p_{i,j,k-1}, S_{i,j,k-1}, p_{i,j-1,k}, S_{i,j-1,k}, p_{i-1,j,k}, S_{i-1,j,k}, p_{i,j,k}, S_{i,j,k}, p_{i+1,j,k}, S_{i+1,j,k}, p_{i,j+1,k}, S_{i,j+1,k}, p_{i,j,k+1}, S_{i,j,k+1})$$

El tratamiento de Linealización con el método de Newton se aborda al realizar la expansión en series de Taylor en ambas ecuaciones del sistema acoplado (5.1.3). En este caso de tres dimensiones la expresión del sistema linealizado con  $\delta p$  y  $\delta s$ , dado por (??), se extiende a 14 términos que a su vez son factorizados como un producto matriz vector, donde la suma de estas matrices conforman el Jacobiano y la suma de estos vectores forman el vector de correcciones dentro del ciclo iterativo.

Finalmente la notación del modelo discretizado en 3D dentro del método iterativo de Newton-Raphson, no cambia, simplemente se modifica el índice  $q$  que recorre los valores de un vector de tres coordenadas:

$$\{[i, j, k - 1], [i, j - 1, k], [i - 1, j, k], [i, j, k], [i + 1, j, k], [i, j + 1, k], [i, j, k + 1]\}.$$

$$\begin{aligned} v^k &= p^0 \\ u^k &= S^0 \quad ; \quad k = 0 \end{aligned}$$

$$\sum_{q=i,j,k-1}^{i,j,k+1} \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{oi}(v^k, u^k)}{\partial p_q} & \frac{\partial F_{oi}(v^k, u^k)}{\partial S_q} \\ \frac{\partial F_{wi}(v^k, u^k)}{\partial p_q} & \frac{\partial F_{wi}(v^k, u^k)}{\partial S_q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\delta p_q)^k \\ (\delta S_q)^k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_{oi}(v^k, u^k) \\ F_{wi}(v^k, u^k) \end{bmatrix} \quad i = 0, 1, 2 \dots N. \quad (5.22)$$

$$v^{k+1} = v^k + (\delta p)^k$$

$$u^{k+1} = u^k + (\delta s)^k$$

Para  $k = 1, 2, \dots, K$ , hasta que la solución converge cuando se cumplen las condiciones  $(\delta p)^k < \epsilon_o$ ,  $(\delta s)^k < \epsilon_w$ .

De la misma forma la construcción del Jacobiano se hace derivando numéricamente con el método de  $(n+1)$  puntos.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_o^n}{\partial p_{i,j,k-1}} \approx & \frac{1}{2h_p} [F_o^n(\mathbf{p}_{i,j,k-1} + \mathbf{h}_p, S_{i,j,k-1}, p_{i,j-1,k}, S_{i,j-1,k}, p_{i-1,j,k}, S_{i-1,j,k}, \\ & p_{i,j,k}, S_{i,j,k}, p_{i+1,j,k}, S_{i+1,j,k}, \\ & p_{i,j+1,k}, S_{i,j+1,k}, p_{i,j,k+1}, S_{i,j,k+1}, ) \\ & - F_o^n(\mathbf{p}_{i,j,k-1} - \mathbf{h}_p, S_{i,j,k-1}, p_{i,j-1,k}, S_{i,j-1,k}, p_{i-1,j,k}, S_{i-1,j,k}, \\ & p_{i,j,k}, S_{i,j,k}, p_{i+1,j,k}, S_{i+1,j,k}, \\ & p_{i,j+1,k}, S_{i,j+1,k}, p_{i,j,k+1}, S_{i,j,k+1})] \\ & \vdots \end{aligned}$$

## 5.2. Modelo bifásico incompresible e inmiscible

Este modelo difiere del modelo anterior (Buckley-Leverett), al considerar la presión capilar distinta de cero. Su formulación axiomática se ha presentado en la sección (3.4) y prácticamente todo del desarrollo del sistema de ecuaciones del modelo bifásico ya ha sido explicado, por lo que su discretización se presentará de manera breve haciendo referencia a los desarrollos anteriores.

Abordaremos entonces éste modelo con la forma en que aproximaremos la presión capilar. De acuerdo con las definiciones petrofísicas presentadas en el Capítulo 1, la presión capilar producida por la inmiscibilidad entre el agua y el aceite ( $p_{cow}$ ), es función de la saturación del agua (1.10). Y su aproximación mas simple es:

$$P_{cow} = S_w - 1 \quad (5.23)$$

Al incorporar la presión capilar en el modelo bifásico se tiene más información de la saturación en las ecuaciones. En otros métodos de linealización de ecuaciones como IMPES, ésto produce cierta estabilidad numérica en la solución. Por ésta razón, se ha decidido resolver los dos modelos para someter a discusión los resultados y ver si existe un efecto considerable en la solución con el método de Newton-Raphson.

Al sustituir la presión capilar (??) en las ecuaciones de flujo bifásico inmiscible e incompresible (3.36) y (3.37), tenemos.

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left( \lambda \mathbf{k} \nabla p_o + \lambda_w \mathbf{k} \frac{d(S_w - 1)}{dS_w} \nabla S_w \right) &= 0 \\ \varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \lambda_w \mathbf{k} \nabla p_o + \lambda_w \mathbf{k} \frac{d(S_w - 1)}{dS_w} \nabla S_w \right) &= 0 \end{aligned}$$

Nuevamente descartamos fuentes de inyección o pozos de extracción dentro del dominio ( $q_o = q_w = 0$ ).

$$-\nabla \cdot (\lambda \mathbf{k} \nabla p + \lambda^w \mathbf{k} \nabla S) = 0 \quad (5.24)$$

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda^w \mathbf{k} \nabla p + \lambda^w \mathbf{k} \nabla S) = 0 \quad (5.25)$$

Asumiremos las mismas condiciones del modelo Buckley-Leverett, así como, las consideraciones de los parámetros tales que, la porosidad ( $\varepsilon$ ), permeabilidad absoluta ( $\mathbf{k}$ ) y viscosidades ( $\mu_o, \mu_w$ ) son parámetros constantes. Integrando la ecuación de presión (5.20) sobre el volumen de control, figura (5.2).

$$-\mathbf{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \nabla \cdot (\lambda \nabla p + \lambda^w \nabla S) dx dt = -\mathbf{k} \int_{\Delta t} ([\lambda \nabla p + \lambda^w \nabla S]_E - [\lambda \nabla p + \lambda^w \nabla S]_W) dt$$

Al aproximar las derivadas sobre las caras del volumen de control y la evacuación de los coeficientes  $\lambda$  y  $\lambda^w$  sobre las mismas.

$$\begin{aligned} \nabla S|_W &= \frac{S_i - S_{i-1}}{\Delta x}; & \nabla p|_W &= \frac{p_i - p_{i-1}}{\Delta x}; & \lambda_W &= \lambda(S_{i-\frac{1}{2}}) \\ \nabla S|_E &= \frac{S_{i+1} - S_i}{\Delta x}; & \nabla p|_E &= \frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x}; & \lambda_E &= \lambda(S_{i+\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

Integrando sobre el tiempo, planteando un esquema totalmente implícito (todas las variables en tiempo n) y sustituyendo las expresiones anteriores.

$$-\mathbf{k} \Delta t \left[ \lambda(S_{i+\frac{1}{2}}^n) \frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta x} + \lambda^w(S_{i+\frac{1}{2}}^n) \frac{S_{i+1}^n - S_i^n}{\Delta x} - \lambda(S_{i-\frac{1}{2}}^n) \frac{p_i^n - p_{i-1}^n}{\Delta x} - \lambda^w(S_{i-\frac{1}{2}}^n) \frac{S_i^n - S_{i-1}^n}{\Delta x} \right]$$

Al aplicar el caso (4) del esquema *upwind*, descrito en la sección anterior y factorizando términos semejantes. Tenemos finalmente la expresión discretizada de la ecuación de presión.

$$-\mathbf{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \lambda(S_i^n) p_{i+1}^n + \lambda^w(S_i^n) S_{i+1}^n - (\lambda(S_i^n) + \lambda(S_{i-1}^n)) p_i^n - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) S_i^n + \lambda(S_{i-1}^n) p_{i-1}^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) S_{i-1}^n \right] = 0 \quad (5.26)$$

Continuamos con la integración de la ecuación de saturación (5.21).

$$\varepsilon \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \frac{dS}{dt} dx dt - \mathbf{k} \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \nabla \cdot (\lambda^w \nabla p + \lambda^w \nabla S) dx dt$$

La segunda integral es similar a la ecuación de presión que acabamos de resolver, sólo que ahora ambos coeficientes son la movilidad de la fase agua ( $\lambda^w$ ), por lo que omitiremos su desarrollo. Resolviendo la primera integral tenemos.

$$\varepsilon \int_{\Delta t} \int_{\Delta x} \frac{dS}{dt} dx dt = \varepsilon \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}]$$

Finalmente añadimos el segundo integrando, que solamente requiere cambiar la movilidad total por la movilidad de la fase agua, de la ecuación (5.22).

$$\begin{aligned} & \varepsilon \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] \dots \\ & - \mathbf{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda^w(S_i^n) p_{i+1}^n + \lambda^w(S_i^n) S_{i+1}^n - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) p_i^n \dots \\ & - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) S_i^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) p_{i-1}^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) S_{i-1}^n] = 0 \end{aligned} \quad (5.27)$$

Las condiciones de frontera son las mismas que se aplicaron al modelo Buckley-Levert.

Para la frontera del extremo A del dominio (figura 5.2) tenemos:

**Ecuación de presión**

$$\begin{aligned} & - \mathbf{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda(S_i^n) p_{i+1}^n + \lambda^w(S_i^n) S_{i+1}^n - (\lambda(S_i^n) + \lambda(0,8)) p_i^n \dots \\ & - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(0,8)) S_i^n + \lambda(0,8) (\mathbf{p}_i^n + \frac{\Delta \mathbf{x}}{\lambda_A \mathbf{k}} \mathbf{g}_A) + \lambda^w(0,8) (2\mathbf{S}_A - \mathbf{S}_i^n)] = 0 \end{aligned} \quad (5.28)$$

**Ecuación de saturación**

$$\begin{aligned} & \varepsilon \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] \dots \\ & - \mathbf{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda^w(S_i^n) p_{i+1}^n + \lambda^w(S_i^n) S_{i+1}^n - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(0,8)) p_i^n \dots \\ & - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(0,8)) S_i^n + \lambda^w(0,8) (\mathbf{p}_i^n + \frac{\Delta \mathbf{x}}{\lambda_A \mathbf{k}} \mathbf{g}_A) + \lambda^w(0,8) (2\mathbf{S}_A - \mathbf{S}_i^n)] = 0 \end{aligned} \quad (5.29)$$

En la frontera del extremo B del dominio:

**Ecuación de presión**

$$\begin{aligned} & - \mathbf{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda(S_i^n) (2\mathbf{p}_B - \mathbf{p}_i^n) + \lambda^w(S_i^n) (2\mathbf{S}_B - \mathbf{S}_i^n) - (\lambda(S_i^n) + \lambda(S_{i-1}^n)) p_i^n \dots \\ & - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) S_i^n + \lambda(S_{i-1}^n) p_{i-1}^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) S_{i-1}^n] = 0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

**Ecuación de saturación**

$$\begin{aligned} & \varepsilon \frac{\Delta x}{\Delta t} [S_i^n - S_i^{n-1}] \dots \\ & - \mathbf{k} \frac{\Delta t}{\Delta x} [\lambda^w(S_i^n) (2\mathbf{p}_B - \mathbf{p}_i^n) + \lambda^w(S_i^n) (2\mathbf{S}_B - \mathbf{S}_i^n) - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) p_i^n \dots \\ & - (\lambda^w(S_i^n) + \lambda^w(S_{i-1}^n)) S_i^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) p_{i-1}^n + \lambda^w(S_{i-1}^n) S_{i-1}^n] = 0 \end{aligned} \quad (5.31)$$

Una vez planteadas las ecuaciones sobre el dominio discreto, se aplica el proceso de linealización con el ciclo iterativo (5.13), hasta resolver el sistema de ecuaciones en el tiempo deseado.

### 5.3. Análisis de resultados

La solución de los modelos discretizados en las secciones anteriores fueron implementados en **Python**, aprovechando sus herramientas algebraicas, tales como los módulos **numpy**; para el manejo de arreglos y matrices y **scipy**; que ofrece una gran variedad de métodos de solución de sistemas de ecuaciones para matrices de todo tipo. El programa está estructurado en tres archivos:

- `flujoBifasico.py`
- `ecuacionDosFases.py`
- `parametros.py`

El archivo `flujoBifasico.py` capta la información necesaria para ejecutar el modelo requerido y algunos parámetros como el incremento del tiempo y número de nodos. Controla también los ciclos de los incrementos en el tiempo y las iteraciones del método de Newton-Raphson. En `ecuacionDosFases.py` se construye el Jacobiano y se derivan numéricamente las ecuaciones, mismo en el que se han implementado los modelos discretizados. Por último, `parametros.py` contiene una lista de los parámetros requeridos por los modelos.

Prácticamente se llega a la misma solución con los dos modelos de flujo bifásico. Aunque al aplicar distintos métodos de solución de sistemas lineales, se presenta una diferencia notable entre éstos, al parecer el modelo que incluye la presión capilar tiene mayor estabilidad numérica con la mayoría de los métodos de solución de sistemas lineales utilizados. Por ésta razón y dado que el Jacobiano siempre resulta en una matriz asimétrica, la elección del método de solución de ecuaciones lineales se obtuvo al realizar pruebas con cuatro métodos aptos para matrices no simétricas: "Generalized Minimal Residual" **gmres**, "Quasi-Minimal Residual" **qmr**, "Conjugate Gradient Squared" **cgs** y *Gradiente Biconjugado* **bicg**. Las pruebas se hicieron con los parámetros fijos:  $\Delta p = 1e^3$  [Pa],  $\Delta S = 1e^{-4}$ ,  $\Delta x = 10$  [m],  $\Delta t = 10$  [días] y 60 Volúmenes, hasta un tiempo máximo  $T_{max} = 900$  [días].

Los mejores resultados se obtuvieron con **gmres** y **qmr**. Ambos modelos (*Buckley-Leverett* y *Bifásico inmiscible e incompresible*) convergieron a la misma solución con una diferencia máxima del orden de  $1,7[Pa]$  para la presión y  $10e^{-7}$  para la saturación, con movilidades lineales ( $\lambda[\omega = 1]$ ). Mientras que la diferencia máxima utilizando movilidades cuadráticas ( $\lambda[\omega = 2]$ ) es del orden de  $10e^4[Pa]$  para la presión y  $1e^{-3}$  para la saturación. Gráficamente estas diferencias son imperceptibles. La figura (5.6) muestra las soluciones de los campos de presión y saturación del modelo bifásico con movilidades lineales, las soluciones utilizando movilidades cuadráticas se muestra en la figura (5.7).

Con el método de solución de sistemas de ecuaciones **bicg**, la solución se volvió inestable después de transcurridos 450 días utilizando el modelo Bifásico con presión capilar, mientras que con el modelo Buckley-Leverett divergió a los 100 días. Al aplicar el método de solución **cgs** los resultados fueron menos satisfactorios, con el modelo Buckley-Leverett a los primeros pasos de tiempo la solución no convergió, y para el modelo con presión capilar divergió a los 200 días transcurridos.

Esta inestabilidad numérica producida por los métodos de solución muy probablemente pueda corregirse con el uso de un preconditionador. Pero como ya se han obtenido resultados satisfactorios con los métodos **gmres** y **qmr** el uso de preconditionadores se omitió. Finalmente el método **qmr** resultó ser el más conveniente por converger más rápidamente, al terminar en la mitad del tiempo que le tomó a **gmres** ejecutar el programa.

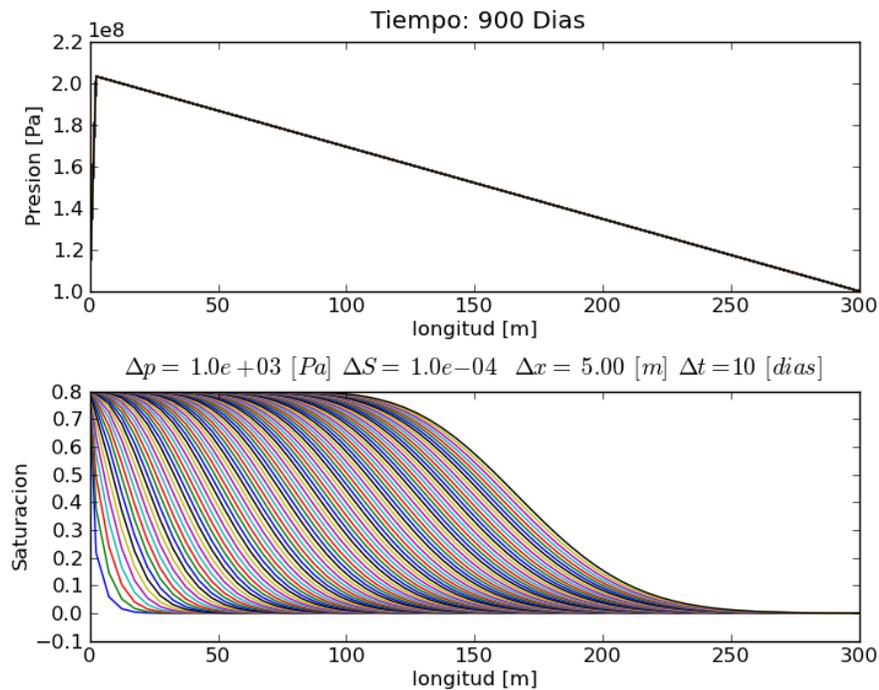


Figura 5.7: Modelo Buckley-Leverett con coeficiente de movilidad lineal. Soluciones cada  $\Delta t = 10$  [días], hasta un tiempo máximo  $T_{max} = 900$  [días].

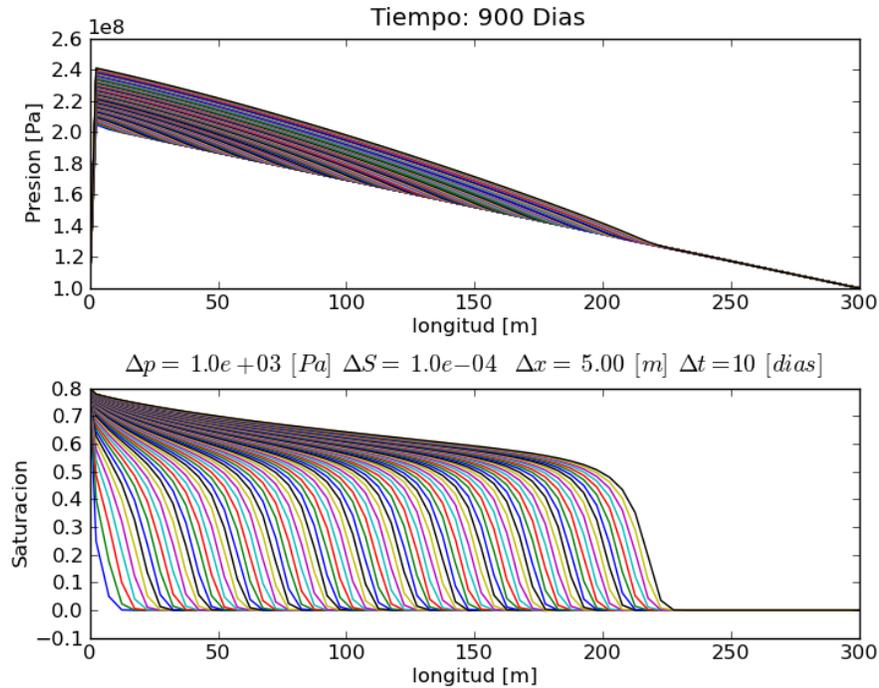


Figura 5.8: Modelo Bifásico inmisible e incompresible con coeficiente de movilidad cuadrático. Soluciones cada  $\Delta t = 10$  [días], hasta un tiempo máximo  $T_{max} = 900$  [días].

Existe una diferencia notable en las soluciones al considerar las movilidades lineales ó cuadráticas. El comportamiento de la presión por ejemplo, cuando la movilidad es lineal (figura: 5.6), la solución obtenida en el primer tiempo es una recta con pendiente negativa y se mantiene fija en los pasos del tiempo consecutivos, a diferencia de la movilidad cuadrática (figura: 5.7) la curva de la presión se va ajustando (cambio de pendiente) conforme va avanzando la saturación del agua ( $S_w$ ). En cuanto a las curvas de saturación con la movilidad lineal, se tiene un frente de desplazamiento mas suave, y simula un desplazamiento total del aceite en los primeros metros de avance. En cambio, con la movilidad cuadrática el frente de desplazamiento se aproxima más a una función escalón y aparentemente el desplazamiento no es tan efectivo como el comportamiento de la movilidad lineal y hay mayor saturación residual del aceite.

### 5.3.1. Análisis de convergencia con el incremento de $\Delta t$

Las soluciones de los campos de presión y saturación en cada tiempo convergen bastante rápido cuando las movilidades son lineales, con ambos modelos. Incluso, en los mejores resultados obtenidos, el ciclo termina con la solución trivial (vector cero), es decir, las correcciones  $\delta p$  y  $\delta S$  son exactamente cero. Cuando las movilidades son cuadráticas, el número de iteraciones aumenta conforme avanza el tiempo, éste comportamiento se agudiza al incrementar los pasos del tiempo  $\Delta t$ . Para ilustrar lo anterior se presenta a continuación las gráficas del número de iteraciones contra el tiempo a distintos incrementos  $\Delta t = 5, 10, 30, 50$ . [días], y veremos como hay mayor dificultad para alcanzar la solución hasta el punto en que el método diverge a partir de una  $\Delta t$  crítica.

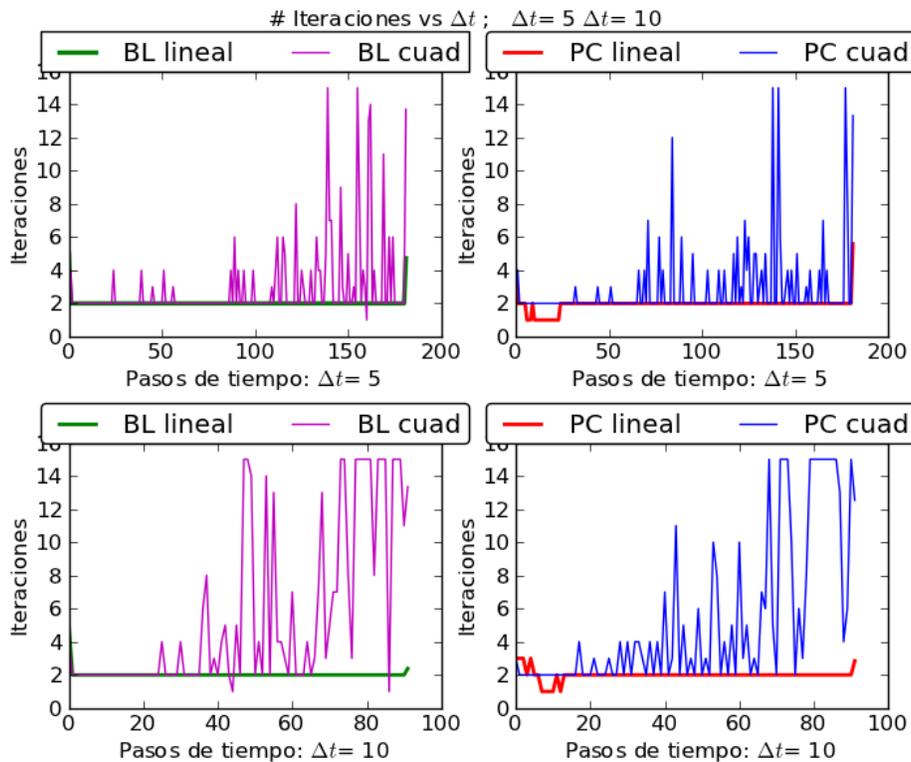


Figura 5.9: Gráficas: Iteraciones vs tiempo, para  $\Delta t = 5, 10$  [días]. BL: Modelo Buckley-Leverett ; PC: Modelo Bifásico inmiscible e incompresible (con Presión Capilar).

En todas las pruebas hechas, el número máximo de iteraciones es de 15, la tolerancia para interrumpir el ciclo iterativo se da cuando el máximo valor de los vectores de correcciones alcanzan las tolerancias:  $\delta p < 1e^2$  y  $\delta S < 1e^{-6}$  para la presión y saturación respectivamente. Cuando el número máximo de iteraciones es alcanzado se continua con el siguiente paso de tiempo, utilizando la última aproximación alcanzada, con ésto en mente procedemos al análisis de las figuras (5.8) y (5.9).

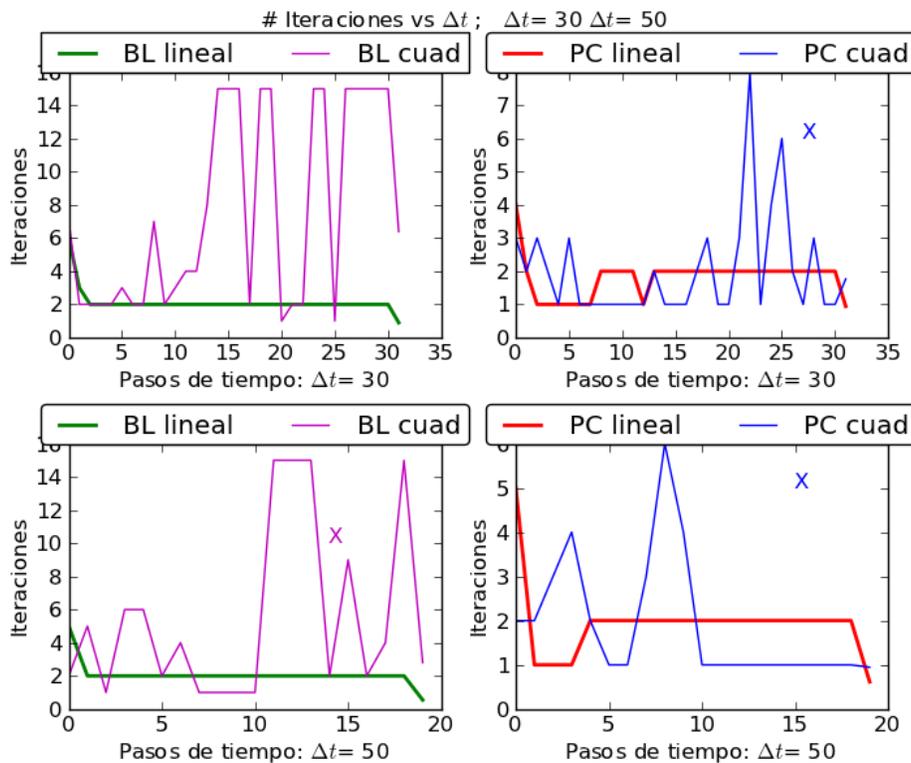


Figura 5.10: Gráficas: Iteraciones vs tiempo, para  $\Delta t = 30, 50$  [días]. BL: Modelo Buckley-Leverett ; PC: Modelo Bifásico inmiscible e incompresible (con Presión Capilar).

En la figura (5.8) para un  $\Delta t = 5$  [días], tenemos un comportamiento aceptable del método iterativo en los primeros tiempos, la convergencia del método de Newton se alcanza de 2 a 4 pasos iterativos. Como ya se había mencionado antes, el método de Newton requiere de más iteraciones con mayor frecuencia conforme el tiempo avanza, esto solo ocurre con la movilidad cuadrática.

Al utilizar la movilidad lineal, el método de Newton es totalmente estable en cualquier tiempo y para todos los pasos de tiempo  $\Delta t$  asignados, incluso con el modelo PC la convergencia se alcanza en un solo paso iterativo en los primeros 200 días, aunque en todos los casos la solución en el primer tiempo requiere de al menos 4 iteraciones. Para un  $\Delta t = 10$  [días] con la movilidad cuadrática, todavía tenemos una solución aceptable para los primeros tiempos, tal vez un poco menos estable con el modelo BL. Sin embargo, a partir de los 650 días ya no se alcanza la tolerancia establecida, esto puede apreciarse claramente en los "máximos planos" de las gráficas en los modelos BL y PC. Para poder apreciar la escala de tiempo en días en las gráficas anteriores, multiplique la escala de las abscisas por  $\Delta t$ .

Como se mencionó anteriormente el programa continua al alcanzar el máximo numero de iteraciones, aceptando la última aproximación. Esto produce que la solución se desvíe al tolerar una aproximación con mayor error. Aunque es evidente que la solución tiene mayor margen de error en los últimos tiempos, gráficamente no se percibe una diferencia clara comparada con la solución en  $\Delta t = 5$  [días], por lo que las soluciones con un paso de  $\Delta t = 10$  se consideran aún dentro del margen de tolerancia.

Continuaremos la discusión de las soluciones con movilidades cuadráticas ya que las lineales mantienen un comportamiento regular en todos los  $\Delta t$  probados, incluso se mantiene en un margen bajo de iteraciones hasta un  $\Delta t = 70$  [días]. En la figura (5.9) los resultados con las movilidades cuadráticas empiezan a divergir a partir de  $\Delta t = 30$  [días], las gráficas marcadas con 'X' aparentemente alcanzan una solución en pocas iteraciones pero el campo en que se encuentran éstas soluciones están muy lejos de un resultado que pueda asociarse a un evento físico (no tiene caso mostrar los resultados, se encuentran fuera de rango). La solución con BL cuadrática converge correctamente en los primeros 400 días, pero en éste caso justo cuando se alcanza el primer "máximo plano" de iteraciones y empieza a tolerar soluciones con cierto margen de error la solución empieza a desviarse, solo que ahora

el error arrastrado es de tal magnitud que afecta las soluciones posteriores. En la figura (5.10) se ve claramente como inicia la distorsión de la solución en el momento en que ocurrió la primer serie de máximos en las curvas Iteración vs tiempo (gráfica 1, figura 5.9).

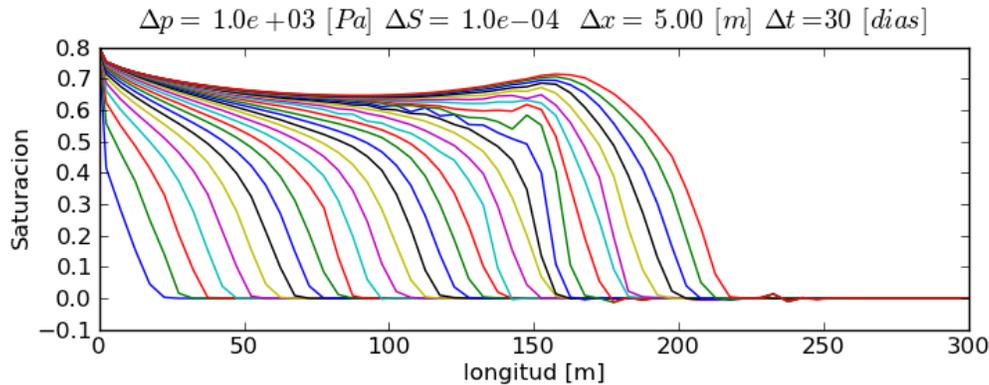


Figura 5.11: Solución con modelo Buckley-Leverett, movilidades cuadráticas, con paso del tiempo  $\Delta t = 30$  [días]. Inicia divergencia de la solución.

Con las pruebas anteriores podemos establecer como valor crítico aproximado, de incremento en el tiempo:  $\Delta t_c = 28$  [días], para la movilidad cuadrática y  $\Delta t_c = 70$  [días] para la movilidad lineal con ambos modelos.

Probaremos ahora, el comportamiento del método de Newton al refinar la malla aumentando el número de nodos a 120. Intuitivamente uno esperaría que la convergencia mejore, sabiendo que se obtiene una mejor aproximación con una malla más fina. Sin embargo, aumentó el número de iteraciones en todas las pruebas hechas y se redujo el valor crítico de incrementos de tiempo a  $\Delta t = 10$  [días], para el caso de movilidades cuadráticas, para movilidades lineales no hubo cambios. En la figura (5.11) se tienen los resultados mostrando solo los eventos que convergieron satisfactoriamente a las soluciones.

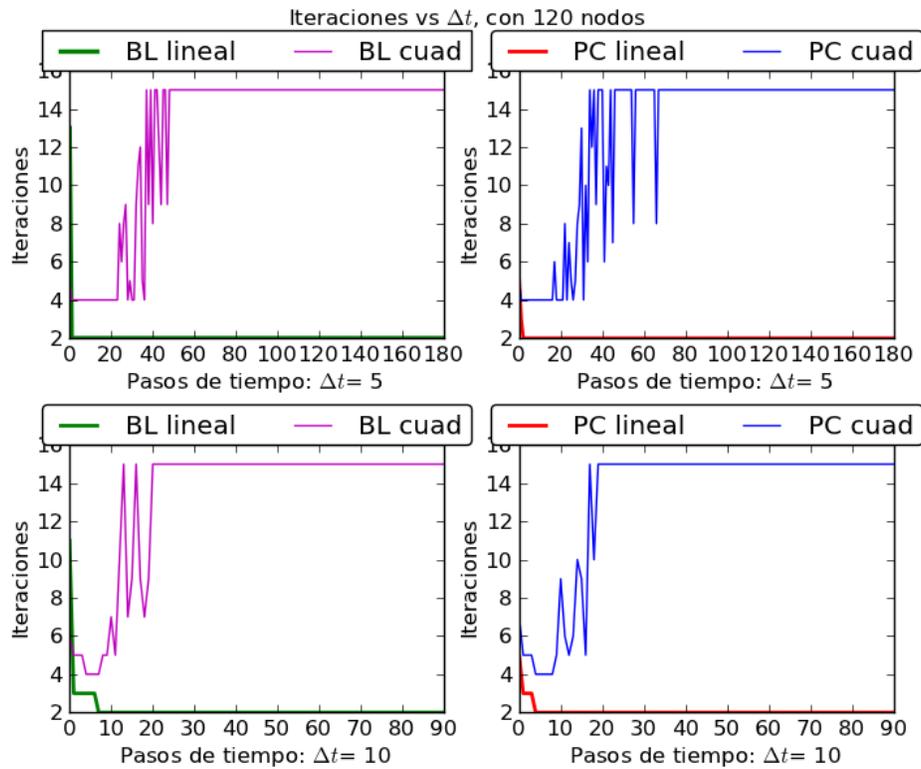


Figura 5.12: Gráficas: Iteraciones vs tiempo, utilizando 120 nodos, para  $\Delta t = 5, 10$  [días]. BL: Modelo Buckley-Leverett ; PC: Modelo Bifásico inmiscible e incompresible (con Presión Capilar).

### 5.3.2. Análisis de error de aproximación

A continuación, analizaremos gráficamente el comportamiento de las curvas de saturación y presión al refinar la "malla" (no existe una malla como tal ya que es un problema en 1D). En las figuras (5.12) y (5.13) se muestra el cambio en las curvas de presión y saturación para movilidades lineales y cuadráticas al refinar la malla con 15, 30, 60 y 120 volúmenes. Cada curva representa la solución en el tiempo final de 900 días.

En la figura (5.12) la curva de saturación se debe de aproximar a una función escalón, y vemos como la solución con 120 nodos es la que más se aproxima. Se ha establecido a 120 nodos como refinamiento suficiente ya que a partir de este número de nodos, las curvas se mantienen estables y solo aumenta el tiempo de ejecución del código. La curvas de saturación con movilidades lineales describen curvas mas suaves pero conforme mejora la aproximación hasta los 120 nodos la pendiente aumenta. Las curvas de presión parecen escalar con ligeros cambios en sus pendientes, mientras que las soluciones de presión con movilidad lineal prácticamente se enciman al no haber cambios.

La tendencia que se va dando en las soluciones al refinar la malla, muestra una mejoría en la aproximación, un comportamiento similar cuando se evalúan pruebas de error conociendo la solución analítica (exacta). En éste trabajo se utilizaron 60 y 120 nodos para distintas pruebas, con los que se obtuvieron resultados aceptables. Es evidente que conforme más nodos utilizemos mejores aproximaciones vamos a obtener, pero el costo computacional restringe estas opciones, más aun, con el método de Newton-Raphson el sistema de ecuaciones que se resuelve (Jacobiano) es del doble del tamaño del que se resuelve con otros métodos como IMPES. Esto se vio reflejado en las pruebas de convergencias con  $\Delta t$  cuando se duplico el número de nodos en la figura (5.11), donde la refinación de la malla compromete los pasos iterativos necesarios para la convergencia y el tiempo total requerido.

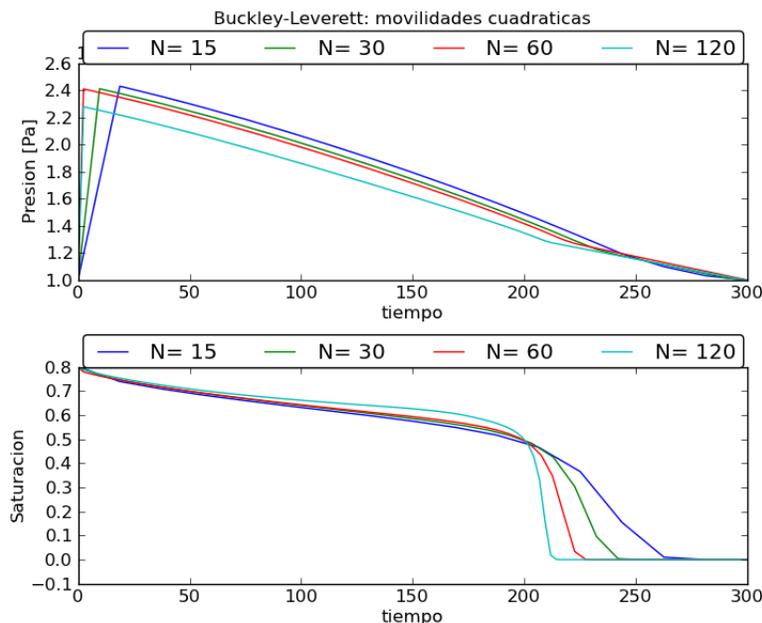


Figura 5.13: Análisis de aproximación. Modelo Buckley-Leverett con movilidades cuadráticas

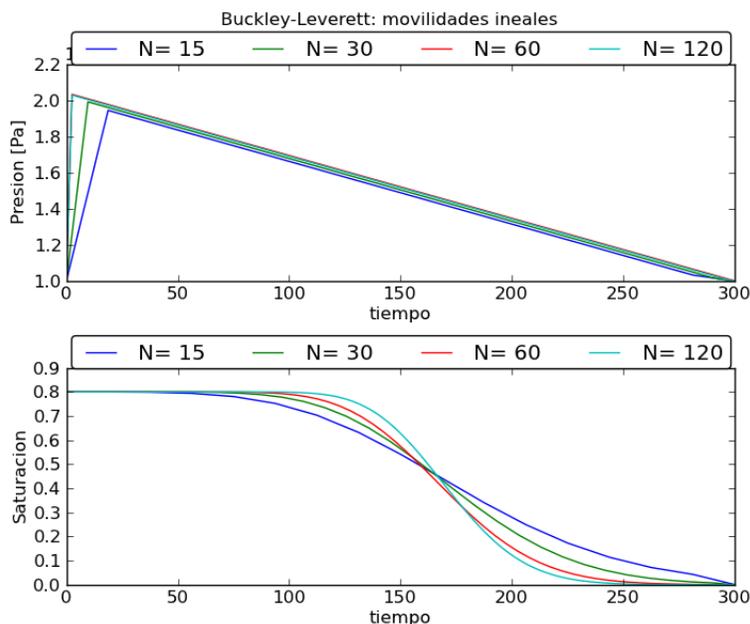


Figura 5.14: Análisis de aproximación. Modelo Buckley-Leverett con movilidades lineales

### 5.3.3. Validación y Comparación: IMPES vs Newton-Raphson

El método IMPES como sus siglas lo indican, resuelve **IMP**lícitamente la ecuación de **P**resión y **EX**plicitamente la ecuación de **S**aturación. Este método está implementado en el software TUNAM (Template Units for Numerical Applications Methods) desarrollado por el Dr. Luis Miguel De la Cruz [12], con el cual haremos la comparación de los resultados obtenidos y la validación del código de este trabajo implementado en *python*.

IMPES tiene la ventaja de resolver las ecuaciones bastante rápido comparado con el método de Newton, ya que resuelve un solo sistema de ecuaciones de la mitad del tamaño del Jacobiano de Newton, en cada avance de tiempo. Para incrementos cortos del tiempo como:  $\Delta t = 1, 2, \dots 5$ . [días], ambos métodos convergen prácticamente a la misma solución.

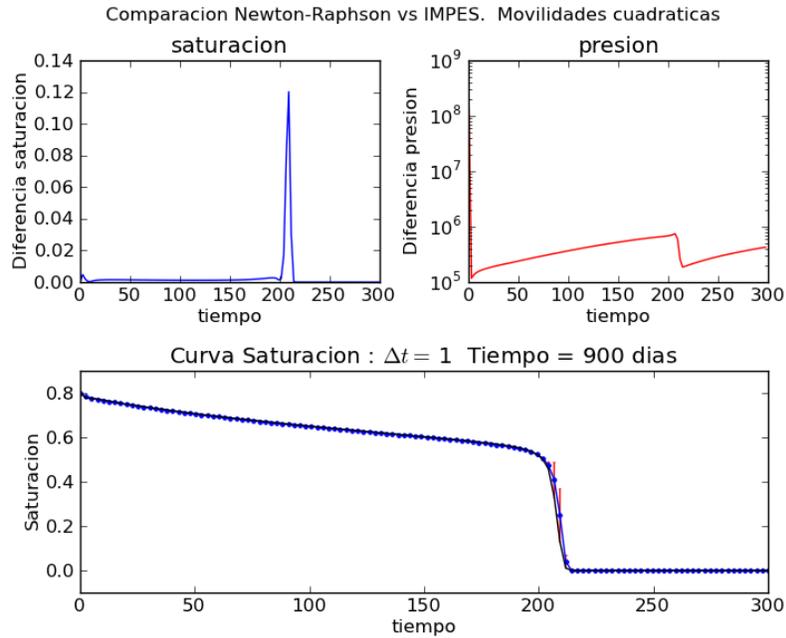


Figura 5.15: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 1$  [días]

Empezamos comparando los resultados con las movilidades cuadráticas. En la figura (5.14) se tienen en la parte superior las diferencias de las curvas de saturación y presión entre ambos métodos, en un tiempo de 900 días, debajo se tienen únicamente las curvas de saturación, ya que éstas describen gráficamente el avance de inyección de agua y el desplazamiento del aceite. Con puntos azules se distingue la solución con el método de Newton y con línea continua en negro la solución con IMPES, con una barra de error (color rojo) se indica la magnitud de la diferencia en dos direcciones (arriba y abajo). En ésta figura se tiene lo que sería la mayor similitud entre las soluciones cuando  $\Delta t = 1$  [día], hay muy poca diferencia entre las saturaciones y se da donde la curva cambia de pendiente. Entre las presiones en cambio, la diferencia se da a una escala mucho más amplia a lo largo del dominio por lo que se muestra en escala logarítmica.

Conforme se incrementan los pasos en el tiempo la diferencia aumenta, como se muestra en la figura (5.15) donde se tiene una  $\Delta t$  crítica para el método IMPES. Podemos ver como el frente de desplazamiento (curva de saturación con IMPES) se distorsiona y partir de  $\Delta t = 7$  [días] la solución diverge, figura (5.16). Mientras que la solución con el método de Newton se mantiene estable hasta  $\Delta t < 30$  [días], utilizando movilidades cuadráticas.

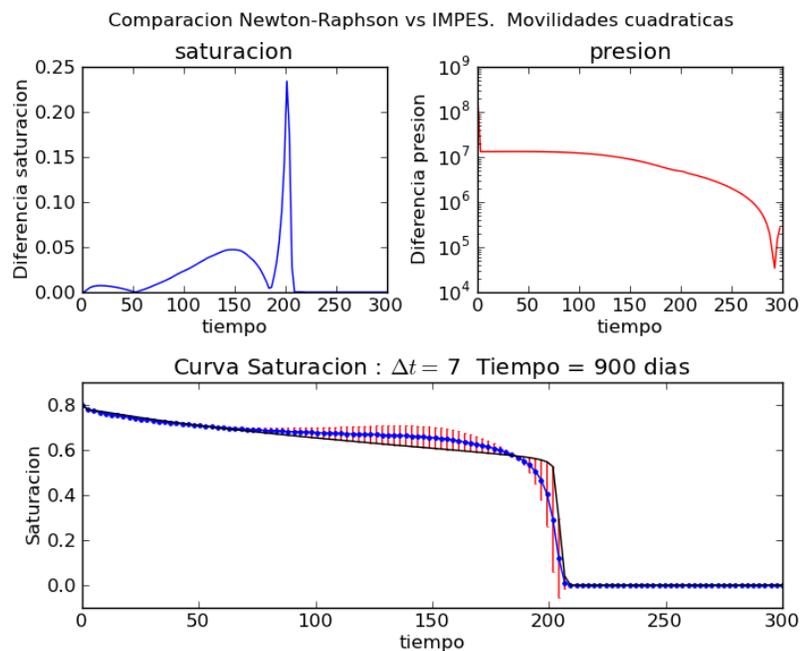


Figura 5.16: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 7$  [días]. Valor de  $\Delta t$  crítico a partir del cual IMPES diverge.

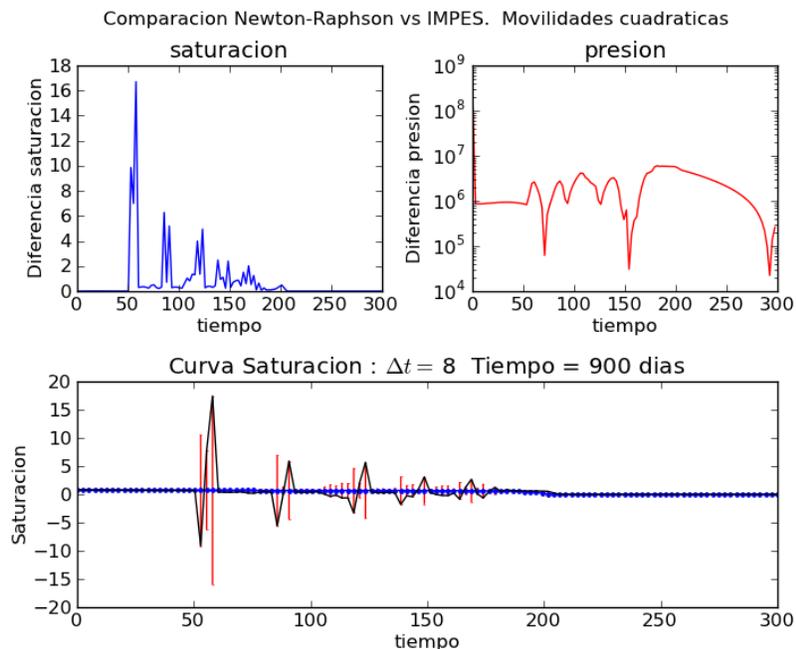


Figura 5.17: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 8$  [días]. Solución con IMPES diverge.

Con las movilidades lineales la diferencia entre presiones es una constante sobre todo del dominio, como si fuera un factor de escala lo que marca la diferencia. En la figura (5.17) tenemos la mejor similitud entre las curvas de saturación con  $\Delta t = 1$  [días], nuevamente en la zona de mayor pendiente hay mas discrepancia.

Con un incremento de tiempo en  $\Delta t = 10$  [días], la solución con IMPES marca una diferencia notable, figura (5.18). El cambio abrupto en la pendiente del frente de desplazamiento al parecer es resultado de inestabilidad numérica en la solución.

El valor critico del incremento del tiempo para el método IMPES se establece en  $\Delta t = 13$  [días], figura (5.19).

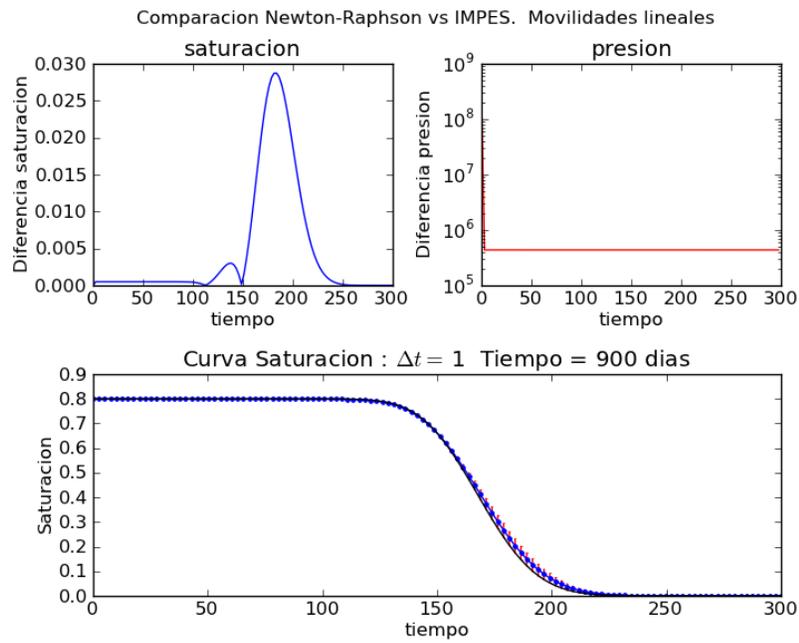


Figura 5.18: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 1$  [días].

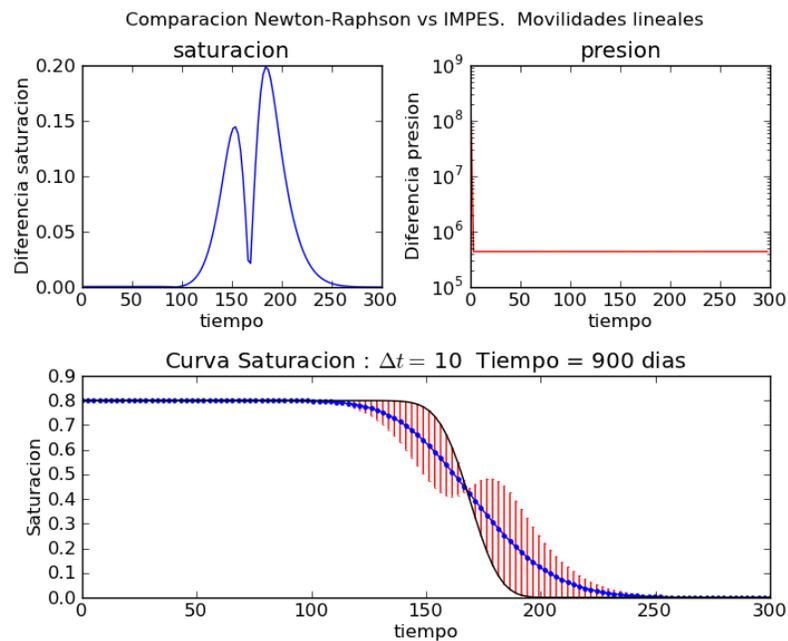


Figura 5.19: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 10$

Es notable la tendencia en el incremento de su pendiente conforme aumenta  $\Delta t$ . Lo que a mi juicio corrobora que este comportamiento es debido a cierta inestabilidad numérica del método.

Finalmente para  $\Delta t > 13$  [días], IMPES colapsa y el método de Newton-Raphson continua con una solución estable hasta un valor crítico de  $\Delta t = 70$  [días], utilizando movilidades lineales.

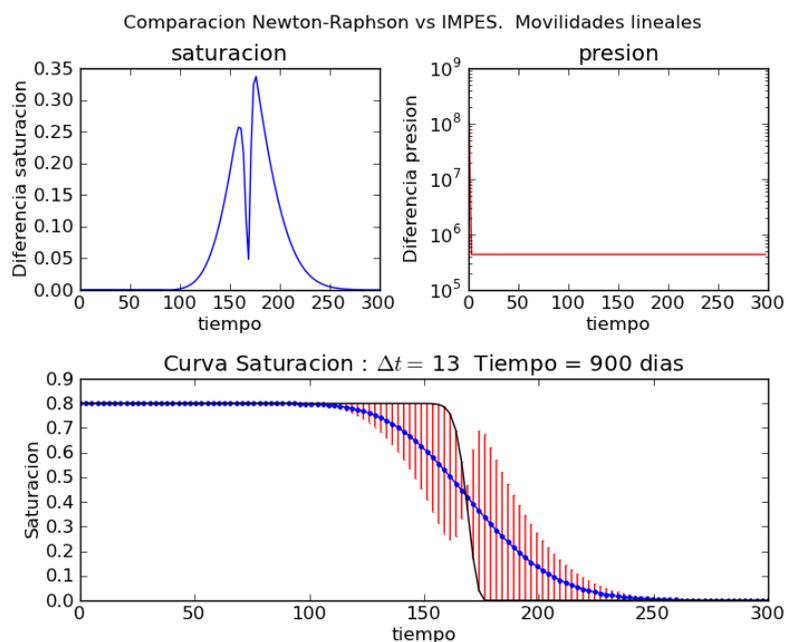


Figura 5.20: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 13$ , valor crítico de convergencia con IMPES.

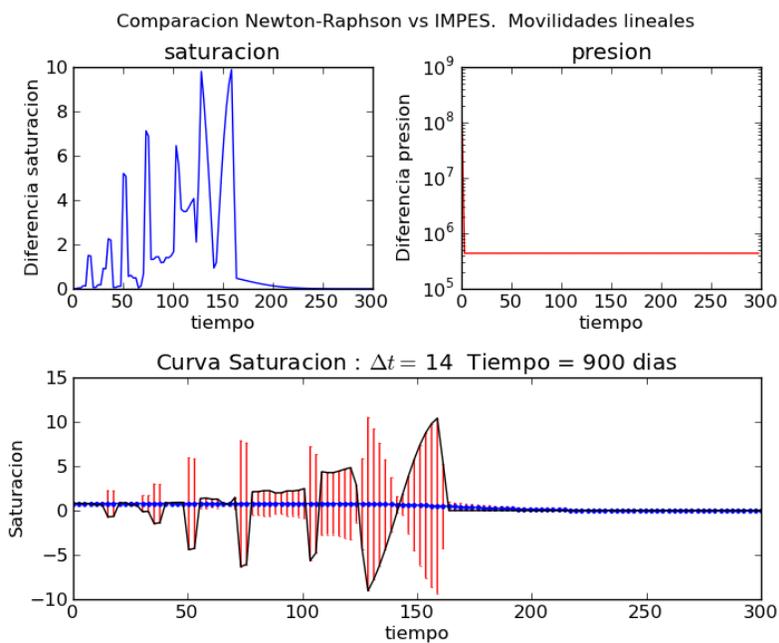


Figura 5.21: Comparación Newton-Raphson vs. IMPES :  $\Delta t = 14$ . Solución con IMPES diverge



# Capítulo 6

## Conclusiones

Las dos versiones de los modelos de flujo bifásico *Buckley-Leverett* y *Bifásico Inmiscible e Incompresible* convergen a la misma solución. El método de solución de sistemas lineales más eficiente para resolver el Jacobiano resulto ser "Quasi-Minimal Residual" **qmr**. Existe un cambio notable en la forma de las soluciones al pasar de la movilidad lineal a cuadrática, aparentemente la movilidad lineal simula un mayor desplazamiento del aceite con menor saturación residual. Cuando la movilidad es cuadrática se tiene mayor discrepancia entre las soluciones al comparar ambos modelos, con una diferencia máxima del orden de  $10e^4$  [Pa] para la presión y  $1e^{-3}$  [unidades] para la saturación, mientras que con la movilidad lineal la diferencia es mucho menor.

El análisis de convergencia con el aumento de los incrementos  $\Delta t$ , muestra gráficamente el número de iteraciones requeridas para la convergencia a distintos pasos de tiempo ( $\Delta t$ ). Con las movilidades lineales se tiene un desempeño óptimo del método de Newton, en todos los incrementos  $\Delta t$  probados, incluso se corrobora que con el modelo *Bifásico Inmiscible e Incompresible*, se tiene mejor estabilidad numérica al converger a la solución en tan solo un paso iterativo en los primeros 150 a 200 [días], cuando  $\Delta t < 10$  [días]. Con las movilidades cuadráticas se requiere de mayor número de iteraciones con mayor frecuencia conforme avanza el tiempo, éste comportamiento se agudiza con el aumento de  $\Delta t$ . Donde puede apreciarse nuevamente, mejor estabilidad numérica en el modelo que incluye la presión capilar, viéndose reflejada en un menor tiempo de ejecución del programa.

Para ambos modelos los valores críticos del incremento de tiempo ( $\Delta t$ ) establecidos son:

- $\Delta t_c = 70$  [días] ; para movilidades lineales ( $\Delta x = 5$  [m]).
- $\Delta t_c = 28$  [días] ; para movilidades cuadráticas ( $\Delta x = 5$  [m]).

Al refinar la malla con  $\Delta x = 2.5$  [m] (120 nodos), en las pruebas con movilidad cuadrática el número de iteraciones requeridas para la convergencia aumentó drásticamente y se redujo el valor crítico del incremento de tiempo a  $\Delta t_c = 10$ , mientras que las mismas pruebas con la movilidad lineal mantuvieron el mismo rendimiento. Esto simplemente nos indica que el coeficiente de movilidad cuadrática desestabiliza fuertemente la convergencia a la solución de las ecuaciones. En éstos casos, ecuaciones con una fuerte **no linealidad**, se puede tomar como recomendación utilizar incrementos de tiempo cortos ( $\Delta t$ ) y una resolución espacial moderada ( $\Delta x$ ), para garantizar la convergencia.

En la comparación con el método IMPES, resalta inmediatamente la ventaja del método de Newton al soportar incrementos de tiempo mucho mayores, con lo cual se puede avanzar mucho mas rápido en la búsqueda de la solución sobre el dominio del tiempo, compensando el tiempo requerido por el método de Newton al ejecutar un mayor número de operaciones. Además, es capaz de resolver problemas con una fuerte **no linealidad** con mayor estabilidad, si se tiene una aproximación inicial adecuada.

La extensión de los modelos resueltos a un dominio en dos o tres dimensiones no tiene mayor complicación desde un punto de vista conceptual, si se continua utilizando el método de Volumen Finito. Pero si comprometería la capacidad de cálculo consumido por el ordenador, ya que el método de Newton requiere mayores recursos de computo, principalmente en la construcción del Jacobiano que involucra la evaluación numérica de las derivadas y la solución del sistema de ecuaciones linealizado.

Por consiguiente aliento al interesado en el tema, a realizar la extensión de los modelos en dos o tres dimensiones paralelizando la construcción del Jacobiano de ser posible, que corresponde a el 36 % del tiempo total de ejecución. Esta labor podría lograrse al dividir adecuadamente la matriz del Jacobiano en submatrices (traslapadas), ya que la única dependencia de datos se da entre los nodos adyacentes. Sin entrar en detalles, por las características del algoritmo, es viable paralelizar la solución del sistema linealizado con memoria distribuida, lo que toma aproximadamente un 50 % del tiempo total. Tómese en cuenta que se ha utilizado un lenguaje de programación interpretado, por lo tanto estos porcentajes pueden variar al utilizar lenguajes de programación que requieren menos recursos, por otra parte el método de solución de sistemas lineales y las matrices construidas son herramientas de python, así que éste último porcentaje dado está sujeto a las herramientas de cómputo utilizadas.

# Apéndice A

## Discretización de una ecuación de flujo en una sola fase con el Método de Elemento Finito

Sea un espacio de funciones  $V$  tal que:

$$V = H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma} = 0\}$$

Introducimos la expresión el operador bilinear que corresponde al producto interno definido en el espacio de funciones  $V$ .

$$(\mathbf{a}\nabla p, \nabla v) = \int_{\Omega} \mathbf{a} \nabla p \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} \quad , \quad (f, v) = \int_{\Omega} f v \, d\mathbf{x} \quad (6.1)$$

Dada la ecuación diferencial de un problema de flujo monofásico, restringido a un dominio  $\Omega \subset \mathbf{R}^d$ ,  $d \geq 1$ . con frontera  $\Gamma$ , en un intervalo de tiempo  $J \in [0, T]$ ,  $T \geq 0$

$$\begin{aligned} c(p) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{a}(p) \nabla p) &= f(p) \quad ; \quad \in \Omega \times J \\ \mathbf{a}(p) \nabla p \cdot \mathbf{n} &= 0 \quad ; \quad \in \Gamma \times J \\ p(\cdot, 0) &= p_0 \quad ; \quad \in \Omega \end{aligned} \quad (6.2)$$

Considerando el caso en que  $c = \phi = 1$ , la expresión del problema (6.2) en su forma variacional: tal que, se busca  $p : J \rightarrow V_h$ .

$$\begin{aligned} \left( c(p) \frac{\partial p}{\partial t}, v \right) + (a(p) \nabla p, \nabla v) &= (f(p), v) \quad ; \quad \forall v \in V, t \in J \\ p(\mathbf{x}, 0) &= p_0(\mathbf{x}) \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \end{aligned} \quad (6.3)$$

Sea  $V_h$  un subespacio de elementos finitos de  $V$ , tal que:

$$V_h = \{v : v \text{ es continuo sobre } \Omega, v \text{ es linear en cada elemento (triangulo) } \mathbf{K} \in \mathbf{K}_h, \text{ y } v = 0 \text{ en } \Gamma\}$$

Donde  $\mathbf{K}_h$  es una partición del dominio  $\Omega$ . El método de volumen finito se formula entonces:

$$\text{Encontrar } p_h \in V_h \text{ tal que } (a \nabla p_h, \nabla v) = (f, v) \quad \forall v \in V_h.$$

$$\begin{aligned} \left( c(p_h) \frac{\partial p_h}{\partial t}, v \right) + (a(p_h) \nabla p_h, \nabla v) &= (f(p_h), v) \quad ; \quad \forall v \in V_h, t \in J \\ (p_h(\cdot, 0), v) &= (p_0, v) \quad ; \quad \forall v \in V_h \end{aligned} \quad (6.4)$$

Introducimos ahora las funciones base  $\varphi_i \in V_h$ . Denotando a los vértices de los triángulos  $\mathbf{K}_h$  por  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ , siendo estos a su vez los nodos interiores, las funciones base o funciones de *Chapeau* se definen como.

$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{Si } i = j \\ 0 & \text{Si } i \neq j \end{cases}$$

Cada  $\varphi_i$  es una función linear continua sobre el intervalo  $[0, 1]$ , tal que su valor es uno en su correspondiente  $\mathbf{x}_i$  y cero en los demás. De esta forma, cualquier función  $v \in V_h$  tiene su única representación.

$$v(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N v_i \varphi_i(\mathbf{x}), \quad 0 \leq \mathbf{x} \leq 1.$$

Por lo tanto, definiremos  $p_h$  en su versión discreta.

$$p_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N p_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times J \quad (6.5)$$

Para  $j = 1, 2, \dots, N$ , hacemos  $v = \varphi_j$  en (6.4) y sustituyendo (6.5) se tiene el sistema de ecuaciones.

$$\sum_{i=1}^N \left( c(p_i \varphi_i) \frac{dp_i \varphi_i}{dt}, \varphi_j \right) + \sum_{i=1}^N (a(p_i \varphi_i) \nabla(p_i \varphi_i), \nabla \varphi_j) = \sum_{i=1}^N (f(p_i \varphi_i), \varphi_j), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

$$\sum_{i=1}^N (\varphi_i, \varphi_j) p_i(0) = (p_0, \varphi_j), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

En notación matricial equivale a.

$$\mathbf{C}(\mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} + \mathbf{A}(\mathbf{p}) \mathbf{p}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}) \quad t \in J. \quad (6.6)$$

$$\mathbf{B} \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0$$

Es importante notar que las entradas de la matrices  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  se obtienen por la contribución de cada rectángulo  $\mathbf{K} \in \mathbf{K}_h$ , es decir.

$$\mathbf{A}(\mathbf{p}) = a_{ij} = a(p_i) (\varphi_i \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j) = \sum_{K \in \mathbf{K}_h} a^K(p_i) (\varphi_i \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j)^K$$

Donde

$$a^K(p_i) (\varphi_i \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j)^K = a^K(p_i) \int_K \varphi_i \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j \, d\bar{x}$$

Finalmente la discretización en tiempo. Dada una partición discreta de  $J$ , con  $n$  pasos en el tiempo tal que  $t^n \in J : n = 0, 1, 2, \dots, T$ , y aplicando el concepto de derivada hacia atrás.

$$\mathbf{C}(\mathbf{p}^n) \frac{\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{n-1}}{\Delta t^n} + \mathbf{A}(\mathbf{p}^n) \mathbf{p}^n = \mathbf{f}(\mathbf{p}^n)$$

$$\mathbf{B} \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0$$





# Bibliografía

- [1] I. Herrera, George F. Pinder, "*Mathematical Modeling in Science and Engineering: An Axiomatic Approach*" , Wiley, 2012.
- [2] Z. Chen, G.Huan, Y. Ma, *Computational Methods for Multiphase Flow in Porous Media*. Ed. SIAM, Dallas, Texas, 2006.
- [3] Lawrence C. Evans, *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, Berkeley, 1997.
- [4] Randall J. Leveque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, USA, 2004.
- [5] H. K. Versteeg & W. Malalasekera; *An introduction to Computational Fluid Dynamics, The finite volumen method*.
- [6] Richard L. Burden, J. Douglas Faires, *Análisis Numérico*. Thomson Learning, 7a ed.
- [7] Larry W. Lake, *Enhanced Oil Recovery*, Ed. Prentice Hall, University of Texas, 1989.
- [8] Nnaemeka Ezekwe, *Petroleum Reservoir Engineering Practice*, Ed. Prentice Hall, USA , 2010.
- [9] Turgay Ertekin, Jamal H. Abou-Kassem, Gregory R. King, *Basic Applied Reservoir Simulation*, Society of Petroleum Engineers Inc. Texas USA, 2001.
- [10] Jean Donea & Antonio Huerta, *Finite Element Methods for Flow Problems*, Ed. Wiley , Inglaterra, 2003.
- [11] <http://www.lacomunidadpetrolera.com>
- [12] L.M. de la Cruz & E. Ramos, *General Template Units for the Finite Volume Method in Box-shaped Domains*, to be published on Trans. on Mathematical Software, 2012.