

Olga Patricia Ortiz Cancino  
Wilson Antonio Cañas Marín  
Nicolás Santos Santos  
Silvia Pilar Román Vargas  
Ramiro Salazar

# ESQUEMA NUMÉRICO ALTERNO PARA LA DETERMINACIÓN DEL GRADIENTE COMPOSICIONAL ISOTÉRMICO

$$F_{NC+1} = P - \sum_{i=1}^{NC} \frac{f_i^* \exp\left(\frac{C_i}{RT} (P - P^0)\right)}{\phi_i^{EDE}(y)} = 0$$
$$F_{NC+1} = P - \sum_{i=1}^{NC} f_i^* \exp\left(\frac{C_i}{RT} (P - P^0)\right) = 0$$
$$F_{NC+1} = P - \sum_{i=1}^{NC} \frac{f_i^* \exp\left(\frac{C_i}{RT} (P - P^0)\right)}{\phi_i^{EDE}(y)} = 0$$





Olga Patricia Ortiz Casiano

## RESUMEN

En este trabajo de investigación se desarrolló un algoritmo secuencial para el cálculo del gradiente composicional isotérmico. En el desarrollo del algoritmo se extendió la aplicabilidad del método *Newton Raphson de variable mínima* (MVNR) al trazado de gradientes composicionales, y se reemplazó la ecuación de restricción explícita que

implica que la sumatoria de composiciones de la fase en equilibrio sea igual a uno, por una ecuación equivalente. Esta variación, en combinación con el método MVNR ofrece una alternativa excelente para los algoritmos de cálculo del gradiente composicional isotérmico.

El algoritmo propuesto presenta una excelente estabilidad numérica, además que disminuye notablemente el tiempo de cómputo, ya que en promedio se requieren sólo dos iteraciones por punto calculado, independiente de la cercanía a la zona de transición y al contacto gas - aceite.

A diferencia de otros algoritmos, el algoritmo propuesto no requiere de extrapoladores lineales ni cúbicos, ni es necesario realizar algún tipo de análisis de sensibilidad con el fin de mejorar las posibilidades de convergencia.

El esquema numérico fue probado en sistemas que presentan zonas de transición con contacto gas aceite (saturados) y sin contacto gas-aceite (subsaturados).

## INTRODUCCIÓN

Actualmente los hidrocarburos extraídos de los yacimientos del Piedemonte Llanero Colombiano, representan un 80% de la producción total del país; estos hidrocarburos exhiben una particularidad especial: están cercanos a su condición crítica. Esta característica, sumada a la no-idealidad de los mismos, hace que se presenten variaciones composicionales a lo largo de la columna del yacimiento, la cual puede tener cientos de pies de longitud.

Estos gradientes composicionales pueden causar variaciones en el punto de rocío hasta de 4 psi/ft (90 KPa/ m). El no tener en cuenta esta variación puede conllevar a obtener errores significativos en el cálculo del aceite original *in-situ*, lo cual a su vez puede causar errores hasta del 20% en los pronósticos de producción de estos yacimientos, además de no escogerse las estrategias de explotación y producción adecuadas, para maximizar el recobro de los fluidos del yacimiento.

El objetivo principal de este trabajo fue el desarrollo, análisis y validación de un algoritmo para el cálculo del gradiente composicional isotérmico en columnas de yacimientos hidrocarburos.

## TRABAJOS PREVIOS

La primera formulación desarrollada para tener en cuenta la variación de la composición debido al efecto del campo gravitatorio para un sistema isotérmico fue dada por Gibbs [1]. Gibbs concluyó que en el equilibrio de fases se debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$\mu_i(p^o, z^o, T) = \mu_i(p, z, T) + M_i g(h - h^o) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

Donde  $\mu_i$ , es el potencial químico del componente  $i$ ,  $z^o$  es una mezcla homogénea (una sola fase) a la presión  $p^o$  y a la profundidad de

referencia  $h^o$ ,  $p$  es la presión y  $z$  es la composición de la mezcla a la profundidad  $h$ . El sistema total está a temperatura constante ( $dT/dh=0$ ).

En 1930, Muskat [5] proporcionó la solución exacta de la ecuación (1) para la ecuación de estado del gas ideal. Los ejemplos numéricos basados en esta ecuación de estado simplificada condujeron a la conclusión engañosa de que *la gravedad tiene un efecto despreciable sobre la variación composicional en los yacimientos*.

En 1938, Sage y Lacey [6] evaluaron la ecuación (1) usando un modelo de ecuación de estado (EDE) más real. Los autores suministraron ejemplos que mostraban variaciones significativas de la composición con la profundidad en mezclas de fluidos de yacimientos. Además hicieron la observación clave que en los sistemas que se encuentran en la vecindad de la condición crítica, se deben esperar variaciones significativas de la composición con la profundidad.

Desde 1938 hasta 1980 la literatura petrolera estuvo aparentemente vacía de publicaciones que trataran con el cálculo del gradiente composicional. Sin embargo, durante este período, varias referencias hicieron mención de yacimientos que exhibían variación composicional. La mayoría de estos casos fueron citados por Schulte [7].

Schulte [7] fue el primero que resolvió la ecuación (1) utilizando una ecuación de estado cúbica (EDEC) para determinar la fugacidad de los componentes a una profundidad dada. En dicho trabajo el autor demuestra que se pueden obtener variaciones composicionales significativas en los yacimientos de petróleo, como consecuencia de la segregación gravitacional. Schulte dió ejemplos que muestran el efecto de la composición del aceite (contenido aromático) y de los coeficientes de interacción binarios usados en las reglas de mezcla de una ecuación de estado cúbica sobre los gradientes composicionales; también

comparó los gradientes calculados utilizando las ecuaciones de estado de Peng-Robinson (PR) y Soave-Redlich-Kwong (SRK).

En 1980 se reportaron gradientes composicionales significativos en el campo Brent, en el mar del Norte [7-9]. En este campo se observó un gradiente en la composición, con una transición de gas a aceite mediante un contacto gas-aceite (CGA) saturado. En estos trabajos también se describieron yacimientos que mostraban la transición de gas a aceite pero sin la presencia de un contacto saturado. En este caso, la transición ocurre a una profundidad donde el fluido del yacimiento es una mezcla crítica, con una temperatura crítica igual a la temperatura del yacimiento y una presión crítica menor que la presión del yacimiento (es decir, en un CGA subsaturado). Aparentemente la formación Statfjord en el campo Brent es un ejemplo de un yacimiento con un contacto gas-aceite subsaturado (también conocida como transición hipercrítica).

En 1983 Holt y otros [10], por su parte, presentaron una formulación del problema del gradiente composicional incluyendo la difusión térmica. Desafortunadamente, los cálculos mostrados por estos autores estuvieron limitados a sistemas binarios.

En las conferencias técnicas de la revista SPE (Society Petroleum Engineers) de 1984 y 1985 [11,12] se presentaron numerosas publicaciones sobre el tema del gradiente composicional en yacimientos de petróleo. La mayoría de estas fueron historias de casos de campo, de hecho una sesión especial de la Conferencia Técnica y Exhibición de la SPE de 1985 estuvo dedicada a este tema [13,14].

Riemens y otros [12], presentaron una evaluación interesante del gradiente composicional en el campo Birba (Omán). Basados en cálculos de equilibrio químico/gravitacional (EQG) y en mediciones de propiedades PVT (Presión-Volumen-Temperatura) de campo, mostraron que existía un gradiente composicional significativo. Los

autores también evaluaron la posibilidad de inyectar gas en la zona de aceite subsaturado, donde es posible que se desarrolle miscibilidad mediante contactos múltiples.

Montel y Gouel [16] sugirieron un algoritmo para resolver el problema del gradiente composicional isotérmico. El procedimiento no es riguroso debido a que se calcula la presión a una profundidad dada en forma explícita ( $dP = -\rho g dz$ ), en lugar de resolver la presión en forma iterativa. Finalmente, los autores sugieren que la inclusión del término de difusión térmica puede mejorar la confiabilidad de los gradientes composicionales calculados, aunque en su trabajo no la incluyen.

Metcalfé y otros [14] reportaron la variación de la composición y de las propiedades físicas de los fluidos del yacimiento Overthrust Belt (USA) en el campo Anschutz Ranch East. Estos autores usaron una EDEC para caracterizar el comportamiento PVT de los fluidos en todo el rango de muestreo. Sin embargo, en lugar de calcular la variación composicional usando el equilibrio gravitacional/químico y la EDEC desarrollada para la caracterización, ellos correlacionan la variación composicional gráficamente, basados en los datos medidos.

Creek y Schrader [13] reportaron datos de gradiente composicional para otro yacimiento ubicado en el Overthrust Belt, el Campo East Painter. Los autores presentaron una gran cantidad de datos junto con la comparación de los gradientes composicionales medidos y calculados usando un modelo de gradiente composicional isotérmico. Ellos reportaron la dificultad en ajustar la presión de saturación y la relación gas-aceite (GOR). Finalmente, indicaron que la mayoría de los yacimientos ubicados a lo largo del Overthrust Belt presentan gradientes composicionales de diferentes magnitudes.

Wheaton [17] presentó un modelo de gradiente composicional isotérmico que incluye la presión capilar. La adición de las fuerzas capilares fue aparentemente justificado en un esfuerzo por

ayudar a la iniciación de los simuladores de yacimientos. Tales simuladores utilizan las curvas de presión capilar para iniciar las distribuciones de saturación y presión en forma discreta, en la dirección vertical. Los resultados de los ejemplos calculados en el artículo de Wheaton [17] sugieren que al desprestigiar las variaciones composicionales en un yacimiento de gas condensado pueden obtenerse errores potencialmente grandes en la determinación de los hidrocarburos iniciales in-situ. Obviamente estos resultados, son en primera medida una consecuencia del hecho de no tener en cuenta la variación composicional debido al equilibrio gravitacional/químico. Cuantitativamente se podrían haber obtenido resultados similares con o sin la inclusión de las presiones capilares. Finalmente, las observaciones de Wheaton sobre el no tener en cuenta el gradiente composicional lleva a la determinación incorrecta del aceite y del gas inicial in-situ, lo cual es igualmente aplicable tanto a yacimientos de gas condensado como a yacimientos de aceite (es decir, prácticamente a cualquier yacimiento de hidrocarburos).

Whitson y Belery [18] adaptaron el algoritmo propuesto por Michelsen [19], para el cálculo de presiones de saturación, para resolver en forma **no secuencial** el gradiente composicional isotérmico, usando como modelos termodinámicos las ecuaciones de estado de Peng-Robinson y la SRK. Ellos presentan una discusión sobre el problema de las soluciones falsas (inestables) y la necesidad de aplicar análisis de estabilidad de fases para identificarlas. Finalmente, proponen un algoritmo para determinar la ubicación del contacto gas aceite (GOC, en inglés) basado en una técnica de ensayo y error.

## MÉTODO SECUENCIAL TRADICIONAL

Por método secuencial se entiende que la solución hallada a una profundidad dada se utiliza como supuesto inicial para hallar la solución a la siguiente profundidad (método de solución tipo escalera).

El método secuencial tradicional utiliza el sistema numérico representado por las siguientes ecuaciones:

$$F_i = f_i(T, P, Y_1, Y_2, \dots, Y_{c-1}) - f_i^0(T, P^0, Y_1^0, Y_2^0, \dots, Y_{c-1}^0) \exp\left(-\frac{M_i}{RT}gz\right) = 0 \quad (2)$$

y

$$\sum_{i=1}^c y_i = 1 \quad (3)$$

por lo cual se tiene un sistema de (NC + 1) ecuaciones con (NC + 1) incógnitas.

Para facilitar la solución del esquema numérico normalmente se realiza un cambio de variable el cual consiste en que si se define la variable  $Y_i$ , donde  $Y_i = y_i \cdot \sum Y_i$  que puede interpretarse como "número-mol"; de esta manera las ecuaciones (2) y (3) se pueden expresar como:

$$F_i = f_i(T, P, Y_1, Y_2, \dots, Y_N) - f_i^0(T^0, P^0, Y_1^0, Y_2^0, \dots, Y_N^0) \exp\left(-\frac{M_i}{RT}gz\right) = 0 \quad (4)$$

$$F_{N+1} = 1 - \sum_{i=1}^N Y_i \quad (5)$$

Las ecuaciones (4) y (5) representan, nuevamente, un sistema de (NC + 1) ecuaciones con (NC + 1) incógnitas ( $P, Y_1, Y_2, \dots, Y_N$ ).

## MÉTODO SECUENCIAL PROPUESTO

La mayor dificultad encontrada al intentar diseñar un algoritmo para el cálculo del gradiente composicional isotérmico se presenta en la localización del contacto gas-aceite. Aquí el número de iteraciones se incrementa debido a que el fluido exhibe condiciones cercanas a la crítica. Normalmente, la localización del contacto gas-aceite se lleva a cabo solo en una forma aproximada, ya que los algoritmos, generalmente, fallan en cercanía a esta zona.

Dada la inestabilidad numérica que presenta el esquema tradicional en la zona de transición del gradiente composicional, el objetivo

principal de la presente investigación fue el de desarrollar un esquema alternativo que permitiera mayor estabilidad numérica del algoritmo en dicha zona y que además

permitiera calcular en forma "suave" la profundidad a la cual se presenta el contacto gas-aceite, si éste existe.

El esquema numérico planteado en este trabajo consiste entonces en abandonar la ecuación de restricción (3) utilizada en forma explícita en el método tradicional y desarrollar una ecuación alternativa, pero en forma implícita.

El sistema de ecuaciones empleado en el desarrollo de este trabajo para llevar a cabo el cálculo del gradiente composicional es el siguiente:

- NC ecuaciones de igualdad de fugacidades a la profundidad de referencia y a la profundidad de cálculo, z. (Ecuación (4))

- Una ecuación de restricción, equivalente a la empleada por el método tradicional, la cual es de la siguiente forma:

$$F_{NC+1} = P - \sum_{i=1}^{NC} \frac{f_i^* \exp\left(\frac{C_i}{RT}(P - P^0)\right)}{\phi_i^{EDE}(y)} = 0 \quad (6)$$

De esta manera se tienen (NC + 1) ecuaciones en (NC + 1) incógnitas (NC composiciones y presión).

## RESULTADOS OBTENIDOS

El sistema de ecuaciones planteado, en combinación con el método Newton-Raphson de variable mínima (MVNR) para resolver tal sistema, permite el diseño de una metodología compacta para el trazado secuencial del gradiente composicional isotérmico. La metodología propuesta trabaja de manera excelente en la zona de transición, sea esta de tipo saturada (crítica) ó subsaturada (hipercrítica). Se encontró en todos los casos estudiados que era posible localizar el contacto gas-aceite de la zona de transición, sin ninguna dificultad. Además, el número de iteraciones Newton es prácticamente insensible a la cercanía al contacto gas-aceite. En ciertas ocasiones se pudo establecer que en vez de aumentar el número de iteraciones lo que ocurría era una disminución. Fue manifiesto en todos los casos analizados que el número de iteraciones Newton por cada incremento en profundidad era, en promedio, de dos y aunque el criterio de convergencia utilizado en este trabajo es que la norma euclidiana de los residuales fuera menor que  $10^{-6}$ , normalmente en dos iteraciones tal norma se redujo a valores entre  $10^{-9}$  y  $10^{-12}$ , en algunas ocasiones llegó a ser de  $10^{-14}$ . Lo anterior representa, obviamente, una excelente exactitud en la localización de las respectivas composiciones y presiones a cada nivel de profundidad.

No se encontró ninguna dificultad relacionada con el tipo de zona de transición (crítica ó hipercrítica). El número de iteraciones y la exactitud de los cálculos se mostraron insensibles a la forma de los gradientes. Es muy importante expresar que el algoritmo planteado permite utilizar un rango amplio en cuanto a tamaño de paso ( $Dh$ ) de cálculo. En las metodologías tradicionales el tamaño de paso normalmente está sujeto al número de iteraciones utilizadas en la localización del punto inmediatamente anterior, incrementando el paso si el número de iteraciones disminuye y disminuyéndolo si aumenta, la metodología planteada en esta investigación permitió trazar

los gradientes composicionales con tamaños de paso constantes hasta de 100 metros, sin variaciones sensibles en el número de iteraciones Newton.

## CONCLUSIONES

1. Se logró desarrollar un algoritmo para el cálculo secuencial del gradiente composicional isotérmico, el cual mostró unas características muy especiales, comparado con los algoritmos reportados en la literatura.
2. Se logró extender y estudiar las características de convergencia del método MVNR en el cálculo secuencial del gradiente composicional isotérmico. El cual ayudó a la eficacia de la metodología de cálculo propuesta, especialmente en la zona de transición.
3. El éxito de la metodología se fundamenta principalmente en la utilización de la ecuación  $F_{NC+1}$  propuesta, en lugar de utilizar explícitamente la restricción en la suma de composiciones de la fase incipiente, usada tradicionalmente.
4. A diferencia de otros algoritmos, se observó que la metodología propuesta no requiere de extrapoladores lineales ni cúbicos, ni es necesario realizar algún tipo de análisis de sensibilidad con el fin de incrementar las posibilidades de convergencia.

## BIBLIOGRAFÍA

1. GIBBS, J. H. The scientific papers, vol 1-thermodynamics. London: Longmans, Green & Co.
2. PENG, D.Y.; ROBINSON, D.B. A new two-constant equation of state. Ind. Eng. Chem. Fundam. Vol. 15. No. 1 (1976), p. 59-65.
3. WU, J.; PRAUSNITZ, J.M. Phase Equilibria for Systems Containing Hydrocarbons, Water, and Salt: An Extended Peng-Robinson Equation of State. Ind.Eng.Chem.Res. Vol 37(1998), p.1634-16643.

4. PENELOUX, A.; RAUZY, E.; FREZE, R. A Consistent Correlation for Redlich-Kwong-Soave Volumes. *Fluid Phase Equilibria*. (1982), 8 p.
5. MUSKAT, M. Distribution of Non-Reacting Fluids in the Gravitational Field. *Physical Review*. Vol 35 (June 1930), p. 1348-1393.
6. SAGE, B. H.; LACEY, W. N. Gravitational Concentration Gradients in Static Columns of Hydrocarbon Fluids. *Trans., AIME*. Vol 132 (1938), p. 120-131.
7. SCHULTE, A. M. Compositional Variations within a Hydrocarbon Column due to Gravity. paper SPE 9235 presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Dallas (Sept. 21-24, 1980).
8. BATH, P. G. H.; FOWLER, W. N.; RUSSEL, M. P. M. The Brent Field, A Reservoir Engineering Review. paper EUR 164 presented at the SPE European Offshore Petroleum Conference and Exhibition, London (Sept 21-24, 1980).
9. BATH, P. G. H.; VAN DER BURGH, J.; AUN YPMA, J. G. J. Enhanced Oil Recovery in North Sea, (1983)
10. HOLT, T.; LINDBERG, E.; RATKIE, S. K. The Effect of Gravity and Temperature Gradients on Methane Distribution in Oil Reservoirs. paper SPE 11761. Unsolicited (1983).
11. HIRSCHBERG, A. Role of Asphaltenes in Compositional Grading of a Reservoir's Fluid Column. *JPT*. (Jan 1988), p. 89-94
12. RIEMENS, W. G., SCHULTE, A. M.; JONG, L. N. J. Birba Field PVT Variations Along the Hydrocarbon Column and Confirmatory Field Tests. *JPT*. Vol 40.No 1(Jan 1988), p. 83-88.
13. CREEK, J. L.; SCHRADER, M. L. East Painte Reservoir: An Example of a Compositional Gradient From a Gravitational Field. paper SPE 14411 presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Las Vegas. (Sept. 22-25) 1985.
14. METCALFE, R. S.; VOGEL, J. L.; MORRIS, R. W. Compositional Gradient in the Anschutz Ranch East Field, paper SPE 14412 presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Las Vegas. (I Sept. 22-25)1985.
15. MONTEL, F.; GOUEL, P. L.. A New Lumping Scheme of Analytical Dat for Compositional Studies. paper SPE 13119 presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Houston. (Sept. 16-19) 1984.
16. MONTEL, F.; GOUEL, P. L.. Prediction of Compositional Grading in a Reservoir Fluid Column. paper SPE 14410 presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition. (Las Vegas). (Sept. 22-25) 1985.
17. WHEATON, R. J. Treatment of Variation of Composition With Depth in Gas-Condensate Reservoirs. *SPE*. (May 1991), p 239-244.
18. WHITSON, C.H.; BELERY, P. Compositional Gradients in Petroleum Reservoirs. Paper SPE 28000 (1994).
19. MICHELSEN, M.L. Saturation Point Calculations. *Fluide Phase Equilibria*. Vol.23(1985), p. 181 -192.
20. FUSSELL, D.D.; YANOSIK, J.L. An iterative sequence for phase-equilibria calculations incorporating the Redlich-Kwong equation of state. *SPE, J.*(june, 1978), p. 173-182.
21. FUSSELL, L.T. A Technique for Calculating Multiphase Equilibria. *SPE, J.* (August, 1979), p. 203 -210.
22. ———. FUSSELL, D.D. An Iterative Technique for Compositional Reservoirs Models. *SPE, J.* (August, 1979), p. 211 -220.
23. CAÑAS, W. A. Cálculo directo de envolventes de fase para fluidos tipo aceite volátil y gas condensado cercanos al punto crítico, bajo cantidades variables de nitrógeno. Tesis de Maestría. Universidad Industrial de Santander (2001).
24. HEIDEMANN, R.A.; KHALIL, A.M. "The Calculation of Critical Points". *AIChE J*, Vol. 15. No. 3(1980), p.769 - 779.

---

#### Autor:

Olga Patricia Ortiz Cancino  
 olgap.ortiz@ecopetrol.com.co

Ingeniera de petróleos próxima a obtener el título de Magister en Ingeniería Química. Miembro fundador del grupo " Modelamiento de Procesos Hidrocarburos" de la Escuela de Ingeniería de Petróleos de la Universidad Industrial de Santander. Participó en el desarrollo del proyecto de investigación " Mejoramiento de la recuperación de los yacimientos de aceite volátil y de gas condensado, mediante el estudio del comportamiento de fases de sus fluidos" fase I y II, cofinanciado por Colciencias y el ICP. Actualmente se desempeña como ingeniera de Proceso en la Coordinación de Asuntos Ambientales en el ICP.

---