



METODOLOGÍA PARA LA SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA ACUATERMÓLISIS CATALÍTICA EN PROCESOS DE INYECCIÓN DE VAPOR

Subtítulo del trabajo

Luis Miguel Salas Chía, Grupo de Recobro Mejorado (GRM)/Universidad Industrial de Santander (UIS), miguechia@gmail.com; Paola Andrea León Naranjo, Grupo de Recobro Mejorado (GRM)/Universidad Industrial de Santander (UIS), paln_2563@hotmail.com; Samuel Fernando Muñoz Navarro, Grupo de Recobro Mejorado (GRM)/Universidad Industrial de Santander (UIS), samuel@uis.edu.co; Keyner Steven Núñez Méndez, Grupo de Recobro Mejorado (GRM)/Universidad Industrial de Santander (UIS), keynersteven@hotmail.com; Adan Yovani León Bermúdez, Grupo de Recobro Mejorado (GRM)/Universidad Industrial de Santander (UIS), adanleon@uis.edu.co

Palabras claves

Acuatermólisis, Simulación Numérica, Recobro Térmico, Catálisis, Metodología

Resumen

En la actualidad, las reservas de crudo están conformadas en gran medida por crudos pesados y extrapesados, los cuales bajo condiciones convencionales se producen en bajas proporciones debido a sus condiciones de flujo y composición. La aplicación de métodos de recobro térmico agrupa las técnicas predominantes y potenciales para el desarrollo de estos campos. Existe evidencia experimental de la interacción de los fluidos inyectados con el crudo en yacimiento durante la aplicación de procesos de inyección de vapor, generando así una serie de reacciones denominadas acuatermólisis.

Hyne (1986) describió a la acuatermólisis como todo proceso químico que resulta del contacto entre el aceite pesado y el agua sin importar su fase a temperaturas entre los 200°C y 325°C, típicas de los procesos de inyección de vapor. La adición de catalizadores genera una disminución en la energía de activación necesaria para la ocurrencia de la reacción, como se ha evidenciado en estudios realizados por Hamed et al. (2014) con cambios de 69 kJ/mol a 38 kJ/mol. Basado en este efecto, es posible generar un mejoramiento in situ del crudo evidenciado en la disminución de viscosidad de aproximadamente un 72,5 % (Hong-xing et al. 2011).

El uso de la simulación numérica ha sido de gran aporte en la industria debido a que permite el análisis de los métodos de un modo más detallado por medio de los perfiles que se pueden generar. Estos cálculos son de gran ayuda en la investigación y puesta en marcha de proyectos que se desea replicar en escala de campo, por lo tanto, el establecimiento de un modelo numérico, el cual será implementado para representar un sistema físico por medio de un computador, permite obtener datos representativos y en gran medida similares a los obtenidos en el laboratorio. Teniendo en cuenta la temprana etapa de investigación de las reacciones de acuatermólisis catalítica, este artículo presenta las generalidades de las reacciones y las diferentes metodologías reportadas en la literatura para representar mediante simulación numérica el fenómeno físico químico del proceso.

En esta investigación se realiza una compilación acerca de cómo generar una representación del modelo de fluidos usados en la literatura para simular cómo la acuatermólisis toma efectos en mejorar el crudo, y también describe todos los parámetros tenidos en cuenta durante estos procesos.

Abstract

In the present, the oil reserves are constituted in a big proportion by heavy and extraheavy oil, which under normal conditions produced a minimum quantity due to the flow conditions and their composition. The application of recovery methods group the potential and predominant techniques for the develop of these fields. There is experimental evidence about the interaction of the injected fluids with the oil crude in reservoir during the application of steam injection process, generating a type of chemical reactions called aquathermolysis.

Hyne (1986) described the aquathermolysis as all the chemical process result of the contact between the heavy oil and water, no matter the phase, at high temperatures between 200°C and 250°C, typical of steam injection process. The addition of catalysts generates a decrease in activation energy necessary for the reaction occurrence, as shows studies developed by Hamedi *et al.* (2014) with changes from 69 kJ/mol to 38 kJ/mol. Based in this effect, is possible generate an oil insitu upgrading evidenced in the viscosity decrease approximately 72,5% (Hong-xing *et al.* 2011).

The use of numerical simulation have been a great contribution in the industry due to the possibility for analyzing the methods in a detailed way by the profiles generated. This calculus are helpful in the research and start up of projects that wants to be reply at field scale, for that reason, the establishment of a numerical model, which will be implemented for representing a physical system by a computer, offers get representative and similar data of those obtained at lab. Taking into account the early stage of investigation about catalytic aquathermolysis, this paper presents the generalities of the reactions and different methodologies reported in the literature for representing by numerical simulation the physical chemical phenomena about the process.

In this research, we developed a compilation about how to generate a fluid model representation used in the literature for simulating how the catalytic aquathermolysis take place in upgrading the crude, and also describe which are the parameters that was take into account during this processes.

Introducción

En el presente trabajo se presenta una breve explicación de la inyección de fluidos calientes como métodos de recobro térmicos (Inyección Continua de Vapor (SD), Inyección cíclica de Vapor (CSI) y la Combustión In-Situ) los cuales han sido una técnica ampliamente empleada en los campos petroleros a nivel mundial. A su vez se describe el término acuatermolísis acuñado por Hyne (1986) a todo el proceso químico que resulta del contacto de aceite pesado o arenas petrolíferas con agua a altas temperaturas, sin importar su fase. A través del avance en las investigaciones se ha buscado replicar por medio de la simulación numérica como es el comportamiento de este proceso que, junto con la adición de compuestos químicos, como lo son los catalizadores, permiten obtener un mejoramiento del crudo. En el presente trabajo se plasman como ha sido la implementación de la simulación numérica permitiendo conocer cuáles han sido las metodologías de estas técnicas utilizadas en la literatura para reproducir la transformación del hidrocarburo por medio de la adición de catalizadores y técnica de inyección de vapor. Como resultado de esta investigación se pudo obtener una guía en la implementación de la simulación numérica de estos procesos, estableciendo una serie de secuencias importantes que fueron identificadas.

Inyección de Vapor

La inyección de fluidos calientes como agua en estado de vapor saturado ha sido una técnica implementada en gran medida en los campos petroleros desde los años 1930 (León Naranjo & Bernal Correa, 2015), al igual que lo ha sido su estudio e investigación. La energía que es suministrada a través del vapor se va dispersando en su camino hasta el yacimiento quedándose en las tuberías y las formaciones adyacentes a la formación objetivo, pero una vez alcanza la formación mediante el calentamiento de la matriz y el contacto con el crudo, se da lugar a la presencia de mecanismos de recuperación físicos. Como se puede apreciar en el gráfico (Fig.1), estos mecanismos permiten que el porcentaje de recobro del aceite en el yacimiento aumente teniendo en cuenta la variación de la temperatura, se puede apreciar que los mecanismos que tienen mayor efecto son la reducción de viscosidad del crudo, la destilación de vapor en fracciones livianas y la expansión térmica de la roca y los fluidos.

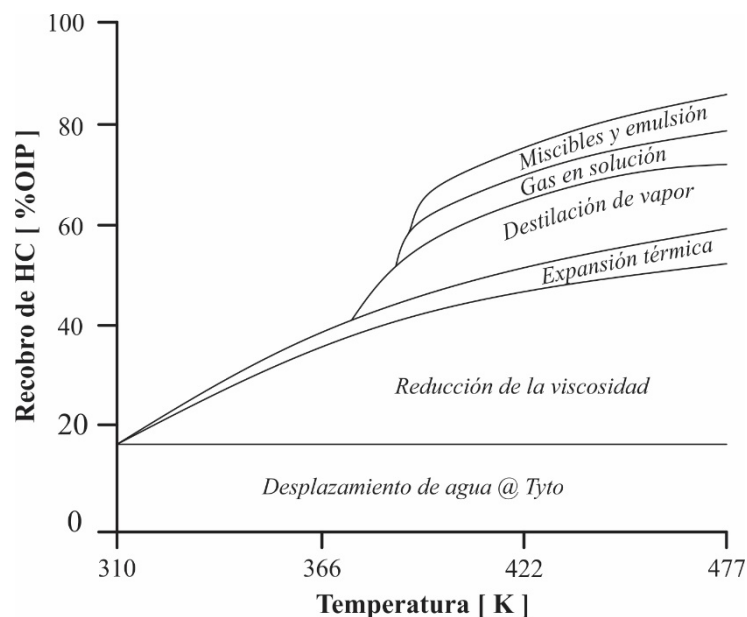


Fig. 1 – Mecanismos de recuperación física en procesos de inyección de vapor. Modificado de Suhag *et al.*, (2017)

Según Stosur *et al.*, (2003), la inyección de vapor es uno de los métodos de recobros térmicos catalogados como métodos de recobro mejorado (EOR), generando cambios en la interacción roca/fluido y la interacción de las fuerzas viscosas y capilares. Este método de recobro presenta dos modalidades principales y ampliamente utilizadas en campos a nivel mundial, la inyección cíclica y continua de vapor.

Inyección Cíclica de Vapor (CSS)

Técnica en la cual el pozo tiene dos funciones, ser inyector del vapor hacia yacimiento y ser productor del crudo que ha sido contactado por el mismo, generando una mayor producción en las zonas aledañas de la cara del pozo. Este método se caracteriza por tener tres etapas diferenciadas, la primera es la *inyección* donde se introduce vapor a la formación permitiendo el contacto con el crudo en yacimiento cercano al pozo, la segunda es el *remojó* en la cual se cesa la inyección permitiendo que el vapor interactúe con el crudo de las inmediaciones generando un mejoramiento del mismo y la tercera es la *producción* donde se abre el pozo a flujo permitiendo que el crudo con mejores propiedades alcance la cara de pozo.

Los tiempos de cada etapa varían entre pozos, dependiendo de las propiedades del crudo y del yacimiento, aunque se presentan unos tiempos típicos encontrados en literatura donde la inyección se

da por unas semanas tomando en cuenta el caudal e inyectabilidad que presente la formación, el remojo puede tardar días considerando que la energía generada por el vapor pueda realizar su efecto, y la producción puede manejar lapsos de meses hasta que la producción alcance la línea de producción primaria, procediendo a realizar otra vez el ciclo (inyección/remojo/producción) sucesivamente hasta que la viabilidad técnica y financiera se mantengan.

Inyección Continua de Vapor (SF)

Consiste en la inyección de vapor saturado generado en superficie de manera continua por medio de un pozo inyector hacia el yacimiento con el objetivo de calentar la matriz de la roca. Por medio de la interacción del crudo con el vapor se presentan una serie de mecanismos de recuperación los cuales dan lugar a un mejoramiento de las propiedades del crudo, generando un aumento de la producción hacia el pozo productor. Debido al tiempo de implementación y la distancia que recorre el vapor en yacimiento se genera una variación de la temperatura en yacimiento dando lugar a la aparición de zonas diferenciadas en el mismo. La *zona de vapor* es aquella que se genera en las inmediaciones al pozo por donde se inyecta el vapor hacia el yacimiento, la segunda es la *zona de volátiles* la cual se genera debido al choque térmico generado por la inyección permitiendo que las fracciones livianas de hidrocarburos se vaporicen creando este frente, la tercera es la *zona de condensados* en donde los volátiles al atravesar el yacimiento el cual tiene una menor temperatura se enfrían volviendo a su estado líquido y por ultima se encuentra la *zona inalterada* la cual es aquella parte del yacimiento que no ha sido afectada por la inyección de vapor.

Mecanismos de recuperación químicos

A través del avance en las investigaciones realizadas en torno a los procesos de inyección de vapor y el desarrollo de tecnologías, los estudios no solo se enfocaron en los mecanismos físicos que se producían en los procesos de inyección de vapor (Fig. 1), sino también empezaron a indagar los cambios químicos que ocurrían durante la implementación del método de recobro. Han observado que durante la inyección de agua a altas temperaturas, en el momento del contacto con el aceite que se encuentra en yacimiento, se desencadena una interacción que genera unos cambios en las propiedades químicas del crudo, los cuales han sido tema de investigación durante los últimos años.

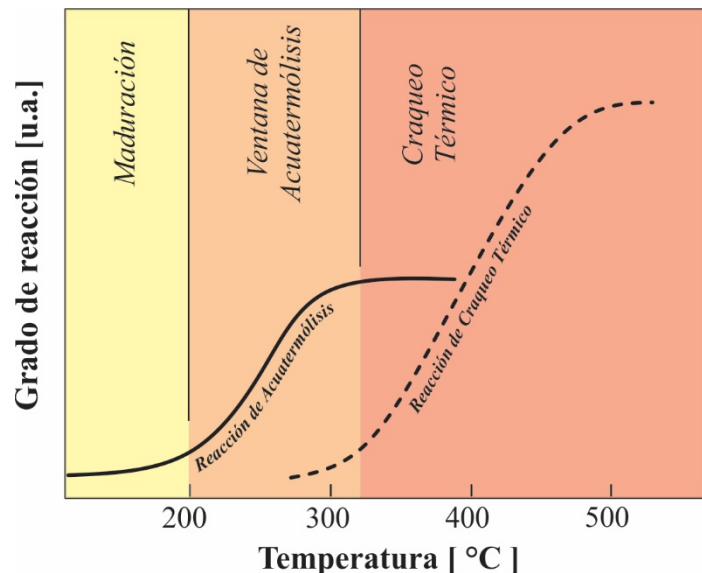
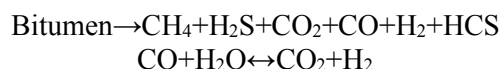


Fig. 2 – Reacciones que ocurren en yacimiento bajo ciertos escenarios. Modificado de Hyne, (1986)

En el yacimiento se puede presentar diversos escenarios en los cuales la temperatura varía, por esta razón Hyne, (1986) propuso un análisis donde tuvo en cuenta el grado en que se presenta las reacciones de acuerdo a la temperatura. En la gráfica (Fig. 2) se aprecia que ocurren dos tipos principales de reacción en yacimiento, la de acuatermolisis (línea continua) y la de craqueo térmico (línea punteada). A su vez se observa tres escenarios mirando ciertos rangos de temperatura, generados a partir de valores típicos de los diferentes procesos de recuperación térmica. La *maduración* se asemeja al estado en el cual se encuentra el yacimiento en un inicio, sin haberse aplicado un método de recobro térmico, en cuanto a las reacciones en estos rangos de temperatura no se generan en un grado considerable. La *ventana de acuatermolisis* está comprendida en el rango de temperatura donde la reacción de acuatermolisis toma fuerza, se asocia a un escenario típico de la inyección de vapor. La zona de *craqueo térmico* posee altos rangos de temperatura generando así la zona donde se presenta mayor reactividad del crudo, estas condiciones se genera típicamente bajo procesos de combustión in-situ.

Acuatermolisis

Es un término acuñado por Hyne, (1986) a todo el proceso químico que resulta del contacto de aceite pesado o arenas petrolíferas con agua a altas temperaturas, sin importar su fase. Se encuentra comprendido en el rango de temperatura con valores alrededor de los 200°C - 325°C. Propone el esquema de reacciones teniendo en cuenta su estudio sobre acuatermolisis, donde se aprecia que el bitumen o crudo pesado en yacimiento con la energía suministrada por el vapor inyectado y la mineralogía presente es transformado en metano (CH₄), ácido sulfhídrico (H₂S), dióxido de carbono (CO₂), monóxido de carbono (CO), hidrógeno (H₂) e hidrocarburos de menor peso molecular (HCS). A su vez propone la existencia de una reacción reversible en donde el CO y H₂S se convierten en CO₂ y H₂ y de manera inversa, la cual presenta como reacciones de *Water Gas Shift (WGS)*



Estos esquemas de reacción se diferencian de los de craqueo térmico, en primera medida por las temperaturas en las cuales se desarrollan, debido a que los valores alcanzados por la acuatermolisis no generan una activación en gran medida de la reactividad del crudo, de esta forma los enlaces que eran rotos eran sencillos, dejando así a los enlaces fuertes intactos. A su vez se puede identificar por la cantidad de fase líquida convertida, como se aprecia en la gráfica (Fig. 3) donde se tiene en cuenta la temperatura. La región de acuatermolisis posee una menor conversión de la fase líquida que el craqueo térmico. La primera solo genera conversión de fase líquida a líquida y en una pequeña cantidad a fase gaseosa, en cambio la segunda presenta una conversión a fase gaseosa en gran medida como también la aparición de fase sólida representada en coque.

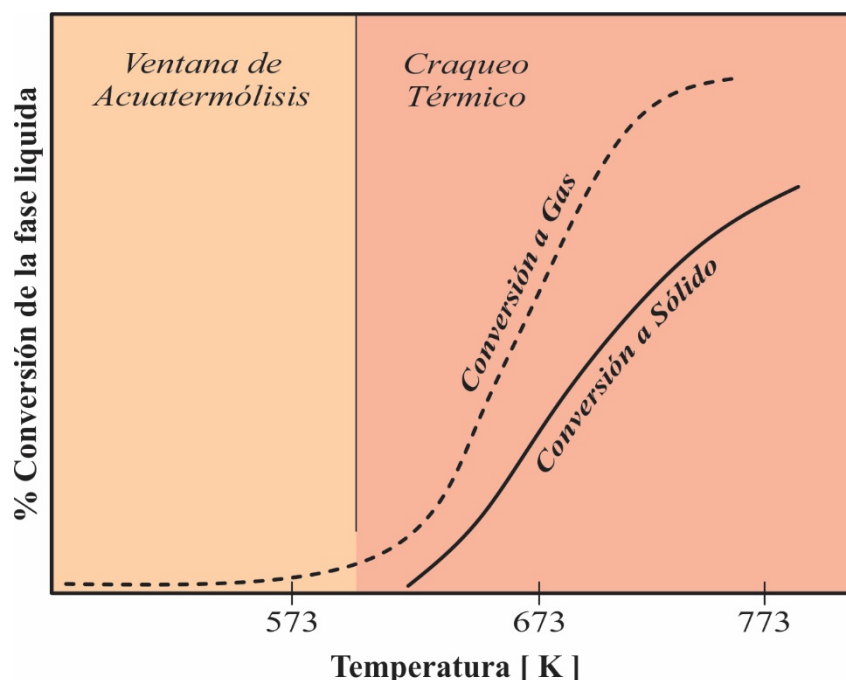


Fig. 3 – Conversión de fases teniendo en cuenta la temperatura. Modificado de Hyne, (1986)

Acuatermólisis Catalítica

El uso de un catalizador en una reacción tiene como finalidad disminuir la energía de activación y acelerar la ocurrencia de las mismas, con el objetivo de alcanzar un resultado similar en tiempos más cortos y con menores requerimientos energéticos. La acuatermólisis catalítica, es aquel proceso que se presenta con la adición de un catalizador a la reacción de acuatermólisis logrando así la aparición de efectos adicionales que contribuyen en un mayor cambio de las propiedades del crudo. Wang *et al.*, (2010) a través de sus estudios presenta que al adicionar un catalizador a la reacción se generan efectos adicionales por la aparición de procesos de pirólisis, isomerización, apertura de anillos, oxigenación, alcoholización, esterificación y despolimerización, efectos que en conjunto con la acuatermólisis permiten obtener una reducción permanente en la viscosidad del crudo.

Diversos catalizadores han sido utilizados en la industria y a su vez han sido clasificados de diversas maneras por algunos autores, un ejemplo de estos es Chao *et al.*, (2012) quienes los clasifican en: catalizadores minerales, catalizadores dispersos, catalizadores solubles en aceite y catalizadores solubles en agua. Su uso puede generar en la acuatermólisis la reducción en sus niveles de energía de activación, como lo pudo observar Hamedi *et al.*, (2014) con una reducción desde 69 a 38 kJ/mol al utilizar nanopartículas de níquel. También se ha evidenciado que el uso de catalizador aumenta el factor de recobro entre diversos rangos, por ejemplo: 46% (Franco *et al.* 2016). En cuanto al porcentaje de reducción de viscosidad se puede encontrar que se han alcanzado valores de 72,5% (XU *et al.* 2011) y 80.4% (Riviera *et al.* 2014)

El mejoramiento del crudo se puede evidenciar en los cambios generados en la viscosidad de forma permanente, donde se aprecia que la curva de viscosidad contra temperatura se traslada hacia abajo, obteniendo una mejor calidad de hidrocarburo. El obtener un fluido con una tendencia a fluir de manera más fácil a través del yacimiento, permite que la producción del mismo sea más sencilla permitiendo de esta manera que los costos asociados a su extracción.

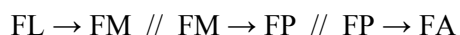
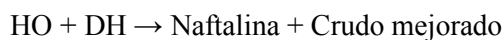
Simulación Numérica de Proceso de Mejoramiento

La implementación de la simulación numérica con el fin de representar la inyección de un catalizador en un proceso de inyección de vapor ha sido planteada por algunos autores, los cuales establecen la creación de un modelo que obtenga resultados similares a los obtenidos en las pruebas experimentales plasmadas en la literatura. A continuación, se pueden apreciar unas investigaciones acerca de cómo representar el mejoramiento del crudo mediante las implementaciones de compuestos químicos y otras técnicas.

Mejoramiento de crudo pesado mediante donante de hidrógeno

Ovalles *et al.*, (2001, 2008) realizaron una investigación con el objetivo principal de incrementar la calidad del crudo pesado (HO) por medio de reacciones al adicionar tetralina como donador de hidrógeno (DH) y metano (CH₄), teniendo en cuenta la mineralogía de la formación. En primera medida, ejecutaron una simulación física de proceso a una escala de laboratorio, para la cual emplearon un mecanismo de inyección continua de vapor con el fin de evaluar el efecto alcanzado. Las variables operacionales que variaron fueron la temperatura entre un rango de 280°C a 315°C y un tiempo de residencia entre 24 horas y 64 horas, obteniendo un mejoramiento del crudo de 9° API a 11,9° API.

Consecuentemente, los autores plantearon un modelo cinético de fluidos teniendo en cuenta la separación de los asfaltenos (AS) de la solución, y la parte restante fue particionada por medio de un análisis termo-gravimétrico en fracciones livianas (FL), medianas (FM) y pesadas (FP). El proceso simulado (CSS) presentaba condiciones operacionales de 2500 bbl/d de inyección, relación 1:1 de tetralina y vapor con una calidad del 75%, y tiempos de 10 días de inyección y 20 de remojo.



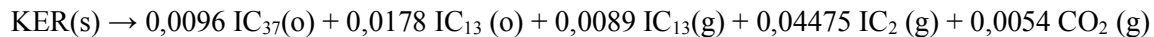
Ovalles *et al.* (2001, 2008) representando el efecto del mejoramiento del crudo, obtuvieron una calidad de 11,8° API por medio de la simulación, teniendo así un buen ajuste con los datos del modelo físico, logrando generar una representación adecuada del proceso de inyección de vapor con donador de hidrógeno.

Mejoramiento de oil shale mediante calentadores de fondo

Fan *et al.* (2010) situaron su estudio en formular un marco de referencia termoquímico para la simulación de un proceso de mejoramiento *in-situ* basándose en la formulación de reacciones cinéticas fuertemente dependientes de la temperatura, flujos y transporte composicional y un modelo para la introducción de calor por medio de calentadores en fondo. Por medio de un análisis de la literatura encontraron datos del kerógeno y descomposición del mismo tomados por mediciones de pirólisis realizadas a la muestra del proyecto Mahogany Demonstration Project-South (MDP-S). Los parámetros operacionales evaluados a través de la simulación fue la temperatura entre 588,7 K y 644,3 K y el espaciamiento entre los calentadores entre 8 ft a 20 ft a su vez como el patrón de pozo en forma de hexágono, triángulo y cuadrado.

Los autores basaron su modelo de fluidos en el estudio encontrado en la literatura el cual indicó que se identificaron 31 componentes (22 especies de crudo y 9 especies de gases). Seleccionaron las 4 especies de gases y las 11 especies de crudo más abundantes, planteando que el kerógeno se descompone en una serie de productos los cuales son componentes asociados, realizando la unión de

estas especies por medio de agrupación de estableciendo su modelo con 3 pseudocomponentes de hidrocarburo, crudo pesado (IC37), crudo liviano (IC13) y crudo gaseoso (IC2) y dos gases (N2 CO2). La temperatura manejada fue de 294,2 K 101 psi de presión y contenido de kerógeno de 1,3 mol/ft3, empleando calentadores de fondo para generar el mejoramiento del crudo.

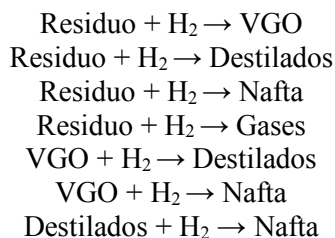


El modelo químico cinético empleado se fundamenta en las leyes de ratas de reacción en términos de la concentración de cada componente en cada fase. Involucró en su simulación el modelado de cinéticas químicas, equilibrio de fase entre gas y líquidos, transporte de masa y conducción de calor. También introdujo la fase mineral en el módulo cinético para simular la descomposición del kerógeno, el cual es considerado como una mezcla multi-componente que contiene gases no condensables, hidrocarburos, agua y compuestos sólidos. Por medio de la simulación lograron un ajuste con un error del 5% al MDP-S validando el modelo construido.

Mejoramiento de crudo pesado mediante catalizador

Chavez *et al.*, (2016) estudiaron el comportamiento del mejoramiento del crudo atrapado en la matriz de los yacimientos naturalmente fracturado inyectando un fluido caliente, un nano catalizador ultra disperso en suspensión e hidrógeno, permitiendo el mejoramiento de crudo sin producción de coque. Realizaron pruebas experimentales teniendo variación en la litología y la temperatura de la zona de reacción, con valores de 320°C y 350°C por medio de una prueba de desplazamiento asemejando un yacimiento naturalmente fracturado. Se obtuvo mejoramientos considerables en las viscosidades del crudo en valores de 4000 cP a 250 cP y un incremento de 8° API a 16° API.

Los autores basaron su modelo de fluidos en el realizado por Larter *et al.*, (2007), el cual, por medio de un estudio obtuvieron un análisis composicional del crudo estudiado, el cual agruparon teniendo en cuenta las cadenas de carbono de los compuestos, obteniendo cinco pseudocomponentes los cuales son gases (C1-C4), nafta (C5-C12), destilados (C13-C20), vacumm gas oil (VGO) (C21-C44) y vacumm residue (VR) (C21-C44).



El esquema de reacción planteado para la simulación permitió obtener un buen ajuste con los resultados experimentales teniendo en cuenta los parámetros cinéticos utilizados en la simulación, permitiendo mostrar el mejoramiento que implicó la aplicación de la técnica.

Mejoramiento de crudo pesado mediante reacciones de acuatermólisis

Shijun *et al.*, (2017) realizaron un estudio en el cual resolvieron el problema de la simulación de la acuatermólisis por medio de un modelo de fluidos en donde el crudo pesado es dividido en pseudocomponentes y la reacción de acuatermólisis es representada mediante la transformación de estos en fracciones más livianas, teniendo en cuenta los factores pre exponenciales y energías de activación, para determinar el grado y orden de reacción. La prueba experimental en la cual por medio

de una autoclave se sometió a 240°C por 30 horas un crudo con agua destilada para conocer el efecto que tenía este proceso en sus propiedades.

Los autores basaron su modelo de fluidos en el análisis de las fracciones SARA de la muestra antes y después del experimento, donde pudo apreciar que las fracciones de resinas y asfaltenos fueron las que más se desintegraron, concluyendo que en el esquema de reacción, las resinas y asfaltenos se descomponen parcialmente en aromáticos, saturados, hidrógeno (H₂), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), ácido sulfhídrico (H₂S), y metano (CH₄) y gas de alto peso molecular (HMWG). Su modelo de simulación está compuesto por una malla corner point (27x32x30) con porosidad promedio del 28,1%, permeabilidad de 2656 mD, una temperatura de 13°C, presión de 370 psi y saturación de aceite del 70%

Resinas → Saturados // Resinas → Aromáticos // Resinas → H₂ // Resinas → CH₄
Resinas → CO // Resinas → CO₂ // Resinas → H₂S // Resinas → HMWG

Asfaltenos → Saturados // Asfaltenos → Aromáticos // Asfaltenos → H₂ // Asfaltenos → CH₄
Asfaltenos → CO // Asfaltenos → CO₂ // Asfaltenos → H₂S // Asfaltenos → HMWG

Por medio del esquema planteado anteriormente, Shijun *et al.* (2017) pudieron representar los cambios composicionales en el crudo por medio de la simulación numérica generando un cambio en las curvas de viscosidad de crudo de manera permanente.

Resultados de las investigaciones

Tabla 1 – Compilación de Parámetros por Revisión Bibliográfica					
Autor	Parámetros Analizados				
	Muestra	Base	Malla	Modelo de fluidos	Catalizador
Ovalles <i>et al.</i>	Hamaca	Experimental	Circular	Destilación simulada	Tetralin
Fan <i>et al.</i>	Green River	Literatura	Circular	Compuestos de Pirólisis	Minerales
Chavez <i>et al.</i>	Golfo de México	Experimental	Cartesiana	Componentes agrupados	Trimetálico
Shijun <i>et al.</i>	Crudo pesado	Experimental	Corner Point	SARA	-

Metodología para la Simulación Numérica de la Acuatermólisis Catalítica

Tomando en consideración los estudios analizados, se ha podido evidenciar una estructura que permite establecer un proceso metodológico para poder determinar el efecto mejoramiento del crudo a través del uso de la simulación numérica. Este procedimiento puede instaurarse por medio de un método de 5 partes como se puede apreciar en la gráfica (Fig. 5)

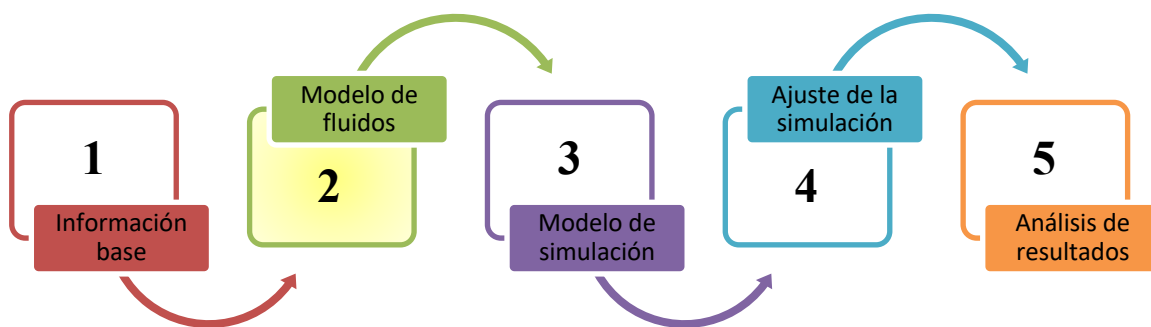


Fig. 5 – Metodología para la simulación numérica.

Información Base

Partiendo de la necesidad de tener una información inicial a partir de la cual se replicará el proceso o técnica evaluada por medio de la simulación, es necesario conocer cuáles son las formas de obtener dichos datos. Existen dos formas principales de obtenerlas, por medio de una ejecución de pruebas experimentales o por revisión de las investigaciones encontradas en literatura.

En una prueba experimental, se emplea un equipo en el cual es posible realizar la reacción, como lo son reactores, autoclaves, tubos de reacción, entre otros. En el equipo es dispuesto el crudo al cual se le adiciona los diferentes componentes que permitirán evaluar como los parámetros operacionales influyen en el cambio de las propiedades del crudo. Una vez realizado el experimento se procede a realizar la caracterización del crudo antes y después de la reacción, posibilitando el análisis de los resultados obtenidos. Existen diversas técnicas de caracterización como lo son mediciones de viscosidad, fracciones SARA, composición elemental, destilación simulada entre otros.

La búsqueda en la literatura de trabajos previos realizados es otra manera de recolectar la información básica necesaria, ya que permite conocer cuáles han sido las investigaciones realizadas con anterioridad manejando el crudo estudiado y cómo han realizado el estudio de caracterización de estos. La desventaja con esta técnica es que la información que se encuentra es muy limitada o no es la requerida por la investigación.

A su vez para establecer los modelos de simulación, se debe tener en cuenta la geometría a emplear en la malla, estos datos pueden ser obtenidos mediante la revisión de la geografía y geología del modelo estático. Las dimensiones a utilizar se deben determinar mediante sensibilización, teniendo en cuenta el objetivo de la simulación y los tiempos de cómputo que estas pueden generar.

Modelo de fluidos

Se refiere a la división del crudo en una serie de grupos para establecer la metodología necesaria en la representación del mejoramiento del mismo. Ésta puede realizarse teniendo en cuenta diversas técnicas de caracterización del crudo y por medio de la similitud en sus características puede agruparse. Algunas de éstos procedimientos son el agrupamiento de componentes por destilación simulada, y las fracciones SARA. Este proceso es de gran importancia, debido a que una buena caracterización del crudo y su posterior partición en fracciones o pseudocomponentes, puede establecer la representación del mejoramiento de la muestra con mayor precisión, generando que la cinética de la reacción se pueda representar en mejor proporción, debido a que no se puede configurar de manera directa el efecto catalítico de los componentes químicos agregados, sino se debe tratar de representar mediante los cambios que sufre en crudo durante la reacción.

El agrupamiento de componentes tiene en cuenta una previa caracterización del crudo a manera composicional por medio del número de carbonos que posee el arreglo. Esta caracterización se puede realizar por medio de una prueba de destilación simulada, la cual emplea cromatografía la cual separa los hidrocarburos en orden de punto de ebullición. Teniendo en cuenta la caracterización composicional del crudo, se pueden agrupar componentes asociándolos a un rango de temperatura de ebullición el cual se puede determinar por la destilación simulada. A este tipo de caracterización también se le conoce con el nombre de *lumping*.

Las fracciones SARA son una división del crudo en los componentes saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos presentes en la muestra. Esta caracterización arroja un valor en porcentaje en peso de la cantidad de dichos compuestos, con lo cual se puede determinar el grado de madurez y si el hidrocarburo presenta problemas de depositación de parafinas o asfaltenos.

Modelo de simulación

Es la representación numérica del yacimiento analizado o modelo físico ejecutado, en un arreglo donde se tienen en cuenta las propiedades y parámetros inherentes a estos. Se debe realizar un buen modelo numérica para así obtener resultados representativos de la simulación ejecutada.

En un yacimiento se debe tener en cuenta variables petrofísicas como lo son permeabilidades, porosidades, saturaciones, a su vez como presiones, temperaturas, espesores y estratificaciones. De igual manera se debe tener en cuenta los fluidos presentes y cómo es su comportamiento como lo son la curva de viscosidad con respecto a la temperatura. La malla puede ser de tipo cilíndrica, si se desea observar el comportamiento cercano al pozo; cartesiana si el interés se centra en cómo se comporta un área del yacimiento y no solo las cercanías del pozo y full field es utilizada con aras de generar una representación más eficiente del yacimiento, teniendo en cuenta las heterogeneidades del mismo.

En la representación mediante simulación de una prueba de laboratorio se debe tener en cuenta las dimensiones del instrumento utilizado para la reacción, las propiedades de los fluidos presentes y las condiciones operacionales a las cuales se realizaron las pruebas en laboratorio.

Ajuste de simulación

Con el objetivo de generar una similitud entre los valores obtenidos por la simulación numérica con los resultados de las pruebas o la literatura, se procede con el ajuste de ciertas variables de entrada y operacionales para hacer el respectivo acople, como lo son históricos de producción, curvas de pruebas PVT, datos generados por correlaciones, entre otros. Se debe tener en cuenta que los valores que se cambien sean datos representativos con los de la realidad, ya que de esta manera se hace que el modelo numérico sea característico de la situación a replicar.

Análisis de resultados

Este es la etapa en la cual se tiene en cuenta los resultados obtenidos por medio de la simulación y sus respectivos ajustes, alcanzando así el objetivo inicial por el cual fue establecida la simulación. Aquí se establece el porcentaje de ajuste y error entre los resultados evaluando la efectividad de la simulación en la representación de los fenómenos de las reacciones.

Conclusiones

Por medio de esta investigación se pudo observar los estudios realizados en la literatura acerca de la representación por medio de simulación numérica del mejoramiento de hidrocarburos mediante el empleo de compuestos químicos o tratamientos dispuestos para tal fin. De lo anterior se pueden resaltar las siguientes conclusiones:

- El entendimiento de las reacciones de acuatermolisis permite destacar a este proceso como un mecanismo químico asociado a la técnica de inyección de vapor mediante la cual se aprecia la producción de gases ácidos e hidrocarburos de menor peso molecular, posibilitando así el mejoramiento del crudo en yacimiento al adicionar compuestos químicos.
- El uso de catalizadores genera un aumento en la eficiencia de la reacción, instaurando un ambiente estable, lo que permite que aparezcan beneficios adicionales. Estos efectos generan cambios en las propiedades del crudo lo que permite que sea de mayor interés comercial debido al mejoramiento del mismo, como lo es la reducción en su viscosidad y fracciones pesadas.
- El ajuste y validación de los modelos de simulación numérica están en gran medida ligado a su correlación con los resultados obtenidos mediante simulación física o pruebas experimentales. De esta manera se debe tener en cuenta que las pruebas sean representativas para de esta manera se pueda garantizar la obtención de resultados significativos para la toma futura de decisiones por medio de las simulaciones.
- Mediante la generación de un PVT sintético convencional no es posible la representación de cambios químicos en los fluidos presentes en el yacimiento. Por lo tanto, los efectos de la acuatermolisis catalítica a nivel de simulación numérica deben ser presentados mediante la caracterización detallada de un modelo de fluidos apoyado en agrupación de componentes, definición de pseudocomponentes y pruebas fundamentales de caracterización que permitan reflejar el efecto catalítico sobre los crudos.
- El establecimiento de una metodología permite tener una guía para futuras investigaciones relacionadas al tema, por tal motivo, en su planteamiento se hace énfasis en cada una de sus etapas generando una idea en cómo proceder.

Referencias

León Naranjo, P. A., Bernal Correa, D. L., 2015. *“Evaluación técnico financiera de la implementación de un proceso de inyección continua de vapor en un yacimiento de crudo medio-caso colombiano.”* Universidad Industrial de Santander.

Suhang, A., Ranjith, R., Balaji, K., Peksaglam, Z., Malik, V., Zhang, M., Biopharm, F., Putra, D., Wijaya, Z., Dhannoon, D., Temizel, C., Aminzadeh, F., 2017, *“Optimization of Steamflooding Heavy Oil Reservoirs”*, Paper presented at the 2017 SPE Western Regional Meeting, Bakersfield, California, USA, April 2017

Stosur, G.J., Hite, J.R., Camahan, N.F., Miller, K., 2003, *“The Alphabet Soup of IOR, EOR and AOR: Effective Communication Requires a Definition of Terms”* Paper presented at the SPE International Improved Oil Recovery Conference in Asia Pacific, Kuala Lumpur, Malaysia, October 2003

Hyne, J.B., 1986, "*Aquathermolysis. A synopsis of work on the chemical reaction between water (steam) and heavy oil sands during simulated steam stimulation*" Department of Chemistry The University of Calgary, Calgary, Alberta, April 1986.

Wang, Y., Chen, Y., He, J., Yang, C., 2010, "*Mechanism of Catalytic Aquathermolysis: Influences on Heavy Oil by Two Types of Efficient Catalytic Ions: Fe^{3+} and Mo^{6+}* ", Energy Fuels 2010, 24, 1502-1510, DOI: 10.1021/ef901339k

Chao, K., Chen, Y., Li, J., Zhang, X., Dong, B., 2012, "*Upgrading and visbreaking of super-heavy oil by catalytic aquathermolysis with aromatic sulfonic copper*" Fuel Processing Technology 104 (2012) 174-180

Hamed Shokrlu, Y., Babadagli, T., 2014, "*Kinetics of the In-Situ Upgrading of Heavy Oil by Nickel Nanoparticle Catalysts and Its Effect on Cyclic-Steam-Stimulation Recovery Factor*" Reservoir Evaluation & Engineering, August 2014.

XU, H., PU, C., 2011, "*Experimental study of heavy oil underground aquathermolysis using catalyst and ultrasonic*" Journal of Fuel Chemistry and Technology, Volume 39, Issue 8, August 2011.

Franco, C.A., Cardona, L., Lopera, S.H., Mejía, J.M., Cortés, F.B., 2016, "*Heavy Oil Upgrading and Enhanced Recovery in a Continuous Steam Injection Process Assisted by Nanoparticulated Catalysts*", Paper presented at the SPE Improved Oil Recovery Conference, Tulsa, Oklahoma, USA, April 2016.

Rivera Olivera, J.N., Gutierrez, G.J., Romero Serrano, J.A., Medina Ovando, A., Garibay Febles, V., Barriga Acero, L.D., 2014, "*Use of unsupported, mechanically alloyed NiWMoC nanocatalyst to reduce the viscosity of aquathermolysis reaction of heavy oil*" Catalysis Communications 43 (2014) 131-135

Ovalles, C., Rodríguez, H., 2008, "*Extra Heavy Crude Oil Downhole Upgrading Using Hydrogen Donors Under Cyclic Steam Injection Conditions: Physical and Numerical Simulations Studies*" JCPT, Volume 47, No. 1, January 2008.

Ovalles, C., Vallejos, C., Vásquez, T., Martinis, J., Perez, A., Cotte, E., Castellanos, L., Rodriguez, H., 2001, "*Extra-Heavy Crude Oil Downhole Upgrading Process using Hydrogen Donors under Steam Injection Conditions*", Paper presented at the SPE International Thermal Operations and Heavy Oil Symposium, Margarita Island, Venezuela, March 2001.

Fan, Y., Durlofsky, L.J., Tchalepi, H.A., 2010, "*Numerical Simulation of the In-Situ Upgrading of Oil Shale*", Paper presented at the SPE Reservoir Simulation Symposium, The Woodlands, Texas, USA, February 2008.

Chavez-Morales, S., Pereira-Almao, P., 2016, "*Experimental and Numerical Simulation of Combined Enhanced Oil Recovery with In Situ Upgrading in a Naturally Fractured Reservoir*", Paper presented at the SPE Latin American and Caribbean Heavy and Extra Heavy Oil Conference, Lima, Peru, October 2016.

Shijun H., Qian H., Hao L., Linsong C., Zifei F., Lun Z., 2017, "*A modified model for aquathermolysis and its application in numerical simulation*", Fuel 207, 568-578.

Breve Cv:

Luis Miguel Salas Chia. Estudiante de Ingeniería de Petróleos e Ingeniería Industrial en la Universidad Industrial de Santander (UIS). Tesista investigador en el Grupo de Recobro Mejorado UIS. Presidente del capítulo estudiantil de la Society of Petrophysicists and Well Log Analysts (SPWLA UIS). Investigador en temáticas relacionadas a recobro mejorado y evaluación de formación.

Paola Andrea León Naranjo. Magister en ingeniería de hidrocarburos y profesional en ingeniería de petróleo con conocimientos en recobro térmico mejorado de petróleo, simulación numérica de yacimientos e investigación. Durante su trayectoria como investigadora ha trabajado en temas como el efecto de la viscosidad del crudo en la tasa de inyección de vapor, la viabilidad tanto técnica como financiera de procesos de inyección de vapor en yacimientos de crudo medio, y el estudio del “upgrading in situ” y aumento del factor de recobro de crudos pesados mediante el uso de catalizadores en procesos de inyección de vapor, siendo este su tema actual de investigación. Ha sido miembro del Grupo de Investigación de Recobro Mejorado desde mediados del 2013.

Samuel Fernando Muñoz Navarro. Ingeniero de Petróleos, UIS. Magister en Ingeniería de Hidrocarburos, UIS. Magister en Ingeniería de Petróleos, Colorado School of Mines, (USA). Profesor Titulado Laureado UIS. Director Grupo de Investigación Recobro Mejorado. Director de más de 500 proyectos de pregrado, de más de 60 tesis de Maestría, y 70 trabajos de Monografía en postgrado, en su mayoría relacionados con métodos de recobro secundario y mejorado.