

# Metodología para la simulación numérica de la adición de agentes catalíticos en procesos de inyección de vapor

Luis M. Salas-Chia<sup>1a</sup>; Keyner S. Núñez-Mendez<sup>1</sup>; Paola A. León<sup>1</sup>; Samuel F. Muñoz<sup>1</sup>; Adan Y. León<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Recobro Mejorado (GRM), <sup>2</sup>Grupo de Investigación en Corrosión (GIC),  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

<sup>a</sup>[luis.salas@correo.uis.edu.co](mailto:luis.salas@correo.uis.edu.co)

*Fecha recepción: abril 29 de 2021*  
*Fecha aceptación: agosto 30 de 2021*

## Resumen

Las reservas de petróleo hoy en día se encuentran integradas en gran medida por aceites pesados y extrapesados, de los cuales se obtienen pequeñas cantidades en su producción primaria. En este tipo de yacimientos la aplicación de métodos de recuperación térmica es una etapa importante en el programa de desarrollo y explotación de los campos. La inyección de vapor es uno de estos métodos empleados con el objetivo principal de reducir la viscosidad del crudo. En la literatura existen investigaciones experimentales las cuales recopilan evidencia de una interacción entre el vapor y el aceite en el yacimiento, permitiendo la aparición de reacciones químicas en un proceso denominado acuatermolisis, esta transformación es un resultado químico que se presenta a temperaturas entre los 200 y 325 °C típicas de la inyección de vapor. La adición del catalizador al proceso posibilita establecer un escenario donde se reduce la energía de activación necesaria generando cambios permanentes en propiedades del crudo, incluso si el calor suministrado se ha dispersado. La representación de este fenómeno mediante simulación numérica de yacimientos constituye un desafío, ya que las reacciones que gobiernan el proceso de cambios fisicoquímicos sobre el crudo presentan incidencias por parte de factores externos los cuales no pueden ser representados de manera directa por los simuladores comerciales. De esta manera, el presente trabajo se enfocó en el análisis de las investigaciones encontradas en la literatura acerca de la representación de los fenómenos fisicoquímicos, con los cuales se generó una metodología para replicar los efectos mediante simulación numérica.

**Palabras clave:** *Acuatermolisis; Simulación numérica; Recobro Térmico; Catálisis.*

# Methodology for the numerical simulation of catalytic agent addition in a steam injection process

## Abstract

Oil reserves today are largely composed of heavy and extra-heavy oils, of which small quantities are obtained in primary production. In this type of reservoirs, the application of thermal recovery methods is an important stage in the field development and exploitation program. Steam injection is one of these methods used with the main objective of reducing the viscosity of the crude oil. In the literature there is experimental research which compiles evidence of an interaction between steam and oil in the reservoir, allowing the occurrence of chemical reactions in a process called aquathermolysis. This transformation is a chemical result that occurs at temperatures between 200 and 325 °C typical of steam injection. The addition of the catalyst to the process makes it possible to establish a scenario where the necessary activation energy is reduced, generating permanent changes in the properties of the crude oil, even if the heat supplied has been dispersed. The representation of this phenomenon by means of numerical reservoir simulation is a challenge, since the reactions that govern the process of physicochemical changes in the crude oil are influenced by external factors that cannot be directly represented by commercial simulators. Thus, the present work focused on the analysis of the research found in the literature on the representation of physicochemical phenomena, with which a methodology was generated to replicate the effects through numerical simulation.

**Keywords:** *Aquathermolysis; Numerical simulation; Thermal recovery; Catalysis.*

# Metodologia para a simulação numérica da adição de agentes catalíticos em processos de injeção de vapor

## Resumo

As reservas petrolíferas actuais são em grande parte constituídas por óleos pesados e extra-pesados, dos quais pequenas quantidades são obtidas na produção primária. Neste tipo de reservatório, a aplicação de métodos de recuperação térmica é uma etapa importante no programa de desenvolvimento e exploração do campo. A injeção de vapor é um destes métodos utilizados com o objectivo principal de reduzir a viscosidade do petróleo bruto. A investigação experimental na literatura fornece provas de uma interacção entre vapor e petróleo no reservatório, permitindo a ocorrência de reacções químicas num processo chamado aquathermolysis. Esta transformação é um resultado químico que ocorre a temperaturas entre 200 y 325 °C, típicas da injeção de vapor. A adição do catalisador ao processo torna possível estabelecer um cenário onde a energia de activação necessária é reduzida, gerando alterações permanentes nas propriedades do petróleo bruto, mesmo que o calor fornecido tenha sido disperso. A representação deste fenómeno através de simulação numérica de reservatório é um desafio, uma vez que as reacções que regem o processo de alterações físico-químicas no petróleo bruto são influenciadas por factores externos que não podem ser directamente representados por simuladores comerciais. Assim, o presente trabalho centrou-se na análise da investigação encontrada na literatura sobre a representação dos fenómenos físico-químicos, com a qual foi gerada uma metodologia para replicar os efeitos através da simulação numérica.

**Palavras-chave:** *Aquatermólise; Simulação Numérica; Recuperação Térmica; Catálise.*

## Introducción

La industria del petróleo hoy en día se ha enfocado en fortalecer el desarrollo de tecnologías que permitan la producción de crudos pesados y extrapesados [1–3]. Este comportamiento es resultado de la disminución en las reservas de hidrocarburos livianos y un incremento en la dificultad de extracción de crudo en los campos del mundo [4]. El panorama internacional de distribución de reservas presenta un escenario donde el 70% de sus recursos son de tipo no convencional, con un 25% de crudos pesados y el otro 45% relacionado a crudos extra pesados y bitumen [5].

El recobro térmico como método de inyección de fluidos calientes a la formación, ha sido una técnica ampliamente aplicada en los campos de petróleo alrededor del mundo [6–9]. Un proceso de esta técnica es la inyección de vapor, en el cual se inyecta agua en fase de vapor saturado a la formación en diversas modalidades: cíclica, continua, asistida por drenaje gravitacional (SAGD). Durante la implementación se genera una interacción entre el agua inyectada y el hidrocarburo localizado en el yacimiento, dando lugar a un proceso químico el cual agrupa una serie de reacciones denominadas acuatermolisis [10].

La adición de un catalizador en un flujo de inyección de vapor es una técnica que potencializa las reacciones que ocurren en el yacimiento, permitiendo producir hidrocarburos de menor peso molecular debido al mejoramiento *in-situ* del crudo [11–15]. Este procedimiento es capaz de generar una reducción en las energías de activación necesarias para el rompimiento de enlaces fuerte como lo son C=S, C=O, C=N, C-C, C-S-C, C-O-C y C-N-C [16–18]. Con la adición de un catalizador al proceso de inyección de vapor se obtienen mejoras permanentes en las propiedades fisicoquímicas del crudo, aún cuando la temperatura alcance las condiciones iniciales del yacimiento, siendo análogo a la presencia de una refinería en fondo [19–21].

La simulación numérica en la industria petrolera se enfoca en la representación de procesos en toda su cadena de producción. Para el recobro mejorado de hidrocarburos, el potencial de las diferentes tecnologías y la selección de los escenarios más adecuados de aplicación se realiza mediante simuladores numéricos de yacimientos, evaluando

su comportamiento tanto a nivel de laboratorio como yacimiento [22–24]. Es por esto que la inyección de vapor es una técnica ampliamente aplicada en los campos a nivel internacional; han empleado estas herramientas computacionales para obtener resultados representativos y cercanos al comportamiento real del proceso a nivel de yacimiento, sin embargo, la selección y adición de un agente catalítico al proceso y los efectos que este genera sobre el crudo constituye un desafío para su representación mediante simulación numérica, siendo de gran interés para el sector de los hidrocarburos, especialmente en la evaluación de los métodos híbridos de inyección de vapor.

La limitante principal para modelar el efecto generado por el catalizador radica en que las herramientas convencionales de simulación no presentan módulos que permitan representar de manera directa las variaciones en las propiedades del crudo a manera composicional. Esto radica en los efectos en diferentes proporciones que generan los agentes químicos sobre las reacciones entre el crudo y el vapor a diferentes condiciones de presión y temperatura. Por esta razón, el presente artículo planteó una revisión de la literatura con el objetivo de compilar diferentes metodologías encontradas en estudios previos que permitieron analizar los métodos de representación del mejoramiento *in-situ* del crudo mediante simuladores comerciales. Para llevar a cabo este proceso, se realizó la construcción de una ecuación de búsqueda la cual integró tres nodos principales de interés para la investigación: las reacciones de acuatermolisis, la simulación numérica y el uso de un agente catalítico. Para esta búsqueda se emplearon bases de datos académicas y en un buscador de literatura gris, sin embargo, luego de realizar una depuración de la información recolectada, solo se obtuvieron ocho trabajos a considerar. De esta búsqueda se logró observar una secuencia empleada por los autores para el modelamiento la cual consta de 5 pasos principales: adquisición de datos, modelo de fluidos, esquema de reacción, modelo de simulación y análisis de datos. Como resultado de esta investigación se propone una metodología con base en la recopilación realizada para representar la adición de un catalizador al proceso de inyección de vapor y su posterior evaluación de rendimiento sobre la producción de hidrocarburos.

## Generalidades

### Procesos de inyección de vapor

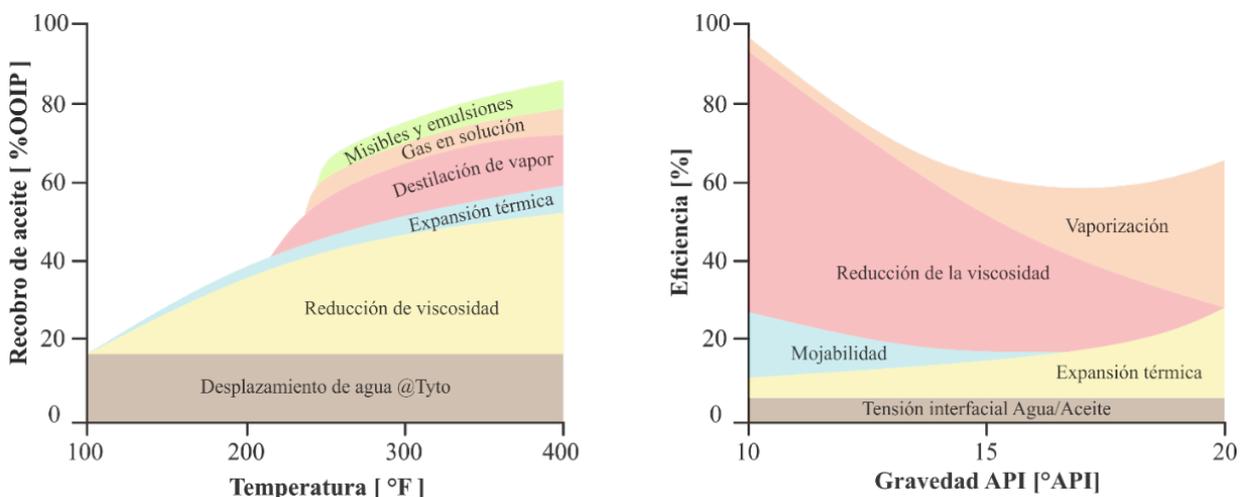
La inyección de fluidos calientes como agua y vapor ha sido una técnica ampliamente implementada en los campos petroleros a nivel mundial desde los años 30 [25]. Este método permite establecer un escenario de reducción de la viscosidad y consecuente incremento de la movilidad del crudo. Cuando el fluido inyectado alcanza la formación de interés existe una transmisión de energía hacia la matriz y el aceite presente en el yacimiento, calentándolos y favoreciendo la aparición de mecanismos físicos de recuperación de petróleo [26]. Estos permiten obtener un incremento en el porcentaje del recobro de aceite dependiendo la temperatura del proceso y el tipo de crudo presente en el yacimiento como se aprecia en la **Figura 1**. En la inyección de vapor empleado como método de recobro térmico existen dos modalidades implementadas principalmente en los campos petroleros como lo son: Inyección Continua de Vapor (SD) e Inyección Cíclica de Vapor (CSS).

### Acuatermolisis

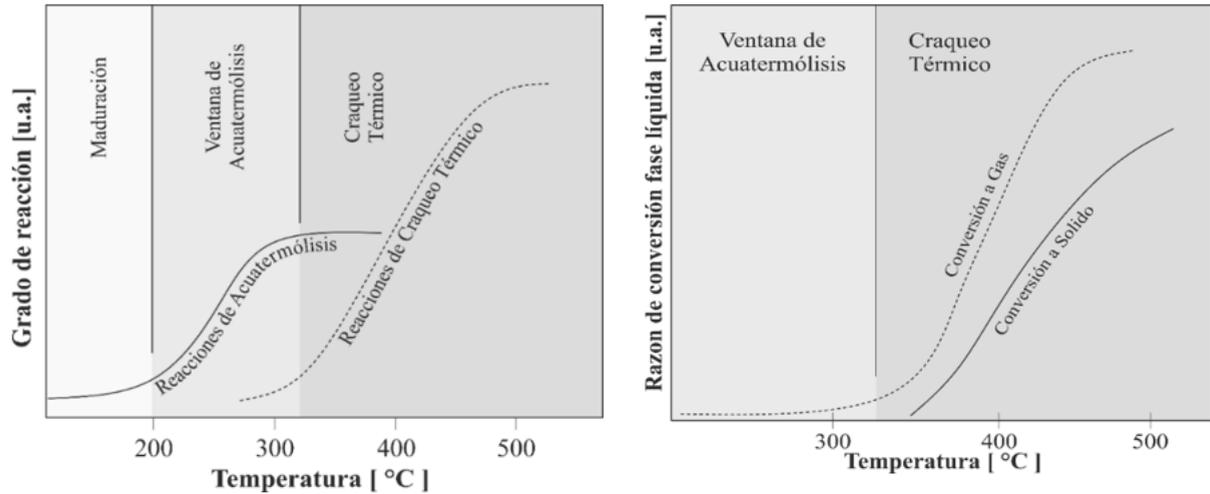
La producción de gases como  $H_2S$ ,  $CO_2$  y  $CO$  asociados a la implementación de la inyección de vapor planteó la posibilidad de la ocurrencia de reacciones químicas en el yacimiento, las cuales han sido tema de investigación durante los últimos años [27–31]. De acuerdo con la etapa de desarrollo del yacimiento y la temperatura característica de cada proceso, se pueden encontrar diferentes escenarios en la formación que permite la ocurrencia de reacciones, como se

muestra en la **Figura 2**. La región de maduración está asociada a una formación donde únicamente los procesos de sedimentación y depositación se han presentado y no se ha implementado algún método de recobro térmico. La ventana de Acuatermolisis es un término relacionado al conjunto de reacciones químicas que pueden ocurrir durante la aplicación en un proceso de inyección de vapor [32]. Finalmente, la región de craqueo térmico se caracteriza por alcanzar altas temperaturas relacionadas a la inyección de aire en el yacimiento con procesos que involucran reacciones de craqueo térmico y descomposición de las fracciones pesadas.

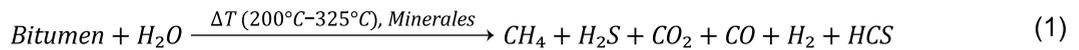
Tomando en consideración los rangos de temperatura operados en un proceso de inyección de vapor, se observa que la ventana de acuatermolisis es la zona que se encuentra en el intervalo de temperatura inherente a estos procesos comprendidos entre los 200 y 325 °C [33], por lo cual se toma como base para la presente investigación. Las reacciones que allí suceden son producto de un proceso químico resultante del contacto del aceite pesado con el vapor en el intervalo de temperatura anteriormente mencionado. El petróleo en yacimiento sufre una transformación, consecuencia de la energía suministrada por el vapor y el efecto catalítico de la mineralogía presente en la matriz [34–36], generando productos como metano ( $CH_4$ ), ácido sulfhídrico ( $H_2S$ ), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ), hidrógeno ( $H_2$ ) e hidrocarburos de menor peso molecular (HCS), como se aprecia en la Ecuación 1.



**Figura 1.** Mecanismos físicos de recuperación en procesos de inyección de vapor en crudos pesados en función de la temperatura y la gravedad API. Adaptado de: Optimization of Steamflooding Heavy Oil Reservoirs [26].



**Figura 2.** Proporción de conversión de la fase líquida de acuerdo con la temperatura de operación. Adaptado de: Aquathermolysis: A synopsis of work on the chemical reaction between water (steam) and heavy oil sands during simulated steam stimulation [33].



**Acuatermolisis catalítica**

Durante la aplicación de un proceso de inyección de vapor, los gases como H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub> y CO son productos evidenciados en cantidades representativas como resultado del rompimiento de enlaces C-S-C y la presencia de radicales libres de las moléculas [37]. La adición de un compuesto catalítico o precursores de catalizadores *in-situ* al sistema permite la ruptura de grupos funcionales más fuertes como C-O-C y C-N-C, resultado de la disminución de la energía de activación necesaria para la ocurrencia de reacciones que de manera convencional no se desarrollan [38]. Este proceso se denomina acuatermolisis catalítica y representa la adición de un catalizador a un escenario sometido a inyección de vapor, permitiendo obtener una mejor calidad del crudo por la ocurrencia de reacciones como pirolisis, isomerización,

apertura de anillos, oxigenación, alcoholización, hidrogenación, reconstrucción, esterificación y despolimerización [39]. La presencia del agente químico promueve la estabilización de los radicales libres de hidrocarburos generados por el rompimiento de las cadenas permite obtener una mejor calidad del crudo con cambios a nivel molecular de manera permanente.

**Nivel de madurez.** La evaluación de una tecnología puede generarse de diversas maneras y una de ellas es empleando la escala TRL (*Technology Readiness Levels*) [40]. A través de esta medida se permite cuantificar la madurez que presenta el proyecto en valoración. Este método presenta 9 niveles de clasificación los cuales están compuestos como se disponen en la [Tabla 1](#).

**Tabla 1.** Niveles TRL.

TRL	Concepto	TRL	Concepto
1	Observación de los principios básicos	6	Demostración del desarrollo en entorno pertinente
2	Formulación del concepto	7	Demostración del desarrollo en el entorno real
3	Prueba experimental del concepto	8	Desarrollo completo y certificado
4	Validación del desarrollo en entorno laboratorio	9	Desarrollo completo y certificado
5	Validación del desarrollo en entorno pertinente		

Con base en esta catalogación, la técnica de inyección de vapor con catalizadores se encuentra posicionada en un nivel TRL 4 a partir de los estudios que se han realizado en pruebas de laboratorio a nivel nacional. Con el objetivo de aumentar el nivel de madurez tecnológica a un TRL 5, es necesario evaluar el proceso en un contexto representativo al de su aplicación final en campo. La validación de la tecnología debe realizarse en un entorno previsto de manera simulada o real, es por esto que diversos autores han recurrido al modelamiento de los efectos catalíticos del agente químico mediante simulación numérica con las herramientas tecnológicas actuales.

### Metodología de trabajo

El presente estudio planteó el uso de una ecuación de búsqueda la cual se conformó considerando los tres principales nodos de interés: las reacciones de acuatermolisis, la simulación numérica y el uso de un catalizador en los estudios. *Aquathermolysis AND "numerical simulation" AND catalyst* fue el arreglo final de esta ecuación con el objetivo de delimitar la información encontrada en la literatura que fuera de interés para la investigación. Para la revisión fue considerado el modelo empleado por las revisiones sistemáticas bajo el modelo PRISMA, el cual permite Durante el proceso de búsqueda fueron consultadas tanto bases de datos académicas en diferentes buscadores de revistas categorizadas como One Petro, Science Direct, Taylor & Francis y ACS publications. De igual manera, se empleó la literatura gris mediante el buscador de Google Scholar. A manera de depuración de la información, no fueron considerados los estudios que no emplearan un agente catalizador en la reacción, ni aquellos que no especificaran de manera concreta las metodologías usadas para la representación del fenómeno de mejoramiento *in-situ* del crudo. A continuación, se compila el análisis de los documentos encontrados para la representación del mejoramiento del crudo mediante el uso de simulación numérica.

### Representación del mejoramiento con simulación

La acuatermolisis convencional y catalítica han sido técnicas evaluadas ampliamente a través de pruebas experimentales [41–49]. Sin embargo, en la literatura existen pocos estudios relacionados a su representación mediante simulación numérica.

La reproducción del proceso a través de un simulador numérico es un paso necesario dentro del estudio de factibilidad de una tecnología en la industria de hidrocarburos. Aunque los simuladores de yacimiento han avanzado en su capacidad para la representación de los procesos que ocurren en el subsuelo, el mejoramiento catalítico no ha podido replicarse de forma directa a través de estas herramientas. Una pequeña cantidad de autores han investigado metodologías para la representación de la adición de un catalizador en un proceso de inyección de vapor a través de un simulador comercial [50–55]. Esta situación se debe a que la caracterización PVT convencional del crudo, la cual es una medición de propiedades físicas dependientes de variables como presión, volumen y temperatura [56], no incluye caracterización de los cambios composicionales del fluido.

Es por esta razón que las investigaciones encontradas en la literatura han tenido que recurrir al planteamiento de modelos de fluidos de tipo composicional, fundamentados en la agrupación de pseudocomponentes con el objetivo de generar un PVT sintético que se ajuste de una manera más acertada. Identificada esta problemática la presente investigación fue realizada siguiendo el flujo de trabajo expuesto en la **Figura 3**. El estudio inició con la revisión literaria a través de bases de datos académicas de trabajos que han replicado el mejoramiento catalítico mediante la simulación numérica. Una vez fueron obtenidas las investigaciones a analizar, se procedió al estudio de las metodologías aplicadas las cuales fueron tomadas como base para la consolidación de la metodología sugerida resultante en el presente trabajo.

### Adquisición de datos

Para iniciar con la investigación es necesario contar con una fuente de información confiable. Los autores consultados han recurrido a dos métodos de adquisición de la información: la realización de pruebas experimentales propias y la revisión de pruebas de laboratorio condensadas en estudios de la literatura previos. En la **Tabla 2** se muestra el método utilizado por cada autor, observando que la realización de pruebas experimentales propias se han aplicado con mayor frecuencia. Obtener los datos mediante pruebas experimentales permite simular un sistema a través del cual se estudia un fenómeno químico bajo unas condiciones de temperatura y presión establecidas por el investigador. Equipos como reactores y dispositivos

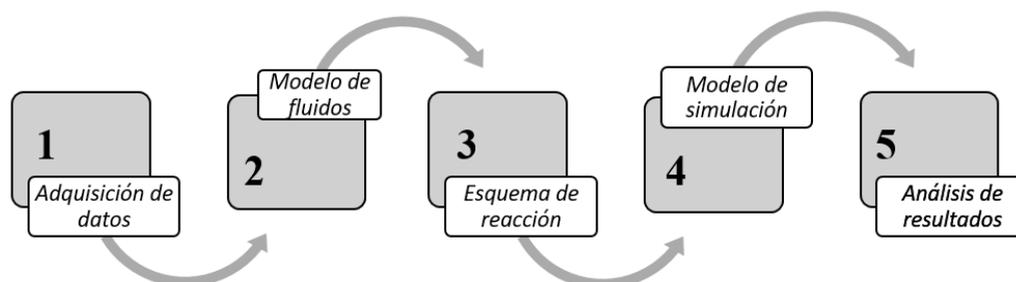
de desplazamiento han sido empleados en el desarrollo de estas pruebas. Al utilizar este método se pueden seleccionar y ajustar los parámetros operacionales a analizar durante la prueba, así como evaluar la efectividad del proceso a través de la caracterización del fluido antes y después de la reacción. Una situación diferente sucede cuando se toma la información a través de la revisión de pruebas previas encontradas en literatura. En estas evaluaciones experimentales los parámetros fueron una decisión del autor de la prueba y estos no pueden modificarse en caso de ser necesario en la investigación. Esta técnica de adquisición de datos es representativa siempre y cuando las investigaciones presenten una similitud en los parámetros a evaluar y el fluido empleado en las pruebas.

### **Modelo de caracterización de los fluidos**

En la revisión se observó que los autores plantearon diversas metodologías para establecer el modelo para caracterizar los fluidos (modelo de fluidos). Esta etapa es necesaria para simplificar el proceso de representar las características del crudo, tanto base como mejorado, a través de la partición del hidrocarburo en componentes. Esta división se genera en pequeños cortes o pseudocomponentes que permiten que una mezcla compleja con gran cantidad de componentes como lo son los hidrocarburos sea tratada de manera menos compleja [60]. Establecer el modelo de fluidos es el procedimiento más importante en el proceso de la simulación numérica del mejoramiento de crudo debido a la forma seleccionada para realizar la partición del crudo a analizar. El objetivo de este paso es poder comprender las particiones del hidrocarburo transformado a través del curso de la reacción y obtener así una representación más acertada. Con base en la información de las investigaciones estudiadas, el presente trabajo propone dividir este procedimiento en cinco pasos principales: data inicial, técnica de caracterización, agrupamiento, definición de pseudocomponentes y establecimiento del modelo de fluidos.

- Data inicial: se hace necesario recopilar información tanto de la formación como de los fluidos presentes, como se muestra en la **Tabla 3**, donde se aprecia el nombre, ubicación de los yacimientos y valores de la medición de viscosidad de los crudos analizados por cada autor.

- Técnica de caracterización: para plantear el modelos de fluidos se debe contar con una caracterización de las muestras antes y después de la aplicación de la tecnología bajo las condiciones seleccionadas para la misma, y así poder cuantificar las propiedades de la muestra y no solo tener un análisis cualitativo. En este proceso se emplean técnicas de caracterización de muestras como análisis termogravimétricos (TGA), compuestos individuales de hidrocarburos (IHC) curvas de destilación simulada (SDC) y análisis composicional SARA (saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos).
- Agrupamiento: posterior a la caracterización de la muestra se procede a agrupar los componentes del crudo inicial teniendo en cuenta aspectos físicos y químicos como lo son rangos de temperatura, densidad y parámetros estructurales establecidos mediante técnicas analíticas.
- Pseudocomponentes: una vez se ha obtenido la partición del crudo base, se procede a establecer los pseudocomponentes con los cuales se va a representar el fluido inicial. Con este paso se busca la reducción en la complejidad de la simulación y el tiempo de cómputo requerido para la representación del proceso. Comúnmente se emplea la definición de los pseudocomponentes para la replicación de los cambios tanto físicos como composicionales del crudo debido a la alta complejidad en el comportamiento del hidrocarburo en las reacciones. En la **Tabla 4** se muestra las técnicas de caracterización y la cantidad de pseudocomponentes empleados por cada autor para la determinación del modelo de fluidos.
- Modelo de fluidos: la definición del modelo es un paso fundamental en el planteamiento de la simulación, ya que una apropiada caracterización, agrupación y posterior creación de pseudocomponentes logrará obtener un modelo con un mayor ajuste. Una vez establecidos los pasos anteriores, se procede a la definición de los esquemas de reacción con base en los pseudocomponentes seleccionados en el modelo.



**Figura 3.** Metodología para la representación numérica del mejoramiento catalítico del crudo.

**Tabla 2.** Revisión de metodologías de adquisición de datos.

Año	Investigador	Referencia	Revisión de literatura	Pruebas de laboratorio
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]		X
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]		X
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	X	
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]		X
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]		X
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]		X
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]		X
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]		X

**Tabla 3.** Revisión de crudos empleados en los estudios analizados.

Año	Investigador	Referencia	Yacimiento	Viscosidad	País
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	Hamaca	6100 cP @60 °C	Venezuela
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	Hamaca	6100 cP @60 °C	Venezuela
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	Green River	-	Estados Unidos
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	MTK	49 cP @113 °C	México
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	Liaohe	260 cP @13 °C* 700 cP @13 °C* 4000 cP @13 °C* 12000 cP 13 °C*	China
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	Athabasca	9749 @50 °C	Canadá
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	-	-	-
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	Athabasca	9749 @50 °C	Canadá

Nota: \*Este estudio evaluó cuatro muestras de crudo de diferentes viscosidades.

**Tabla 4.** Revisión de técnicas de caracterización y pseudocomponentes empleados.

Año	Investigador	Referencia	Pseudocomponentes*	Caracterización
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	4	TGA
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	4	TGA
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	5	IHC
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	5	SDC
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	10	SARA
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	5	SDC
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	5	SARA
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	5	IHC

Nota: \*Los pseudocomponentes establecidos se encuentran plasmados en la Tabla 6.

### Esquema de reacción

Para llevar a cabo la representación del mejoramiento en el crudo se establece un proceso el cual plantea como los pseudocomponentes se transforman en otros mediante reacciones, las cuales se establecen con una dirección y magnitud del cambio. Esta sinergia se encuentra basada en como las fracciones más pesadas se disgregan en unas más livianas. Para poder representar este proceso es fundamental tener en cuenta la cinética de las reacciones donde parámetros como las energías de activación, la cual se refiere a la cantidad mínima de energía requerida para activar los reactivos a un estado en el cual se pueden transformar en productos [61].

Los autores analizados no plantearon su propio modelo para el cálculo de estos parámetros de cinética de reacción, sino que emplearon estudios previos para obtener estos valores los cuales aplican métodos numéricos de solución.

Las investigaciones en las cuales se basaron los autores emplean metodologías donde se tiene en consideración el cambio de la proporción de los pseudocomponentes a diferentes tiempos y temperaturas de las pruebas experimentales realizadas. En la **Tabla 5**, se encuentran los estudios en los cuales se basaron los autores para obtener los parámetros cinéticos de las reacciones de sus pruebas.

Posterior a adquirir la información del crudo base, definir los pseudocomponentes y establecer el modelo cinético, es necesario construir el esquema de reacción. Este permite representar gráficamente la transformación de los pseudocomponentes y observar la dirección de la cinética de las reacciones. En la **Tabla 6** se observa la recopilación de los esquemas de reacción propuestos por los autores en cada una de sus investigaciones.

**Tabla 5.** Revisión de los estudios empleados para el cálculo de los parámetros cinéticos.

Año	Investigador	Referencia	Investigación base	Referencia
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	Phillips, Colins <i>et al.</i>	[62]
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	Phillips, Colins <i>et al.</i>	[62]
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	-	-
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	Da Silva De Andrade, Francisco	[63]
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	Hongfu, Fan <i>et al.</i>	[64]
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	Da Silva De Andrade, Francisco	[63]
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	Loria, Herbert <i>et al.</i>	[65]
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	Modelos cinéticos de Athabasca	-

**Tabla 6.** Revisión de los reactivos y productos en los esquemas de reacción propuestos.

Año	Investigador	Referencia	Reactivos	Productos
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	Crudo	Naftaleno
			Asfalteno	Fracción pesada
			Fracción pesada	Fracción mediana
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	Fracción mediana	Fracción liviana
			Crudo	Naftaleno
			Asfalteno	Fracción pesada
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	Fracción pesada	Fracción mediana
			Fracción mediana	Fracción liviana
			Kerógeno	Aceite pesado
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	Hidrógeno	Aceite liviano
			Residuo	Gas hidrocarburo
			Gasóleo de vacío	Gasóleo de vacío
			Destilados	Destilados
			Nafta	
			Destilados	Gases

2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	Resins Asphaltenes	Saturados Aromáticos Hidrógeno Metano Monóxido de carbono Dióxido de carbono Ácido sulfhídrico Gases de alto peso molecular
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	Hidrógeno Residuo Gasóleo de vacío Destilados	Gasóleo de vacío Destilados Nafta Gases
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	Residuo Gasóleo de vacío Destilados Nafta	Gasóleo de vacío Destilados Nafta Gases
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	Hidrógeno Residuo Gasóleo de vacío Destilados	Gasóleo de vacío Destilados Nafta Gases

### Modelo de simulación

El empleo de la simulación numérica para representar el mejoramiento catalítico en un yacimiento de interés o un modelo físico de laboratorio requiere conocer las propiedades y parámetros inherentes a estos sistemas. En ambos casos es necesario contar con propiedades petrofísicas, como permeabilidades, porosidades y saturaciones; condiciones iniciales, como presión y temperatura; y la configuración de su estructura, como la estratificación, espesor y compartimentalización. A su vez, es importante identificar los fluidos de la formación y el comportamiento que poseen empleando curvas de permeabilidad relativa y de viscosidad. Una vez se tienen los valores de las propiedades del modelo, se debe proceder a la selección de la malla la cual será poblada con estos valores siguiendo el objetivo de la investigación. Existen principalmente dos tipos de malla, la cilíndrica y la cartesiana, las cuales se seleccionan basadas en los procesos que se deseen evaluar. La malla cilíndrica es empleada principalmente para evaluar el rendimiento del proceso en las zonas cercanas a cara del pozo de manera detallada. Mientras que la malla cartesiana es comunmente utilizada cuando el parámetro que se desea evaluar es observado a través del desplazamiento del proceso en el yacimiento. La metodología seleccionada para analizar el proceso depende del enfoque que se

le quiere dar a la investigación y su objetivo. En los estudios analizados, dispuestos en la [Tabla 7](#), emplearon tanto mallas de tipo cilíndrica como cartesiana para la representación de un proceso en campo en la mayoría de sus casos. La mayoría de estudios emplearon los simuladores comerciales de la compañía CMG para el desarrollo de la investigación, aunque cabe resaltar que también fueron desarrollados simuladores propios para el estudio de estos fenómenos.

### Análisis de resultados

Una vez el modelo de simulación es generado, es necesario realizar la validación y ajuste del mismo a través del análisis de los resultados obtenidos. Para poder proceder con la revisión de los resultados, es necesario conocer la técnica de explotación empleada, así como el compuesto químico adicionado al proceso. En la [Tabla 8](#), se encuentran compilados los procesos evaluados en las investigaciones y los compuestos químicos adicionados. De los autores consultados, los procesos de inyección continua y la adición de tetralina como agente donante de hidrógeno para la ocurrencia de las reacciones fueron las situaciones evaluadas principalmente. El modelo base de simulación debe ser ajustado mediante la comparación de valores como lo son los históricos de producción del pozo para proceder a realizar

el análisis de inyección del agente. Los resultados obtenidos mediante las simulaciones deben ser comparados con las propiedades de los fluidos resultantes de las pruebas de laboratorio o pilotos realizados con la tecnología.

Estas propiedades pueden ser obtenidas a través de diversas técnicas de caracterización y evaluación como se observa en la **Tabla 9**, donde se exponen los métodos empleados en cada uno de los casos reportados para la validación del proceso. En las investigaciones analizadas se destacan las mediciones de propiedades físicas, como la viscosidad y gravedad API;

caracterización química, como lo es el análisis de cromatografía de gases efluentes y las curvas de destilación simulada; y la medición y cuantificación de parámetros operacionales, como el factor de recobro, las saturaciones de fluidos y conversión de reactivos a productos. La realización de la comparación entre los datos obtenidos por caracterización físico-química con respecto a los obtenidos por la representación numérica permitirán poder realizar ajustes en su modelo y así cotejar los nuevos resultados hasta obtener una representación adecuada del proceso.

**Tabla 7.** Revisión del modelo numérico de yacimiento.

Año	Investigador	Referencia	Escala	Tamaño	Malla
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	Campo	10x1x10	Cilíndrica
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	Campo	10x1x10	Cilíndrica
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	Campo	33x19x16	Cilíndrica
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	Laboratorio	2.2 x 2.2 x 32	Cartesiana
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	Campo	27x32x30	Cartesiana
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	Campo	40x10x40	Cartesiana
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	Laboratorio Campo	1.9x0.1x0.1 300x16.8x2555	Cartesiana
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	Laboratorio Campo	5x44x5 40x10x30	Cartesiana

**Tabla 8.** Revisión del proceso analizado y el compuesto adicionado.

Año	Investigador	Referencia	Proceso	Compuesto
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	CSS	Tetralin
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	CSS	Tetralin
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	-	Minerales
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	SF	Catalizador
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	SF	-
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	SF	Catalizador
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	SF	Catalizador
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	SF	Catalizador

Nota: CSS Inyección cíclica, SF Inyección continua

**Tabla 9.** Revisión de las técnicas de caracterización de efluentes empleadas.

Año	Investigador	Referencia	Técnica de evaluación
2001	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[50]	API Saturaciones Conversión de reacción
2008	Ovalles, Cesar <i>et al.</i>	[51]	API Saturaciones Conversión de reacción
2010	Fan, Yaqing <i>et al.</i>	[52]	Producción acumulada Saturaciones

			API
2016	Chavez-Morales, Silvia <i>et al.</i>	[49, 53]	Curvas de destilación simulada Cromatografía de gases Producción acumulada
2017	Huang, Shijun <i>et al.</i>	[54]	Viscosidad Saturaciones
2017	Nguyen, Ngoc <i>et al.</i>	[55]	Viscosidad Factor de recobro Saturaciones
2019	Bueno, Nicolás <i>et al.</i>	[57, 58]	Viscosidad API Saturaciones
2020	López, Carolina <i>et al.</i>	[59]	Densidad Viscosidad Fracción molar

### Propuesta de implementación

Con el objetivo de aplicar la información obtenida de la revisión de literatura para un proceso de inyección de vapor con catalizadores en un campo de petróleo colombiano, se plantea la siguiente metodología de implementación:

1. Realizar la adquisición de datos a través de pruebas de laboratorio para seleccionar los parámetros a evaluar durante los experimentos. Tomar los datos con los cuales se va a trabajar el modelo de estudios encontrados en literatura no es la mejor opción, a menos que se disponga de investigaciones previas donde las muestras empleadas sean del mismo fluido del campo a evaluar.
2. El modelo de fluidos puede ser construido a partir de las curvas de destilación simulada, generando un número de pseudocomponentes del crudo a través de rangos de temperatura [54]. Para el cálculo de los parámetros cinéticos, se propone emplear la metodología planteada por Da Silva De Andrade (2014) el cual planteó un modelo basado en las variaciones observadas en las fracciones obtenidas a través las curvas de destilación simulada [63].
3. El modelo de simulación a plantear debe ser en primera medida una representación de las pruebas de laboratorio realizadas, con el objetivo de encontrar un modelo que se ajuste con los resultados del proceso. Posterior a esto, es posible proponer un arreglo del modelo

a escala de una sección de campo con una malla cartesiana para la evaluación del frente del proceso en el yacimiento. Cabe resaltar que los datos de entrada del modelo deben ser considerados con respecto al simulador a emplearse y los requerimientos que este presente para poder realizar la representación.

4. En cuanto a las técnicas de evaluación del proceso se sugieren emplear mediciones de gravedad API, curvas de viscosidad, perfiles de saturación y producción acumulada del proceso.

### Conclusiones

La simulación del efecto de mejoramiento *in-situ* del crudo no es posible llevarse a cabo de manera directa mediante el uso de los simuladores actuales. Es por esto, que se debe recurrir a una representación de manera indirecta a través del uso de metodologías, que plantean la transformación de los hidrocarburos más pesados en sus fracciones más livianas usando la definición de pseudocomponentes y la coocurrencia de reacciones químicas entre ellos; donde los parámetros cinéticos de estas reacciones pueden calcularse a partir de los resultados experimentales. El entendimiento de las reacciones de acuatermolisis ha permitido destacarlas como un mecanismo químico asociado a la inyección de vapor, en donde la generación de gases ácidos e hidrocarburos de menor peso molecular son el principal indicador. Es por esto, que para una

representación adecuada del mejoramiento del fluido es necesario realizar una caracterización desde el punto de vista químico que permita apreciar las magnitudes de las variaciones en su composición.

El uso de un modelo PVT convencional, comúnmente empleado en las simulaciones numéricas para la representación del crudo, no se ajusta a los cambios experimentados por parte del efecto catalítico del agente en las reacciones. Es por esto que a través de las revisiones de los estudios analizados se evidenció la necesidad de establecer una caracterización por medio de técnicas composicionales y la posterior agrupación por componentes del crudo para tener un mejor ajuste de los cambios fisicoquímicos en el crudo base por el efecto catalítico.

### Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo brindado por la Universidad Industrial de Santander y el personal del proyecto de capital semilla numero 2681.

### Referencias Bibliográficas

- [1] Guo K, Li H, Yu Z. In-situ heavy and extra-heavy oil recovery: A review. *Fuel*. 2016;185:886-902.
- [2] Li Y, Wang Z, Hu Z, Xu B, Li Y, Pu W, *et al*. A review of in situ upgrading technology for heavy crude oil. *Petroleum*. 2020;7:117-122.
- [3] Dong X, Liu H, Chen Z, Wu K, Lu N, Zhang Q. Enhanced oil recovery techniques for heavy oil and oilsands reservoirs after steam injection. *Appl. Energy*. 2019;239:1190-1211.
- [4] Babadagli T. Philosophy of EOR. *J. Pet. Sci. Eng*. 2020;188:1-24.
- [5] Peñuela-Muñoz JH. Crudos pesados Crudos pesados: la realidad del sector hidrocarburos de Colombia. *Revista VirtualPro*. 2017;184:1-3.
- [6] Leon Naranjo PA, Bernal Correa DL, Muñoz Navarro SF, Ordoñez Rodriguez A. Inyección de vapor en medianos. recuperación y rentabilidad. *revfue*. 2015;13(1):21-3.
- [7] Naranjo Suárez C, Muñoz Navarro S, Zapata Arango J. Factibilidad experimental de la inyección de agua en las arenas mugrosa del campo Lisama. *revfue*. 2010;8(1):5-15.
- [8] Zhao DW, Gates ID. On hot water flooding strategies for thin heavy oil reservoirs. *Fuel*. 2015;153:559-568
- [9] Zhong LG, Liu YJ, Fan HF, Jiang SJ. Liaohe Extra-Heavy Crude Oil Underground Aquathermolytic Treatments Using Catalyst and Hydrogen Donors under Steam Injection Conditions. En: *SPE International Improved Oil Recovery Conference in Asia Pacific*; 2003 oct 20-21; Kuala Lumpur, Malaysia. OnePetro; 2003. p. 6.
- [10] Kapadia PR, Kallos MS, Gates ID. A review of pyrolysis, aquathermolysis, and oxidation of Athabasca bitumen. *Fuel Process. Technol*. 2015;131:270-289.
- [11] Jiang S, Liu X, Liu Y, Zhong LG. In Situ Upgrading Heavy Oil by Aquathermolytic Treatment under Steam Injection Conditions. En: *SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*; 2005 feb 2-4; The Woodlands, Texas. OnePetro; 2005. p. 8.
- [12] Wen S, Zhao Y, Liu Y, Hu S. A Study on Catalytic Aquathermolysis of Heavy Crude Oil During Steam Stimulation. En: *SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*; 2007 feb 28; Houston, Texas. OnePetro; 2007. p. 1-5.
- [13] Chen Y, Wang Y, Wu C, Xia F. Laboratory Experiments and Field Tests of an Amphiphilic Metallic Chelate for Catalytic Aquathermolysis of Heavy Oil. *Energy & Fuels*. 2008;22:1502-1508.
- [14] Wang Y, Chen Y, He J, Li P, Yang C. Mechanism of catalytic aquathermolysis: Influences on heavy oil by two types of efficient catalytic ions: Fe<sup>3+</sup> and Mo<sup>6+</sup>. *Energy & Fuels*. 2010;24(3):1502-10.
- [15] Chao K, Chen Y, Liu H, Li P, Yang C. Laboratory Experiments and Field Test of a Difunctional Catalyst for Catalytic Aquathermolysis of Heavy Oil. *Energy & Fuels*. 2012;26:1152-59.
- [16] Yi S, Babadagli T, Li HA. Use of Nickel Nanoparticles for Promoting Aquathermolysis Reaction During Cyclic Steam Stimulation. *SPE J*. 2018;23(1):145-56.
- [17] Wu C, Lei G, Yao C, Jia X. In Situ Upgrading Extra-heavy Oil by Catalytic Aquathermolysis Treatment Using a New Catalyst Based Anamphiphilic Molybdenum Chelate. En: *International Oil and Gas Conference and Exhibition in China*; 2010 jun 8-10; Beijing, China. OnePetro; 2010. p. 9.
- [18] Zhang Z, Barrufet M, Lane R, Mamora D. Experimental Study of In-Situ Upgrading for Heavy Oil Using Hydrogen Donors and Catalyst under Steam Injection Condition. En: *SPE Heavy Oil Conference Canada*; 2012 jun 12-14; Calgary, Alberta, Canada. OnePetro;

2012. p. 1-7.
- [19] Wu C, Su J, Zhang R, Zhang Z. Study on the molecular dynamics mechanism of extraheavy oil by catalytic aquathermolysis. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*. 2016;38(6):763-68.
- [20] Hashemi R, Nassar NN, Pereira Almaso P. Enhanced heavy oil recovery by in situ prepared ultradispersed multimetallic nanoparticles: A study of hot fluid flooding for Athabasca bitumen recovery. *Energy and Fuels*. 2013;27:2194-2201.
- [21] Xu Y, Ayala-Orozco C, Wong MS. Heavy Oil Viscosity Reduction Using Iron III para-Toluenesulfonate Hexahydrate. En: SPE Western Regional Meeting; 2018 apr 22-26; Garden Grove, California, USA. OnePetro; 2018.
- [22] Bennion DB, Ma T, Thomas FB, Romanova UG. Laboratory Procedures for Optimizing the Recovery from High Temperature Thermal Heavy Oil and Bitumen Recovery Operations. En: Canadian International Petroleum Conference; 2007 jun 12-14; Calgary, Canada. OnePetro; 2007. p. 14.
- [23] Li W, Mamora DD. Numerical Simulation of Thermal Solvent Replacing Steam under Steam Assisted Gravity Drainage (SAGD) Process. En: SPE Western Regional Meeting; 2010 may 27-29; Anaheim, California, USA. OnePetro; 2010. p. 1-14.
- [24] Rabiú Ado M. Numerical Simulation of Heavy Oil and Bitumen Recovery and Upgrading Techniques (Tesis doctoral). University of Nottingham; 2017.
- [25] Bernal Correa DL, Rincon Canas MM, Munoz Navarro SF, Ordonez Rodriguez A, Leon Naranjo PA. Evaluación técnico financiera de la implementación de un proceso de inyección continua de vapor en un yacimiento de crudo medio-caso colombiano (Tesis). Bucaramanga: UIS; 2015.
- [26] Suhag A, Ranjith R, Balaji K, Peksaglam Z, Malik V, Zhang M, *et al.* Optimization of Steamflooding Heavy Oil Reservoirs. En: SPE Western Regional Meeting; 2017 apr 23-27; Bakersfield, California, USA. OnePetro; 2017. p. 1-35.
- [27] Butron J, Bryan J, Yu X, Kantzas A. Production of Gases During Thermal Displacement Tests. En: SPE Canada Heavy Oil Technical Conference; 2015 jun 9-11; Calgary, Alberta, Canada. OnePetro; 2015. p. 1-20.
- [28] Thimm HF. A general theory of gas production in SAGD operations. *Journal of Canadian Petroleum Technology*. 2000;40(11):50-53
- [29] Barroux C, Lamoureux-Var V, Flauraud E. Forecasting of H<sub>2</sub>S Production due to Aquathermolysis Reactions. En: SPE Middle East Oil and Gas Show and Conference; 2013 mar 10-13; Manama, Bahrain. OnePetro; 2013.
- [30] Lizcano C. Acid Gas Prediction Methodology, Result of Steam Injection Implementation in Heavy Oil Reservoirs. En: SPE Annual Technical Conference and Exhibition; 2014 oct 27-29; Amsterdam, The Netherlands. OnePetro; 2013.
- [31] Belgrave JDM, Moore RG, Ursenbach MG. The Canadian Journal of Chemical Engineering. 1994;72(3):511-16.
- [32] Muraza O, Galadima A. Aquathermolysis of heavy oil: A review and perspective on catalyst development. *Fuel*. 2015;157:219-31.
- [33] Hyne JB. Aquathermolysis: A synopsis of work on the chemical reaction between water (steam) and heavy oil sands during simulated steam stimulation. Calgary; 1986.
- [34] Tavakkoli Osgouei Y, Parlaktuna M. Effects of minerals on steam distillation during thermal heavy-oil recovery: An experimental investigation. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*. 2018;40(6):662-72.
- [35] Fan H. The effects of reservoir minerals on the composition changes of heavy oil during steam stimulation. *Journal of Canadian Petroleum Technology*. 2003;42(3):11-14.
- [36] Montgomery W, Sephton MA, Watson JS, Zeng H. The effects of minerals on heavy-oil and bitumen chemistry when recovered by steam-assisted methods. *Journal of Canadian Petroleum Technology*. 2014;54(1):15-17.
- [37] Yi S. Use of Nano-Metal Particles for Promoting Aquathermolysis Reaction during Cyclic Steam Stimulation (Tesis de maestría). University of Alberta; 2017.
- [38] Hamedi Shokrlu Y, Babadagli T. Kinetics of the In-Situ Upgrading of Heavy Oil by Nickel Nanoparticle Catalysts and Its Effect on Cyclic-Steam-Stimulation Recovery Factor. *SPE Res. Eval. & Eng*. 2014;17(3):355-64.
- [39] Zou R, Xu J, Kuffner S, Becker J, Li T, Guan X, *et al.* Spherical poly (vinyl imidazole) brushes loading nickel cations as nanocatalysts for aquathermolysis of heavy crude oil. *Energy*

- and Fuels. 2019;32(2):998-1006.
- [40] COLCIENCIAS. Technology Readiness Levels - TRL. 2017.
- [41] Hassanzadeh H, Galarraga CE, Abedi J, Scott CE, Chen Z, Pereira-Almao P. Modelling of Bitumen Ultradispersed Catalytic Upgrading Experiments in a Batch Reactor. En: Canadian International Petroleum Conference; 2009 Jun 16–18; Calgary, Alberta. OnePetro; 2009. p. 1-5.
- [42] Hendraningrat L, Souraki Y, Torsater O. Experimental Investigation of Decalin and Metal Nanoparticles-Assisted Bitumen Upgrading During Catalytic Aquathermolysis. En: SPE/EAGE European Unconventional Resources Conference and Exhibition; 2014 feb 25-27; Vienna, Austria. OnePetro; 2014. p. 11.
- [43] Rivera Olvera JN, Gutiérrez GJ, Romero Serrano JA, Medina Ovando A, Garibay Febles V, Barriga Arceo LD. Use of unsupported, mechanically alloyed NiWMoC nanocatalyst to reduce the viscosity of aquathermolysis reaction of heavy oil. *Catalysis Communications*. 2014;43:131-35.
- [44] Hao H, Su H, Chen G, Zhao J, Hong L. Viscosity Reduction of Heavy Oil by Aquathermolysis with Coordination Complex at Low Temperature. *The Open Fuels & Energy Science Journal*. 2015;8(1):93-98.
- [45] Shuwa SM, Al-Hajri RS, Mohsenzadeh A, Al-Waheibi YM, Jibril BY. Heavy Crude Oil Recovery Enhancement and In-Situ Upgrading During Steam Injection Using Ni-Co-Mo Dispersed Catalyst. En: SPE EOR Conference at Oil and Gas West Asia; 2016 Mar 21–23; Muscat, Oman. OnePetro; 2016. p. 1-17.
- [46] Kudryashov SI, Afanasiev IS, Petrashov O V, Vakhin AV, Sitnov SA, Akhmediyrov AA, *et al.* Catalytic heavy oil upgrading by steam injection with using of transition metals catalysts. *OIJ*. 2017;8:30-34.
- [47] Foss L, Petrukhina N, Kayukova G, Amerkhanov M, Romanov G, Ganeeva Y. Changes in hydrocarbon content of heavy oil during hydrothermal process with nickel, cobalt, and iron carboxylates. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2018;169:269-276.
- [48] Sitnov SA, Mukhamatdinov II, Vakhin A V, Ivanova AG, Voronina EV. Composition of aquathermolysis catalysts forming in situ from oil-soluble catalyst precursor mixtures. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2018;169:44-50.
- [49] Chávez Morales SM. Experimental and Numerical Simulation of Combined Enhanced Oil Recovery with In Situ (Tesis de doctorado). University of Calgary; 2016.
- [50] Ovalles C, Vallejos C, Vásquez T, Martinis J, Perez-Perez A, Cotte E, *et al.* Extra-Heavy Crude Oil Downhole Upgrading Process using Hydrogen Donors under Steam Injection Conditions. En: SPE International Thermal Operations and Heavy Oil Symposium; 2001 mar 12-14; Porlamar, Margarita Island, Venezuela. OnePetro; 2001. p. 6.
- [51] Ovalles C, Rodríguez H. Extra heavy crude oil downhole upgrading using hydrogen donors under cyclic steam injection conditions: Physical and numerical simulation studies. *J Can Pet Technol*. 2008;47(1):43-51.
- [52] Fan Y, Durlofsky LJ, Tchelepi HA. Numerical Simulation of the In-Situ Upgrading of Oil Shale. *SPE J*. 2010;15(2):368-81.
- [53] Chavez-Morales S, Pereira-Almao P. Experimental and Numerical Simulation of Combined Enhanced Oil Recovery with In Situ Upgrading in a Naturally Fractured Reservoir. En: SPE Latin America and Caribbean Heavy and Extra Heavy Oil Conference; 2016 Oct 19–20; Lima, Peru. OnePetro; 2016. p. 1-19.
- [54] Huang S, Huang Q, Liu H, Cheng L, Fan Z, Zhao L. A modified model for aquathermolysis and its application in numerical simulation. *Fuel*. 2017;207:568-78.
- [55] Nguyen N, Chen Z, Pereira Almao P, *et al.* Reservoir Simulation and Production Optimization of Bitumen/Heavy Oil via Nanocatalytic in Situ Upgrading. *Ind. Eng. Chem. Res*. 2017;56(48):14214-30.
- [56] El-Banbi A, Alzahabi A, El-Maraghi A. Introduction. En: *PVT Property Correlations - Selection and Estimation*. Elsevier; 2018.p. 1-11.
- [57] Zapata NB, Morales Mora OA, Mejía Cárdenas JM. Practical kinetic coupling to multi-component and multi-phase flow transport during in-situ heavy oil upgrading processes using an equation of state-based numerical reservoir simulation. En: SPE Reservoir Characterisation and Simulation Conference and Exhibition; 2019 Sep 17–19; Abu Dhabi, UAE. OnePetro; 2019. p. 1-16.
- [58] Bueno N, Mejía JM. Heavy oil in-situ upgrading evaluation by a laboratory-calibrated EoS-based reservoir simulator. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2021;196:107455.

DOI: 10.1016/j.petrol.2020.107455.

- [59] Lopez Wills CV. Experimental and Numerical Modelling of Hybrid Steam In-Situ Upgrading Process for Immoblie Oil (Tesis de doctorado). University of Calgary; 2020.
- [60] Qaiser Muslim AAA-A. Characterization of Petroleum Fractions. Iraqui Journal for mechanical and material engineering. 2009;9(2):223-38.
- [61] Ancheyta J. Fundamentals of chemical reaction kinetics. En: Chemical Reaction Kinetics - Concepts, Methods and Case Studies. Ciudad de México: John Wiley & Sons; 2017. p. 1-53.
- [62] Phillips CR, Haidar NI, Poon YC. Kinetic models for the thermal cracking of Athabasca bitumen. The effect of the sand matrix. Fuel. 1985;64:678-691.
- [63] Da Silva De Andrade FJ. Kinetic modeling of catalytic in situ upgrading for Athabasca bitumen, deasphalting pitch and vacuum residue (Tesis de maestría). University of Calgary; 2014.
- [64] Fan H, Liu Y, Zhang L, Xiaofei Z. The study on composition changes of heavy oils during steam stimulation processes. Fuel. 2002;81(13):1733-38.
- [65] Loria H, Trujillo-Ferrer G, Sosa-Stull C, Pereira-Almao P. Kinetic modeling of bitumen hydroprocessing at in-reservoir conditions employing ultradispersed catalysts. Energy and Fuels. 2011;25:(4)1364-72.