

Escalamiento de un proceso de combustión in situ a partir de cinética no Arrhenius para un
yacimiento de crudo pesado colombiano

Diego Fernando Pinto Hernández

Trabajo de investigación presentado para optar al título de Magíster en Ingeniería de
Hidrocarburos

Director

Samuel Fernando Muñoz Navarro

Magíster en Ingeniería de Hidrocarburos

Codirector

Alberto Raúl Pinzón Díaz

Magíster en Ingeniería de Hidrocarburos

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería de Petróleos

Maestría en Ingeniería de Hidrocarburos

Bucaramanga

2026

Dedicatoria

A Dios, quien me sostiene en cada momento de mi vida, a quien debo la culminación de este proyecto y quien me ha enseñado su amor incondicional en cada etapa.

A mi madre hermosa, María Olinda Hernández, ejemplo de amabilidad y esfuerzo, quien siempre me ha acompañado en cada proceso, brindándome su ayuda y enseñándome con su vida el valor de la entrega.

¡Mil gracias!

Agradecimientos

A la Universidad Industrial de Santander, mi alma mater, y en especial a mis profesores, por formarme como profesional y por sostener la calidad que la distingue como institución.

A mi director y codirector, a quienes agradezco su ejemplo como profesionales, pues se han convertido en un referente que me motiva a mejorar en este ámbito a cada momento.

Al PhD Adán León, por brindarme su apoyo incondicional y sus conocimientos para la materialización de múltiples investigaciones.

Al Grupo de Investigación de Recobro Mejorado de la Escuela de Petróleos, en donde crecí como profesional, aprendí a investigar y a vincularme con la industria, llevándome una experiencia que valoro profundamente.

Tabla de contenido

	Pág.
Introducción.....	13
Contexto del crudo pesado en Colombia y necesidad de métodos térmicos de recobro mejorado.....	13
Planteamiento del problema.....	15
Pregunta de investigación e hipótesis.....	18
Pregunta de investigación.....	18
Hipótesis.....	18
Justificación y alcance.....	21
Justificación.....	21
Alcance.....	21
Estructura del documento.....	25
1. Objetivos.....	28
1.1 Objetivo general.....	28
1.2 Objetivos específicos.....	28
2. Marco teórico.....	30
2.1 Fundamentos de la combustión in situ.....	30
2.2 Cinética de reacciones y formación de combustible.....	32
2.3 Combustible depositado y factor Cf.....	34
2.4 Régimen autopropagante del frente de combustión.....	37
2.5 Pruebas de tubo de combustión 1D.....	40
2.6 Simulación numérica de combustión in situ en medios porosos.....	45
2.7 Escalamiento y promediado térmico asociado al tamaño de celda.....	47
3. Estado del arte.....	51
3.1 Correlaciones históricas para la estimación del combustible depositado Cf.....	51
3.2 Escalamiento laboratorio-campo y sensibilidad al tamaño de celda.....	57
3.3 Estrategias numéricas para mitigar la dependencia asociada al tamaño de celda.....	62
3.4 Antecedentes experimentales y numéricos en crudos pesados colombianos.....	66
3.5 Brecha de conocimiento.....	69
4. Metodología.....	73
4.1 Visión general del flujo metodológico.....	73
4.2 Fase A: construcción y calibración del modelo 1D de tubo de combustión.....	77

4.2.1 Configuración geométrica y propiedades del sistema.....	77
4.2.2 Modelo cinético.....	80
4.2.3 Calibración experimental.....	85
4.2.4 Variables monitoreadas.....	90
4.3 Fase B: diseño de experimentos y construcción de la correlación de combustible depositado.....	92
4.3.1 Propósito de la Fase B.....	93
4.3.2 Variables candidatas del diseño de experimentos.....	94
4.3.3 Dominio experimental y rangos evaluados.....	96
4.3.4 Uso del flux de aire como variable.....	98
4.3.5 Definición de la zona estable del frente.....	99
4.3.6 Cálculo de la masa inicial de aceite y variables respuesta.....	100
4.3.7 Estructura del DoE.....	101
4.3.8 Criterio de validez de las simulaciones.....	102
4.3.9 Procesamiento de salidas de simulación.....	103
4.3.10 Enfoque estadístico posterior.....	104
4.3.11 Alcance de la Fase B.....	105
4.4 Fase C: implementación de la inicialización del coque en modelos de dimensiones de celda a escala de campo.....	106
5. Calibración y evaluación del modelo numérico de tubo de combustión.....	108
5.1 Modelo inicial.....	108
5.2 Calibración del modelo numérico del tubo de combustión.....	118
5.2.1 Balance energético.....	120
5.2.2 Ajuste del modelo cinético.....	125
5.3 Evaluación del modelo calibrado de tubo de combustión.....	128
5.3.1 Balance energético y dimensionamiento de la disipación térmica.....	129
5.3.2 Esquema cinético extendido.....	130
5.3.3 Validación térmica.....	132
6. Construcción y validación de la correlación de la fracción de aceite inicial convertida en combustible.....	142
6.1 Ejecución y filtrado del diseño de experimentos.....	143
6.2 Análisis exploratorio.....	146
6.3 Selección de variables y forma funcional.....	149

6.4 Verificación multivariada.....	153
6.5 Comparación de modelos y robustez.....	155
6.6 Correlación final.....	156
7. Evaluación de la correlación de combustible depositado y su aplicación en modelos de simulación a escala de laboratorio y campo.....	161
7.1 Introducción y lógica de escalamiento.....	161
7.2 Prueba de concepto en el modelo de tubo de combustión.....	162
7.2.1 Modelo cinético equivalente.....	163
7.2.2 Criterio de inicialización del combustible.....	165
7.2.3 Validación térmica y velocidad del frente.....	167
7.2.4 Ajuste energético de la reacción equivalente.....	170
7.2.5 Validación composicional y parámetros de desempeño.....	172
7.3 Sensibilidad al tamaño de celda en el modelo homogéneo de evaluación.....	176
7.4 Aplicación de la metodología en un modelo con dimensiones de celda a escala de campo	180
7.4.1 Comparación entre esquema cinético convencional e inicialización del coque.....	181
7.4.2 Sensibilidad al tamaño de celda.....	183
7.4.3 Comparación con el método de Nelson y McNeil.....	187
8. Conclusiones.....	191
9. Recomendaciones.....	194
Referencias Bibliográficas.....	196

Lista de tablas

Tabla 1. Métricas físicas y parámetros derivados en una prueba de tubo de combustión 1D. .	43
Tabla 2. Comparativa de correlaciones y métodos históricos para la estimación del combustible depositado.....	56
Tabla 3. Estrategias de escalamiento laboratorio-campo y su relación con la presente investigación.....	61
Tabla 4. Estrategias numéricas para mitigar la dependencia de malla y su complementariedad con la presente investigación.....	65
Tabla 5. Trabajos previos sobre combustión in situ y simulación térmica relacionados con crudos pesados colombianos.....	69
Tabla 6. Brechas de conocimiento identificadas y correspondencia con el aporte de la tesis..	72
Tabla 7. Configuración geométrica y propiedades base del modelo numérico 1D.....	79
Tabla 8. Esquema reaccional adoptado en el modelo numérico 1D.....	82
Tabla 9. Componentes del modelo composicional.....	84
Tabla 10. Variables de referencia para la calibración térmico-reactiva del modelo 1D.....	88
Tabla 11. Variables de salida monitoreadas en el modelo numérico 1D.....	91
Tabla 12. Variables candidatas evaluadas en el diseño de experimentos.....	95
Tabla 13. Estructura general del diseño experimental.....	101
Tabla 14. Salidas principales monitoreadas para el procesamiento de las simulaciones del diseño de experimentos.....	103
Tabla 15. Parámetros de desempeño del modelo inicial del tubo de combustión.....	114
Tabla 16. Variables experimentales empleadas como objetivos de calibración.....	119
Tabla 17. Componentes energéticos usados para acotar la extracción térmica efectiva del modelo	123
Tabla 18. Balance energético.....	130
Tabla 19. Parámetros cinéticos del esquema de cinco reacciones del modelo calibrado.....	131
Tabla 20. Parámetros de desempeño en la zona estable del modelo calibrado.....	140
Tabla 21. Mejores modelos OLS evaluados mediante el BIC.....	150
Tabla 22. Comparación de formas funcionales (lineal y potencial) según métricas de ajuste	152
Tabla 23. Coeficientes del modelo potencial seleccionado para la fracción de combustible.	152
Tabla 24. Rangos de validez de las variables incluidas en la correlación de F_c	157
Tabla 25. Criterios conservados en la reacción equivalente.....	165
Tabla 26. Comparación del balance energético del modelo calibrado y del modelo con inicialización del coque.....	172

Tabla 27. Parámetros de desempeño del modelo del tubo de combustión con inicialización del combustible.....	175
Tabla 28. Configuración geométrica, petrofísica y de discretización de los modelos a escala de campo con malla fina y gruesa.....	184
Tabla 29. Comparación de indicadores entre Nelson y McNeil y el caso CMG ajustado.....	187

Lista de figuras

Figura 1. Esquema conceptual de las zonas formadas durante la combustión in situ.....	31
Figura 2. Regímenes de reacción en función de la temperatura durante la combustión in situ	33
Figura 3. Esquema representativo de una prueba de tubo de combustión 1D.....	42
Figura 4. Perfil térmico axial típico durante una prueba de tubo de combustión.....	44
Figura 5. Efecto del tamaño de celda sobre la temperatura efectiva del frente de combustión	49
Figura 6. Línea de tiempo de métodos y antecedentes para la estimación del combustible depositado.....	55
Figura 7. Ejes de las estrategias de escalamiento laboratorio-campo en combustión in situ....	60
Figura 8. Flujo metodológico general del trabajo.....	76
Figura 9. Configuración geométrica del modelo numérico unidimensional.....	78
Figura 10. Permeabilidad absoluta y curvas de permeabilidad relativa agua-aceite.....	80
Figura 11. Diagrama de la red de reacciones del esquema cinético adoptado.....	83
Figura 12. Esquema de posición de las termocupas en el tubo de combustión.....	86
Figura 13. Flujo metodológico de la calibración térmico-reactiva del modelo 1D.....	87
Figura 14. Esquema conceptual del ajuste energético y control térmico del modelo 1D.....	89
Figura 15. Cobertura del espacio experimental del DoE (n = 146 simulaciones).....	97
Figura 16. Modelo numérico inicial: saturación inicial de aceite y camisa metálica.....	109
Figura 17. Comparación de la velocidad del frente: modelo inicial y resultados experimentales	111
Figura 18. Gases efluentes: comparación experimental y del modelo inicial.....	113
Figura 19. Distribución espacial y temporal del combustible sólido.....	115
Figura 20. Coque consumido acumulado y tasa de consumo.....	117
Figura 21. Capacidad térmica estimada del sistema experimental.....	122
Figura 22. Ventana energética de extracción térmica efectiva.....	125
Figura 23. Comparación de perfiles de temperatura por termocupla.....	134
Figura 24. Evolución espacio-temporal del frente de combustión: comparación experimental y del modelo calibrado.....	135
Figura 25. Comparación de la velocidad del frente: modelo calibrado y resultados experimentales	136
Figura 26. Fracciones molares de gases efluentes.....	138
Figura 27. Cobertura del espacio experimental del DoE y frontera operacional.....	144
Figura 28. Distribución de las tres variables objetivo.....	145
Figura 29. Matriz de correlación de Pearson entre los nueve factores del DoE.....	147

Figura 30. Matriz de correlación de Pearson entre los factores del DoE y las variables objetivo	148
Figura 31. Diagrama de Pareto de coeficientes estandarizados para la fracción de combustible depositado (Fc).....	149
Figura 32. Varianza y biplot del análisis de componentes principales.....	154
Figura 33. Scores VIP del PLS por variable objetivo.....	155
Figura 34. Comparación cuantitativa de modelos para la fracción de combustible.....	156
Figura 35. Superficies de respuesta del modelo seleccionado para el cálculo de la fracción de combustible (Fc).....	158
Figura 36. Desempeño predictivo de la correlación (Fc) vs simulaciones de verificación.....	159
Figura 37. Evolución espacio-temporal del frente de combustión: comparación experimental y del modelo con inicialización del coque.....	168
Figura 38. Validación de la velocidad del frente de combustión: comparación experimental y del modelo con inicialización del coque.....	169
Figura 39. Fracción molar de gases efluentes durante la combustión.....	173
Figura 40. Perfil espacial de temperatura en el modelo con inicialización del coque.....	174
Figura 41. Perfil axial de temperatura en el modelo cinético completo de cinco reacciones.	178
Figura 42. Perfil espacial de temperatura en el modelo con inicialización del coque.....	179
Figura 43. Avance del frente de combustión en modelo a escala de campo con dimensiones de grid diferentes para un tiempo t1.....	182
Figura 44. Avance del frente de combustión en modelo a escala de campo con dimensiones de grid diferentes para un tiempo t2.....	182
Figura 45. Comparación del avance del frente de combustión, representado por el campo de temperatura, en los modelos con cinética de cinco reacciones (a) y con inicialización del coque (b), para mallas de 60 × 60 y 30 × 30 celdas en el modelo a escala de campo.....	185

Resumen

Título: Escalamiento de un proceso de combustión in situ a partir de cinética no Arrhenius para un yacimiento de crudo pesado colombiano*

Autor: Diego Fernando Pinto Hernández**

Palabras Clave: combustión in situ, recuperación mejorada de petróleo, simulación numérica, inicialización del coque, escalamiento, tamaño de malla, crudo pesado.

Descripción:

La combustión in situ es un método térmico de recuperación mejorada de petróleo con potencial para crudos pesados. Sin embargo, su evaluación numérica puede verse afectada por la dependencia de la cinética de reacción respecto al tamaño de celda, lo que dificulta escalar resultados de laboratorio a campo. Esta investigación desarrolla y valida una estrategia basada en la inicialización celda a celda del coque, en la cual su formación dinámica se sustituye por una carga inicial equivalente, reactiva bajo un régimen de alta temperatura.

La fracción de aceite inicial convertida en combustible se estimó mediante una correlación obtenida por diseño de experimentos, en función del flux de aire, la permeabilidad, la porosidad y la saturación inicial de aceite. La estrategia se evaluó primero en el modelo de tubo de combustión y posteriormente en un modelo de campo correspondiente a un cuarto de patrón invertido de cinco pozos. Sus resultados se compararon con un esquema cinético convencional de cinco reacciones, evaluado bajo dos tamaños de celda, y con el método analítico de Nelson y McNeil.

Los resultados muestran que la inicialización del coque mantiene el frente de combustión a escala de campo y preserva su forma, extensión y nivel térmico al modificar el tamaño de celda. En cambio, el esquema convencional presenta pérdida o distorsión del frente cuando se emplean mallas de mayor tamaño. Además, los indicadores integrales presentan concordancia con los estimados mediante el método de Nelson y McNeil, lo que respalda la coherencia volumétrica del proceso simulado. En conclusión, la estrategia propuesta reduce la dependencia numérica asociada al tamaño de celda y permite una evaluación de campo que el enfoque convencional no logra reproducir para este caso.

* Trabajo de investigación

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería de Petróleos. Director: Samuel Fernando Muñoz Navarro, Magíster en Ingeniería de Hidrocarburos. Codirector: Alberto Raúl Pinzón Díaz, Magíster en Ingeniería de Hidrocarburos.

Abstract

Title: Upscaling of an in-situ combustion process based on non-Arrhenius kinetics for a Colombian heavy oil reservoir*

Author: Diego Fernando Pinto Hernández**

Key Words: in-situ combustion, enhanced oil recovery, numerical simulation, coke initialization, upscaling, grid size, heavy oil.

Description:

In-situ combustion is a thermal enhanced oil recovery method with potential application to heavy oil reservoirs. However, its numerical evaluation can be affected by the dependence of reaction kinetics on cell size, which makes it difficult to upscale laboratory results to field scale. This research develops and validates a strategy based on cell-by-cell coke initialization, in which the dynamic formation of solid fuel is replaced by an equivalent initial coke loading, reactive under a high-temperature regime.

The deposited fuel fraction was estimated using a correlation obtained through design of experiments, as a function of air flux, permeability, porosity, and initial oil saturation. The strategy was first evaluated in a one-dimensional combustion tube model and subsequently in a model representing a quarter of an inverted five-spot pattern. Its results were compared with a conventional five-reaction kinetic scheme, evaluated under two spatial discretizations, and with the Nelson and McNeil analytical method.

The results show that coke initialization sustains the combustion front at field scale and preserves its shape, areal extent, and thermal level when cell size is modified. In contrast, the conventional scheme shows loss or distortion of the front when larger cells are used. In addition, the integral indicators show agreement with those estimated using the Nelson and McNeil method, supporting the volumetric consistency of the simulated process. In conclusion, the proposed strategy reduces the numerical dependence associated with cell size and enables a field-scale evaluation that the conventional approach fails to reproduce for this case.

* Research Work

** Faculty of Physicochemical Engineering, School of Petroleum Engineering. Director: Samuel Fernando Muñoz Navarro, Master of Science in Hydrocarbon Engineering. Co-director: Alberto Raúl Pinzón Díaz, Master of Science in Hydrocarbon Engineering.

Introducción

Contexto del crudo pesado en Colombia y necesidad de métodos térmicos de recobro mejorado

Los recursos de crudo pesado, extrapesado y bitumen constituyen una fracción importante de los recursos petroleros mundiales, por lo que su aprovechamiento ha motivado el desarrollo de tecnologías de recobro térmico y mejorado (Antolinez et al., 2023; Taber et al., 1997). En el contexto colombiano, el agotamiento progresivo de los yacimientos convencionales ha incrementado la importancia de los recursos de crudo pesado dentro del portafolio energético nacional. Campos como Chichimene y Castilla se han consolidado como referentes técnicos e industriales para el desarrollo de estrategias de producción y recobro mejorado en Colombia.

La explotación de estos yacimientos mediante métodos de recobro primario y secundario convencional presenta limitaciones técnicas considerables. La alta viscosidad del crudo pesado genera una relación de movilidad desfavorable durante los esquemas tradicionales de inyección de agua, lo que puede favorecer la canalización del fluido desplazante y reducir la eficiencia de barrido volumétrico (Taber et al., 1997). En consecuencia, una proporción importante del hidrocarburo puede permanecer atrapada en el medio poroso bajo mecanismos de empuje natural o secundario.

Como respuesta a estas limitaciones operativas, los métodos térmicos de recobro mejorado se reconocen como una familia de tecnologías particularmente adecuada para crudos de alta viscosidad (Antolinez et al., 2023; Taber et al., 1997). El principio físico de estos procesos consiste en adicionar energía térmica al yacimiento para reducir la viscosidad del aceite y mejorar su movilidad hacia los pozos productores. Históricamente, las tecnologías basadas en la inyección

continua o cíclica de vapor han tenido amplia aplicación en la industria térmica, aunque su desempeño puede verse restringido en yacimientos profundos por pérdidas de calor durante la inyección y por los requerimientos de agua y de facilidades de superficie.

En escenarios donde la inyección de vapor presenta restricciones técnicas o económicas, la combustión in situ surge como un método candidato de interés. Consiste en inyectar aire, o gas enriquecido con oxígeno, para promover reacciones de oxidación de una fracción del aceite o del combustible depositado en el medio poroso. Estas reacciones generan un frente de alta temperatura que avanza a través del yacimiento y contribuye a la reducción de viscosidad, al desplazamiento por gases de combustión, a la destilación de fracciones livianas y, bajo ciertas condiciones, al mejoramiento in situ del aceite residual (Antolinez et al., 2023). Su principal atractivo radica en que una parte importante de la energía térmica se genera dentro de la formación, aunque el proceso exige un control termodinámico, cinético e hidrodinámico riguroso.

En el panorama nacional, el interés por la combustión in situ en crudos pesados se ha sustentado en diversos análisis experimentales y numéricos orientados a estudiar el comportamiento oxidativo del sistema roca-fluido, la influencia del agua y de la matriz mineral sobre la ignición, y la formación de combustible depositado (Padilla Reyes, 2016; Pinzón Díaz, 2018; Yatte Garzón, 2011). Estos antecedentes soportan la relevancia de evaluar los procesos de inyección de aire y combustión in situ como alternativas térmicas para el aprovechamiento de crudos pesados colombianos.

No obstante, la transferencia de resultados de laboratorio hacia modelos de campo es uno de los principales retos de la simulación de combustión in situ. La literatura ha señalado que los parámetros ajustados en pruebas de tubo no necesariamente conservan su representatividad al implementarse en modelos con celdas de mayor tamaño, debido a efectos de escalamiento,

representación numérica del frente y promediado térmico (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). Esta brecha entre la caracterización experimental y la predicción a escala de campo constituye el problema técnico que motiva la presente investigación.

Planteamiento del problema

La evaluación técnica y económica de la combustión in situ requiere herramientas de simulación numérica capaces de representar con suficiente confiabilidad el desempeño esperado del proceso a escala de campo. En estos procesos, los simuladores térmicos permiten integrar fenómenos de flujo multifásico, transferencia de masa y energía, generación y consumo de calor, consumo de oxígeno y reacciones químicas asociadas a la oxidación del crudo y del combustible depositado (Belgrave et al., 1993; Crookston et al., 1979; Grabowski et al., 1979; Gutiérrez et al., 2012). Por esta razón, la simulación numérica constituye una herramienta central para analizar escenarios de diseño, reducir incertidumbre técnica y orientar decisiones previas a la implementación de pruebas piloto o desarrollos de campo (Gutiérrez et al., 2012; Kovsky et al., 2013).

La construcción de modelos predictivos de combustión in situ suele apoyarse en información experimental obtenida mediante pruebas de laboratorio, tales como celdas de oxidación de temperatura y tubos de combustión unidimensionales. Estos ensayos permiten estimar parámetros cinéticos aparentes o efectivos del sistema roca-fluido, así como caracterizar variables relevantes del proceso, entre ellas la temperatura máxima alcanzada, la velocidad de propagación del frente, el consumo de oxígeno, la eficiencia de combustión y la cantidad de

combustible disponible o depositado en el medio poroso (Penberthy y Ramey, 1966; Pinzón Díaz, 2018; Wu y Fulton, 1971). Sin embargo, estos parámetros se obtienen bajo condiciones controladas, con geometrías simplificadas y escalas espaciales mucho menores que las de un yacimiento real (Gutiérrez et al., 2012; Penberthy y Ramey, 1966).

La transferencia directa de información desde pruebas de tubo 1D hacia modelos con dimensiones a escala de campo presenta una dificultad fundamental de escalamiento. En primer lugar, existen diferencias físicas y experimentales, un tubo de combustión no reproduce completamente efectos tridimensionales como segregación gravitacional, heterogeneidad lateral, canalización, variaciones areales de permeabilidad o interacción compleja entre pozos (Gutiérrez et al., 2012; Wilson et al., 1958; Wu y Fulton, 1971). En segundo lugar, existe una limitación numérica asociada a la discretización espacial: mientras que en laboratorio el frente térmico puede representarse con una resolución fina, en modelos de campo se emplean celdas de mayor tamaño por restricciones computacionales (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). Esta diferencia de escala afecta directamente la forma en que el simulador representa la zona de reacción (Coats, 1983; Nissen et al., 2015).

El problema se acentúa por el efecto del tamaño de celda. El frente de combustión corresponde a una zona de reacción estrecha en comparación con las dimensiones típicas de una celda de campo (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012). En modelos de laboratorio o en mallas finas, dicha zona puede resolverse con mayor detalle, permitiendo representar gradientes térmicos pronunciados y temperaturas locales elevadas (Penberthy y Ramey, 1966; Wu y Fulton, 1971). En cambio, cuando el modelo de campo utiliza celdas gruesas, el cálculo numérico asigna a la celda una temperatura efectiva promedio que representa simultáneamente la zona reactiva caliente y el volumen de roca y fluidos aún no calentados (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al.,

2015). Como resultado, la temperatura efectiva usada para calcular las reacciones puede diferir de la temperatura local real del frente (Coats, 1983; Nissen et al., 2015).

Esta diferencia es crítica porque las reacciones de oxidación en simuladores térmicos se representan comúnmente mediante expresiones cinéticas tipo Arrhenius (Belgrave et al., 1993; Gutiérrez et al., 2012; Mamora, 1993). La formulación de Arrhenius no es incorrecta desde el punto de vista químico; el problema surge cuando la temperatura usada por el simulador no corresponde a la temperatura local del frente reactivo, sino a una temperatura promedio afectada por el tamaño de celda (Coats, 1983; Nissen et al., 2015). Debido a la dependencia exponencial de la tasa de reacción con la temperatura, una reducción artificial de la temperatura efectiva puede disminuir de forma significativa las velocidades de reacción calculadas (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). En consecuencia, la cinética calibrada en laboratorio puede perder capacidad predictiva al implementarse en modelos de campo donde el frente de combustión no está adecuadamente resuelto (Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015).

Las consecuencias de este efecto pueden comprometer la evaluación del proceso a escala de yacimiento. Una representación térmica inadecuada puede producir extinción numérica prematura, velocidad de frente errónea, temperatura pico subestimada, consumo de oxígeno mal estimado y cálculo incorrecto del combustible depositado o consumido (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). Asimismo, puede generar predicciones de recobro dependientes del tamaño de malla, de manera que los resultados reflejen más una limitación numérica del modelo que el comportamiento físico del sistema roca-fluido (Coats, 1983; Nissen et al., 2015; Sadeghi et al., 2007). Este aspecto es especialmente relevante en combustión in situ, donde pequeñas variaciones en la temperatura efectiva pueden modificar la continuidad de las reacciones y, por

tanto, la estabilidad de propagación del frente (Akkutlu y Yortsos, 2003; Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012).

A partir de estas consideraciones, se identifica una brecha conceptual y técnica en la simulación de procesos de combustión in situ a escala de campo. El reto no consiste únicamente en ajustar un modelo cinético a datos de laboratorio, sino en conservar, durante el escalamiento, los rasgos físicos esenciales del frente de combustión: temperatura efectiva, propagación, consumo de oxígeno y disponibilidad de combustible (Gutiérrez et al., 2012; Kavscek et al., 2013; Nissen et al., 2015). En ausencia de una estrategia de escalamiento adecuada, la predicción del desempeño puede quedar dominada por el tamaño de celda y por el promediado térmico, en lugar de responder principalmente al comportamiento físico del sistema roca-fluido (Coats, 1983; Nissen et al., 2015; Sadeghi et al., 2007).

Pregunta de investigación e hipótesis

A partir del problema de escalamiento descrito en la sección anterior, se reconoce que la simulación numérica de combustión in situ a escala de campo requiere estrategias que reduzcan la pérdida de representatividad térmica asociada al tamaño de celda y al promediado de temperatura en mallas gruesas (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). En este contexto, el problema no consiste únicamente en ajustar una cinética de reacción en condiciones de laboratorio, sino en conservar, durante la transferencia hacia modelos a escala de campo, los rasgos físicos esenciales del frente de combustión: propagación, temperatura efectiva, consumo de oxígeno y disponibilidad de combustible.

Pregunta de investigación

¿En qué medida la inicialización celda a celda del coque, obtenida a partir de una correlación empírico-numérica multivariable, permite conservar la representación del frente de combustión in situ al escalar de laboratorio a campo, reduciendo la dependencia numérica asociada al tamaño de celda en un sistema roca-fluido colombiano?

La formulación de la hipótesis de investigación se fundamenta en dos elementos físicos. Primero, bajo condiciones de propagación estable, el frente de combustión in situ puede aproximarse como una estructura de propagación estacionaria tipo onda viajera, en la cual la zona reactiva mantiene una organización interna durante su desplazamiento (Akkutlu y Yortsos, 2003). Segundo, los estudios experimentales de las zonas que preceden al frente de combustión muestran la presencia de regiones térmicas y de saturación relativamente definidas, como la meseta de vapor y el banco de agua, que condicionan la disponibilidad de aceite y la formación de combustible delante de la zona de reacción (Wilson et al., 1958; Wu y Fulton, 1971). Desde esta perspectiva, la cantidad de combustible depositado puede tratarse como una variable localmente estimable a partir de propiedades del sistema roca-fluido y de condiciones operacionales, como el flux de aire, dentro de un dominio de aplicación definido.

Hipótesis

Si el combustible sólido disponible para la combustión puede estimarse localmente mediante una correlación empírico-numérica multivariable, basada en la depositación de coque observada para un sistema roca–fluido colombiano y ampliada mediante simulaciones controladas, entonces su incorporación controlada celda a celda en un modelo de dimensiones a escala de campo debería permitir representar el avance del frente de combustión con menor sensibilidad numérica al tamaño de malla, en comparación con una simulación convencional basada en la generación dinámica del combustible mediante el esquema cinético convencional del simulador (Coats, 1983; Nissen et al., 2015), dentro del dominio de variables evaluado.

Esta hipótesis es falsable. Quedaría refutada si la inicialización del coque no reduce la sensibilidad al tamaño de celda, si no reproduce de manera coherente la velocidad de propagación del frente, si genera perfiles térmicos no físicos, o si conduce a consumos de oxígeno, consumo de combustible e indicadores integrales de desempeño incompatibles con los balances esperados del proceso. En estos indicadores se consideran el aire acumulado inyectado, la relación aire/aceite, el aceite producido, el factor de recobro y la relación CO_2/CO , ya que permiten evaluar no solo la estabilidad térmica del frente, sino también la coherencia volumétrica de la simulación. Por tanto, su evaluación requiere simulaciones comparativas que permitan contrastar el comportamiento del frente, la temperatura, el consumo de oxígeno, la estabilidad de propagación, la dependencia de malla y la respuesta global del sistema. Estos criterios orientan los objetivos específicos que se presentan en la siguiente sección.

Justificación y alcance

Justificación

La combustión in situ constituye un método de recobro térmico mejorado de interés para crudos pesados, debido a que parte de la energía requerida para movilizar el aceite se genera directamente dentro del medio poroso mediante reacciones de oxidación. A diferencia de los procesos térmicos basados en la inyección externa de calor, como la inyección de vapor, la combustión in situ aprovecha el oxígeno inyectado para sostener un frente reactivo que promueve la reducción de viscosidad, el desplazamiento térmico y la generación de gases de combustión. No obstante, su potencial técnico no se ha traducido en una aplicación generalizada, debido a la dificultad de controlar y predecir su comportamiento a escala de campo mediante herramientas convencionales de simulación numérica.

Una de las principales limitaciones en la simulación de combustión in situ se reconoció desde los trabajos clásicos sobre simulación a escala de campo, y continúa discutiéndose en la literatura moderna de escalamiento (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). Al transferir un modelo calibrado en pruebas de tubo hacia un modelo de yacimiento, el incremento en el tamaño de las celdas computacionales puede distorsionar la temperatura efectiva asociada al frente de combustión. Dado que las expresiones cinéticas tipo Arrhenius empleadas en los simuladores térmicos comerciales presentan una dependencia exponencial con la temperatura, el promediado térmico en celdas de mayor tamaño altera de forma apreciable las tasas de reacción calculadas. Esto se manifiesta como pérdida de velocidad del frente, alteración de la temperatura

pico, formación no representativa de combustible o, incluso, la extinción numérica prematura de un frente que, bajo condiciones físicas adecuadas, podría mantenerse autosostenido.

Las estrategias propuestas para abordar este problema presentan limitaciones prácticas. El refinamiento adaptativo de malla mejora la resolución espacial del frente, pero incrementa el costo computacional y resulta poco viable para modelos de campo de mayor escala (Zhu, 2011). Los métodos de escalamiento explícito de parámetros cinéticos dependientes del tamaño de celda buscan corregir la sensibilidad de la cinética a la malla, aunque suelen requerir calibraciones específicas para cada discretización y sistema evaluado (Nissen et al., 2015; Sadeghi et al., 2007). Por su parte, las herramientas avanzadas disponibles en los simuladores comerciales contribuyen al control numérico del proceso, pero no reemplazan la necesidad de una metodología físicamente trazable para transferir la información experimental hacia modelos de campo.

En este contexto, la presente investigación propone una estrategia de escalamiento centrada en el combustible depositado como variable física de enlace entre la escala de laboratorio y la escala de campo. Bajo condiciones de propagación estable, el frente de combustión puede aproximarse como una estructura de avance estacionario, en régimen autopropagante, y las zonas que lo preceden describen regiones térmicas y de saturación relativamente definidas (Akkutlu y Yortsos, 2003; Lu y Yortsos, 2001; Wilson et al., 1958; Wu y Fulton, 1971). Esta regularidad permite plantear que la cantidad de combustible sólido disponible para la oxidación puede estimarse localmente a partir de las propiedades petrofísicas y de las condiciones operacionales, como el flux de aire.

La implementación de esta estimación como inicialización explícita del coque celda a celda no se plantea como un artificio numérico aislado, sino como una forma de trasladar al modelo de campo una condición física inferida de la estabilidad del frente y de la disponibilidad local de

combustible. En lugar de depender exclusivamente de la generación dinámica del combustible bajo una cinética sensible al tamaño de celda, la metodología busca representar de manera controlada la cantidad de combustible que sostiene la zona de alta temperatura, preservando el balance de masa y la coherencia térmica del proceso.

El aporte de esta investigación consiste en formular una correlación multivariable cerrada para estimar el combustible depositado, construida mediante simulaciones controladas y diseño de experimentos. A diferencia de las tendencias de depositación reportadas previamente de forma experimental y variable por variable, esta formulación integra en una sola expresión las propiedades relevantes del sistema roca-fluido y de operación, lo que permite implementarla directamente en un modelo con celdas de dimensiones a escala de campo y evaluar de forma explícita su sensibilidad al tamaño de malla.

Como resultado, se espera proponer una estrategia metodológica reproducible y físicamente justificada para la simulación numérica de combustión in situ, orientada a conectar la caracterización experimental, la estimación del combustible depositado y la evaluación a escala de campo.

Alcance

Esta investigación desarrolla e implementa una metodología de escalamiento numérico para la simulación de combustión in situ a escala de campo, aplicada a un sistema roca-fluido de crudo pesado colombiano representativo, utilizando CMG STARS 2021 como herramienta de simulación numérica.

El trabajo comprende cuatro componentes principales. Primero, la calibración de un modelo numérico unidimensional de tubo de combustión, a partir de los datos experimentales disponibles en la literatura para el sistema roca-fluido de interés. Segundo, la construcción de una correlación multivariable cerrada para estimar el combustible depositado (F_c), mediante diseño de experimentos, considerando variables como el flux de aire, la porosidad, la saturación inicial de aceite y la presión, dentro de los rangos operativos definidos para el caso de estudio. Tercero, la implementación de la inicialización del coque celda a celda en un modelo con celdas de dimensiones a escala de campo, conservando el balance de masa entre el aceite pesado, el combustible sólido y los productos de reacción, así como el control de la activación térmica del frente. Cuarto, la evaluación de la sensibilidad al tamaño de malla mediante escenarios comparativos, utilizando como métricas la velocidad de propagación del frente, la temperatura máxima, la distribución espacial de oxígeno y la generación de gases efluentes, junto con los parámetros de desempeño del proceso, entre ellos el requerimiento de aire, el requerimiento de combustible, la relación aire-combustible y el factor de recobro, que permiten caracterizar de forma integrada el comportamiento del frente y contrastarlo con el método analítico de Nelson y McNeil.

El estudio se concentra en la dimensión numérica del escalamiento, de modo que se apoya en datos experimentales ya disponibles en la literatura y no contempla la ejecución de nuevas pruebas de laboratorio, la implementación de un piloto de inyección de aire ni el desarrollo de un simulador térmico propio. La estrategia propuesta opera dentro de la arquitectura de CMG STARS y se centra en introducir el combustible depositado como una condición inicial controlada y físicamente estimada, aprovechando los motores de cálculo del simulador sin requerir modificaciones en su formulación interna.

Los resultados son aplicables dentro del dominio de los datos experimentales, las condiciones petrofísicas y los rangos operacionales empleados para construir la correlación. En consecuencia, su aplicación a crudos de composición diferente, a yacimientos de mayor heterogeneidad, a regímenes de combustión distintos o a geometrías de inyección no evaluadas admite una recalibración de la metodología bajo el mismo marco propuesto. Esta delimitación precisa el dominio de validez de la metodología y orienta su uso dentro de las condiciones para las cuales fue construida.

Estructura del documento

El documento se organiza en nueve secciones numeradas, precedidas por esta introducción. Las secciones 1 a 7 presentan los objetivos y el desarrollo de la investigación; las secciones 8 y 9 reúnen las conclusiones y las recomendaciones.

La introducción presenta el contexto de los crudos pesados en Colombia, la necesidad de métodos térmicos de recobro mejorado y la combustión in situ como alternativa tecnológica. Asimismo, expone el problema de escalamiento entre las pruebas de laboratorio y los modelos de campo, y formula la pregunta de investigación, la hipótesis, la justificación y el alcance del estudio. El Capítulo 1 reúne el objetivo general y los objetivos específicos que orientan la investigación.

El Capítulo 2 desarrolla el marco teórico necesario para comprender el proceso de combustión in situ. En este capítulo se describen los fundamentos físicos y químicos del proceso, los regímenes de oxidación, la formación y el consumo del combustible depositado, el régimen

autopropagante del frente, las pruebas de tubo de combustión, la simulación térmica en medios porosos y el efecto del tamaño de celda sobre la representación numérica del frente.

El Capítulo 3 presenta el estado del arte relacionado con el escalamiento de la combustión in situ. Se revisan antecedentes sobre la estimación del combustible depositado, el escalamiento laboratorio-campo, la sensibilidad al tamaño de celda, las estrategias numéricas orientadas a reducir la dependencia de malla y los estudios desarrollados en crudos pesados colombianos. Con esto, se identifica la brecha de conocimiento que sustenta el aporte de la presente investigación.

El Capítulo 4 describe la metodología de investigación. Allí se presenta el flujo de trabajo seguido para desarrollar la estrategia propuesta, desde la construcción y calibración del modelo unidimensional de tubo de combustión hasta la definición del diseño de experimentos, la formulación de la correlación de combustible depositado y su incorporación como inicialización del coque en modelos de simulación de mayor escala. También se establecen las métricas físicas del frente de combustión, los parámetros de desempeño del proceso, los criterios de comparación y las limitaciones de la metodología.

El Capítulo 5 expone los resultados asociados a la verificación y ajuste del modelo numérico unidimensional de tubo de combustión. En este capítulo se analiza la respuesta térmica, composicional y reactiva del modelo frente a la información experimental disponible, considerando la propagación del frente, la temperatura, el consumo de oxígeno, la generación de gases efluentes, los balances del proceso y los parámetros de desempeño calculados sobre la zona estable. Estos resultados constituyen la base numérica para la construcción posterior de la correlación de combustible depositado.

El Capítulo 6 presenta la ejecución y análisis del diseño de experimentos utilizado para construir la correlación empírico-numérica de la fracción de crudo inicial convertida en

combustible. En este capítulo se describen el filtrado de simulaciones numéricas válidas, el análisis exploratorio de variables, la selección de variables independientes, la comparación de formas funcionales, la validación estadística de la correlación, la interpretación física de sus coeficientes y su dominio de aplicación. El producto central de este capítulo es una expresión multivariable cerrada que permite estimar el combustible disponible para la inicialización del coque celda a celda.

El Capítulo 7 evalúa la aplicación de la correlación en modelos de simulación de complejidad creciente, desde el tubo de combustión hasta modelos con dimensiones de celda a escala de campo. En este capítulo se contrasta la inicialización del coque frente al esquema cinético convencional, analizando la propagación del frente, la respuesta térmica, el consumo de combustible y la sensibilidad al tamaño de celda. Además, se comparan indicadores integrales del modelo con los estimados mediante el método de Nelson y McNeil, diferenciando las verificaciones de consistencia de aquellos indicadores que aportan una evaluación comparativa más independiente del desempeño del proceso.

Finalmente, el Capítulo 8 presenta las conclusiones: sintetiza los principales hallazgos, responde la pregunta de investigación, contrasta la hipótesis y precisa los aportes metodológicos. El Capítulo 9 reúne las recomendaciones y propone líneas futuras para extender la estrategia a sistemas con mayor heterogeneidad, geometrías de campo más complejas y esquemas dinámicos de operación.

Esta organización mantiene una secuencia lógica entre el problema de investigación, los objetivos, el fundamento físico, la revisión crítica de antecedentes, la metodología propuesta, la calibración del modelo base, la construcción de la correlación, la evaluación numérica de la inicialización del coque, las conclusiones y las recomendaciones de la tesis.

1. Objetivos

1.1 Objetivo general

Escalar un proceso de combustión in situ para un yacimiento de crudo pesado colombiano, mediante la incorporación del combustible depositado como parámetro de escalamiento en la simulación numérica de yacimientos, con el fin de reducir la dependencia del tamaño de celda y mejorar la representación del frente de combustión a escala de campo.

1.2 Objetivos específicos

- Seleccionar un modelo de escalamiento cinético no convencional, basado en información experimental de pruebas de laboratorio reportadas en la literatura, que permita estimar la cantidad de combustible depositado requerida para la oxidación de un sistema roca-fluido de crudo pesado.
- Determinar los parámetros de diseño del proceso de combustión in situ a escala piloto de campo, a partir de metodologías ingenieriles y resultados experimentales disponibles en la literatura.
- Desarrollar un modelo de simulación numérica para un yacimiento de crudo pesado colombiano en dimensiones de celda a escala de campo o piloto de campo,

incorporando la cantidad de combustible depositado y los parámetros de diseño del proceso.

- Calcular las variables operativas escaladas del proceso de combustión in situ mediante simulación numérica de yacimientos, empleando cinética no Arrhenius y comparando los comportamientos de los perfiles de temperatura y composición de los gases efluentes con los obtenidos en laboratorio.

2. Marco teórico

Este capítulo presenta los conceptos necesarios para comprender el escalamiento numérico de un proceso de combustión in situ en crudos pesados. El énfasis se concentra en los fundamentos físicos y químicos del proceso, la formación y consumo del combustible depositado, el régimen autopropagante del frente, las pruebas de tubo de combustión, la simulación térmica de procesos reactivos y el efecto del tamaño de celda en modelos de campo. Se excluyen desarrollos metodológicos extensos y revisiones autor por autor, los cuales se desarrollan en los capítulos de estado del arte y metodología.

2.1 Fundamentos de la combustión in situ

La combustión in situ, ISC por sus siglas en inglés, es un método térmico de recobro mejorado aplicado principalmente a yacimientos de crudo pesado y alta viscosidad. El proceso consiste en inyectar aire u otro gas oxidante al yacimiento para promover reacciones de oxidación entre el oxígeno y una fracción del aceite o del combustible depositado en el medio poroso. Estas reacciones liberan energía térmica dentro de la formación, reducen la viscosidad del aceite y favorecen su desplazamiento hacia los pozos productores (Ruiz et al., 2013; Sarathi, 1999).

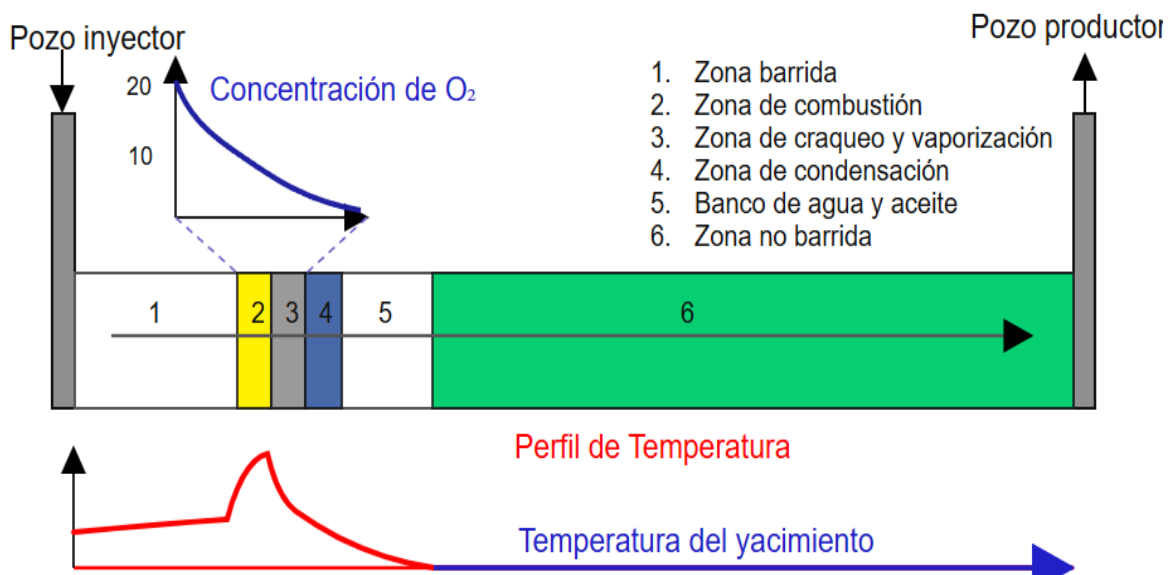
A diferencia de los métodos térmicos en los que el calor se genera en superficie y luego se transfiere al yacimiento, la combustión in situ produce parte de la energía térmica directamente dentro del medio poroso. Esta característica permite reducir pérdidas de calor asociadas al transporte de energía desde superficie y hace que el proceso sea atractivo en yacimientos donde la inyección de vapor puede presentar limitaciones por profundidad, disponibilidad de agua, espesor productivo o eficiencia térmica. Sin embargo, su implementación requiere controlar

adecuadamente la inyección de aire, la ignición, la propagación del frente reactivo, el consumo de oxígeno y la disponibilidad de combustible sólido.

Durante el avance del frente de combustión se generan zonas térmicas y de saturación que pueden describirse de forma idealizada desde el pozo inyector hacia el pozo productor. Estas zonas incluyen una región posterior al frente o zona barrida térmicamente, una zona de oxidación de alta temperatura, una zona de craqueo y vaporización, una zona de condensación o meseta de vapor, un banco de agua, un banco de aceite y una región no afectada térmicamente. Esta representación conceptual se resume en la Figura 1.

Figura 1

Esquema conceptual de las zonas formadas durante la combustión in situ



Nota. Adaptado de Yatte Garzón (2011).

La zona de oxidación de alta temperatura es la región donde el oxígeno reacciona con el combustible disponible y se libera una fracción importante de la energía del proceso. Delante de esta zona se producen fenómenos de vaporización, craqueo, condensación y desplazamiento de fluidos. Detrás del frente queda una región sometida previamente a altas temperaturas, con menor

saturación de aceite y circulación del gas inyectado. En yacimientos reales, estas zonas no siempre se identifican de manera nítida debido a la heterogeneidad, la segregación gravitacional, la canalización de gas y la superposición de procesos térmicos y composicionales.

2.2 Cinética de reacciones y formación de combustible

El desempeño de la combustión in situ depende de la secuencia de reacciones químicas que ocurren entre el oxígeno inyectado, el aceite, los componentes pesados del crudo y el combustible sólido formado en el medio poroso. Estas reacciones suelen agruparse en tres intervalos: oxidación a baja temperatura (LTO), reacciones de temperatura intermedia asociadas al craqueo térmico y a la formación de combustible depositado, y oxidación a alta temperatura (HTO). Esta clasificación permite simplificar la descripción de un sistema químicamente complejo y vincular los regímenes de reacción con la temperatura, el consumo de oxígeno y la generación de calor (Belgrave et al., 1993; Burger y Sahuquet, 1972).

Las reacciones LTO se caracterizan por la incorporación de oxígeno a moléculas de hidrocarburos y por la formación de compuestos oxigenados, tales como alcoholes, aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos e hidroperóxidos. Estas reacciones pueden contribuir al incremento inicial de la temperatura, pero una exposición prolongada a oxidación de baja temperatura puede favorecer la formación de fracciones más pesadas y aumentar la viscosidad del crudo. Por esta razón, en procesos ISC se busca alcanzar y sostener condiciones de oxidación de alta temperatura cuando el objetivo es mantener un frente reactivo estable (Adegbesan et al., 1987; Dabbous y Fulton, 1974; Khansari, 2014).

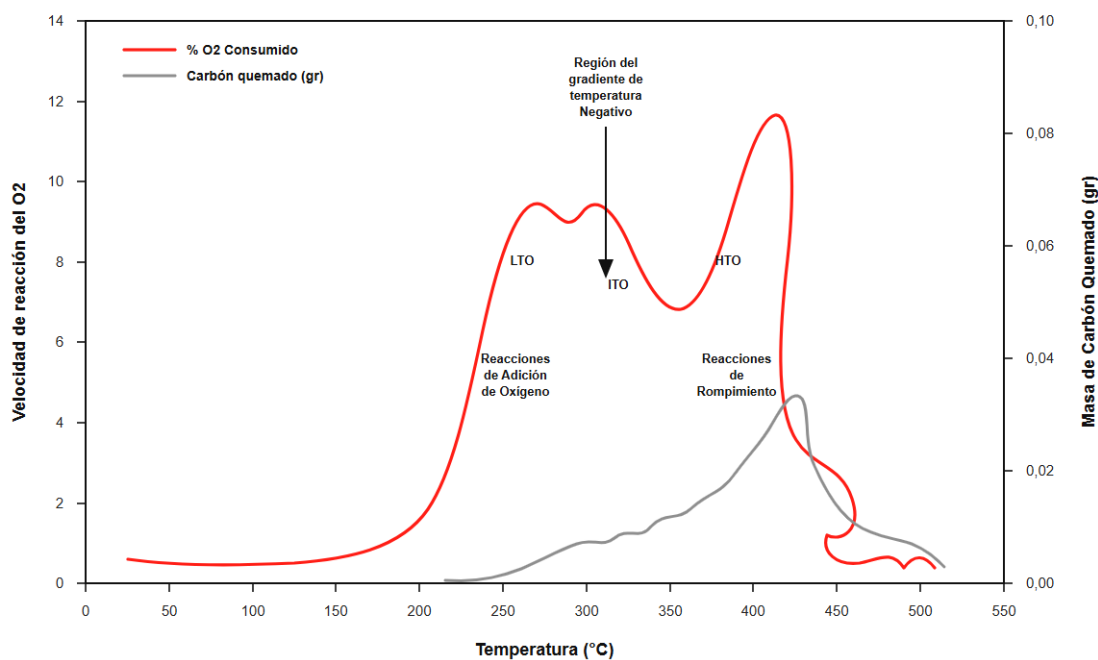
En el intervalo de temperatura intermedia ocurren procesos de craqueo, deshidrogenación y condensación, los cuales transforman fracciones pesadas del aceite en residuos ricos en carbono de baja volatilidad. Estos residuos se asocian comúnmente con el coque o combustible depositado,

que posteriormente puede oxidarse en el frente de alta temperatura. La cantidad y naturaleza de este combustible condicionan la intensidad de la reacción, la temperatura máxima del frente y la velocidad de propagación (Burger y Sahuquet, 1972; Freitag y Exelby, 2006; Hayashitani et al., 1978).

Las reacciones HTO se desarrollan a temperaturas superiores a las de la región intermedia y se caracterizan por la oxidación del combustible sólido o de fracciones pesadas del aceite, con generación de dióxido de carbono, monóxido de carbono, agua y calor. Estas reacciones son esenciales para sostener el frente de combustión y para transferir energía térmica al aceite ubicado delante del frente (Burger y Sahuquet, 1972; Lin et al., 1991; Mamora, 1993; Ren et al., 2007). La relación entre estos regímenes y la temperatura se resume en la Figura 2.

Figura 2

Regímenes de reacción en función de la temperatura durante la combustión in situ



Nota. Adaptado de Glatz (2012).

En simulación numérica, la velocidad de reacción suele representarse mediante expresiones cinéticas tipo Arrhenius, donde la tasa depende de la temperatura, la concentración de oxígeno, la concentración de combustible y parámetros como la energía de activación y el factor pre-exponencial. La formulación de Arrhenius es químicamente consistente para describir reacciones activadas térmicamente; sin embargo, su aplicación en modelos de campo puede ser sensible a la temperatura efectiva calculada en cada celda. Esta característica será relevante al discutir el problema de escalamiento y el efecto del tamaño de malla.

2.3 Combustible depositado y factor C_f

El combustible depositado corresponde a la fracción orgánica de baja volatilidad, generalmente rica en carbono, que permanece retenida en el medio poroso durante los procesos térmicos y oxidativos asociados a la combustión in situ. En la literatura, esta fracción se asocia frecuentemente con coque; sin embargo, no debe interpretarse necesariamente como un compuesto puro ni de composición única. Su naturaleza depende de la composición del crudo, del contenido de fracciones pesadas, de la mineralogía de la roca, de la presión, de la saturación de aceite, del flux de aire y de la historia térmica y oxidativa del sistema roca-fluido (Burger y Sahuquet, 1972; Hascakir et al., 2013; Mamora, 1993; Vossoughi y El-Shoubary, 1989).

La formación del combustible depositado está relacionada con la secuencia de procesos que ocurre por delante y dentro de la zona reactiva. Durante el calentamiento del crudo, las fracciones livianas pueden vaporizarse o desplazarse, mientras que las fracciones más pesadas pueden experimentar oxidación parcial, craqueo térmico, condensación y polimerización. Estos procesos favorecen la generación de residuos ricos en carbono de baja volatilidad que quedan

retenidos en la roca y que posteriormente pueden ser consumidos en la zona de oxidación de alta temperatura. Por tanto, el combustible depositado no representa simplemente aceite residual inmóvil, sino una fracción transformada del sistema hidrocarburo-roca con capacidad de liberar energía mediante oxidación (Burger y Sahuquet, 1972; Hascakir et al., 2013; Mamora, 1993; Vossoughi y El-Shoubary, 1989).

Desde el punto de vista físico, el combustible depositado constituye una variable crítica porque representa la fuente local de energía que sostiene la propagación del frente de combustión. Su cantidad controla la energía liberada por unidad de volumen de roca, el consumo de oxígeno, la temperatura máxima alcanzada y la velocidad de avance del frente. Una cantidad insuficiente de combustible puede comprometer la continuidad de la propagación, mientras que una disponibilidad excesiva puede incrementar el consumo de oxígeno, elevar la temperatura del frente y modificar su velocidad de avance. En consecuencia, su estimación es fundamental para el diseño, la interpretación experimental y la simulación numérica de procesos de combustión in situ (Burger y Sahuquet, 1972; Gates y Ramey, 1980; Pinzón Díaz, 2018).

El factor de combustible depositado, C_f , se utiliza para cuantificar la cantidad de combustible formado o disponible bajo condiciones específicas del sistema. Dependiendo de la convención utilizada por cada autor o metodología, puede expresarse como masa de combustible por unidad de volumen de roca, masa de combustible por masa de roca, o cantidad de combustible asociada a un volumen de roca barrido por el frente. Por esta razón, al comparar valores de C_f entre estudios, es necesario verificar la definición operacional, las unidades empleadas y las condiciones experimentales bajo las cuales fue estimado (Alexander et al., 1962; Gates y Ramey, 1980; Pinzón Díaz, 2018).

Diversos trabajos clásicos han relacionado la disponibilidad de combustible con propiedades del crudo, condiciones de operación y resultados de pruebas de tubo. Alexander et al. (1962) estudiaron factores que afectan la disponibilidad y composición del combustible durante la combustión in situ, mientras que Gates y Ramey (1980) incorporaron el combustible disponible dentro de metodologías de ingeniería para estimar parámetros de diseño y desempeño del proceso. Estos antecedentes muestran que C_f ha sido reconocido históricamente como una variable central para el cálculo de requerimientos de aire, avance del frente y recuperación esperada.

No obstante, el valor de C_f no debe considerarse una constante universal. La depositación de combustible depende de múltiples variables, entre ellas el flux de aire, la porosidad, la saturación inicial de aceite, la presión, la permeabilidad, la composición del crudo, el contenido de asfaltenos y resinas, y la actividad catalítica de la matriz mineral. La mineralogía puede modificar la reactividad del crudo y favorecer rutas de condensación, polimerización u oxidación que afectan la cantidad y naturaleza del residuo o coque formado (Pinzón Díaz, 2018; Ranjbar, 1993).

En crudos pesados, la cuantificación de C_f adquiere especial importancia porque las fracciones pesadas del aceite tienen una contribución significativa en la formación del combustible que sostiene la zona de alta temperatura. Estudios experimentales reportados para sistemas roca-fluido colombianos han mostrado que variables como el flux de aire y las propiedades del medio poroso influyen en la cantidad de combustible depositado, lo que convierte a C_f en un parámetro relevante para la interpretación de pruebas de laboratorio y para su posterior transferencia a modelos numéricos (Pinzón Díaz, 2018).

En el contexto de la simulación numérica, C_f permite enlazar la caracterización experimental con la representación del frente de combustión en modelos de mayor escala. Su

correcta estimación contribuye a preservar el balance entre combustible disponible, oxígeno consumido, calor generado y propagación del frente. Por ello, más que un parámetro empírico aislado, el factor C_f puede entenderse como una variable física de enlace entre el comportamiento observado en laboratorio y la simulación de procesos ISC en modelos de campo (Burger y Sahuquet, 1972; Gatesy Ramey, 1980; Pinzón Díaz, 2018).

En consecuencia, la estimación del combustible depositado constituye una condición necesaria para analizar la estabilidad del frente de combustión, ya que permite relacionar la disponibilidad local de energía con la propagación de la zona reactiva. Esta relación será retomada en la siguiente sección mediante el concepto de régimen autopropagante del frente de combustión.

2.4 Régimen autopropagante del frente de combustión

La combustión in situ puede analizarse, desde el punto de vista dinámico, como la propagación de un frente reactivo a través de un medio poroso. La continuidad de este frente depende del balance entre la disponibilidad de combustible depositado, el suministro de oxígeno, la generación de calor por reacciones de oxidación, la transferencia térmica hacia las zonas no calentadas y las pérdidas de calor hacia las formaciones adyacentes. Después de la ignición, el sistema atraviesa un régimen transitorio inicial, caracterizado por variaciones en temperatura, consumo de oxígeno y distribución de fluidos. Bajo condiciones adecuadas de operación, disponibilidad de combustible y continuidad del medio, el frente puede aproximarse a un régimen de propagación estable o asintótico, en el cual su estructura interna se desplaza con cambios relativamente menores respecto al propio frente.

Este comportamiento se conoce como régimen autopropagante y puede representarse mediante el concepto de onda viajera o *traveling wave*. En este marco, el frente no se interpreta únicamente como una zona puntual de reacción, sino como una estructura térmica y química que

se desplaza a través del medio poroso conservando una organización interna aproximada. Esta representación no implica que un yacimiento real, heterogéneo y tridimensional, se comporte como una onda viajera perfecta; más bien constituye una aproximación física útil para analizar el proceso a escala local, especialmente cuando el interés es comprender qué condiciones permiten sostener la propagación del frente.

Desde el punto de vista matemático, Akkutlu y Yortsos (2003) desarrollaron una formulación para analizar la dinámica de los frentes de combustión en medios porosos y su convergencia hacia soluciones estacionarias de tipo onda viajera. Los autores retoman la distinción planteada en estudios previos sobre combustión por filtración e identifican dos tipos de onda viajera para la combustión sin llama en avance directo, una con la reacción adelantada respecto al frente, limitada por combustible, y otra con la reacción rezagada, limitada por oxígeno (Akkutlu y Yortsos, 2003). Esta distinción es relevante porque muestra que la posición relativa entre la zona de reacción y los gradientes térmicos depende de la disponibilidad de combustible y de oxígeno.

El alcance de su análisis se centra en el comportamiento asintótico de los frentes estacionarios, obtenidos a tiempos largos y bajo la suposición de combustión completa del combustible (Akkutlu y Yortsos, 2003). Este enfoque permite sustentar teóricamente la existencia de soluciones de propagación estable en condiciones idealizadas. No obstante, debe precisarse que dicho modelo corresponde a una formulación teórica simplificada de la combustión en medio poroso y no describe, por sí solo, la distribución multifásica de aceite, agua y vapor característica de los sistemas de crudo pesado.

La descripción del frente en movimiento también puede formularse mediante un sistema de referencia móvil. Penberthy y Ramey (1966), en el contexto del diseño y el análisis de tubos de combustión, propusieron emplear un sistema de coordenadas móvil en el que el frente de

combustión permanece siempre en el origen. Esta formulación permite analizar la estructura del frente desde una coordenada que se desplaza con él, de manera que las zonas térmicas y de saturación pueden interpretarse como regiones relativamente estacionarias respecto al frente, aunque cambien de posición en el sistema fijo del laboratorio o del yacimiento.

La evidencia experimental clásica complementa esta formulación teórica al mostrar que, delante del frente de combustión, pueden formarse zonas térmicas y de saturación relativamente organizadas. Wilson et al. (1958) y Wu y Fulton (1971), discutidos también por Mamora (1993), describieron regiones como la meseta de vapor, el banco de agua, el banco de hidrocarburos y la zona no afectada térmicamente. Según esa descripción, el vapor de agua se condensa primero y forma un banco de agua, seguido por los hidrocarburos livianos, mientras que la meseta de vapor corresponde a la región bifásica de vapor y líquido (Wilson et al., 1958; Wu y Fulton, 1971, como se citó en Mamora, 1993).

Estos resultados experimentales no deben confundirse con el formalismo lagrangiano. Wilson et al. (1958) y Wu y Fulton (1971) describen la distribución de zonas y saturaciones a partir de observaciones asociadas a volúmenes de control fijos, es decir, bajo una perspectiva principalmente euleriana. Aun así, sus resultados son relevantes porque evidencian que el medio poroso delante del frente no se comporta como una región completamente desordenada, sino como una secuencia de zonas condicionadas por el gradiente térmico. De manera particular, Wu y Fulton (1971) reportaron una saturación de aceite residual cercana al 12 por ciento a 400 °F, lo que ilustra la posibilidad de identificar condiciones de saturación relativamente consistentes bajo escenarios experimentales específicos.

Bajo esta perspectiva, el combustible depositado puede entenderse como una variable localmente estimable cuando el frente alcanza condiciones de propagación estable y cuando las

propiedades del sistema roca-fluido y las condiciones operacionales se mantienen dentro de un dominio definido. Esta afirmación no implica que el factor de combustible depositado, C_f , sea constante ni universal. Por el contrario, su valor depende de la composición del crudo, la saturación de aceite, la mineralogía, el suministro de oxígeno, el flux de aire y la historia térmica del sistema. No obstante, el régimen autopropagante permite justificar que, en condiciones controladas, la formación y disponibilidad de combustible puedan relacionarse con condiciones locales del medio.

En consecuencia, el régimen autopropagante y la solución tipo onda viajera proporcionan un marco físico para identificar qué rasgos debe preservar una simulación numérica al trasladar información desde laboratorio hacia campo: velocidad del frente, temperatura efectiva, consumo de oxígeno, organización térmica de las zonas y disponibilidad local de combustible. La observación y cuantificación experimental de estas variables se aborda mediante pruebas de tubo de combustión unidimensionales, tema que se desarrolla en la siguiente sección.

2.5 Pruebas de tubo de combustión 1D

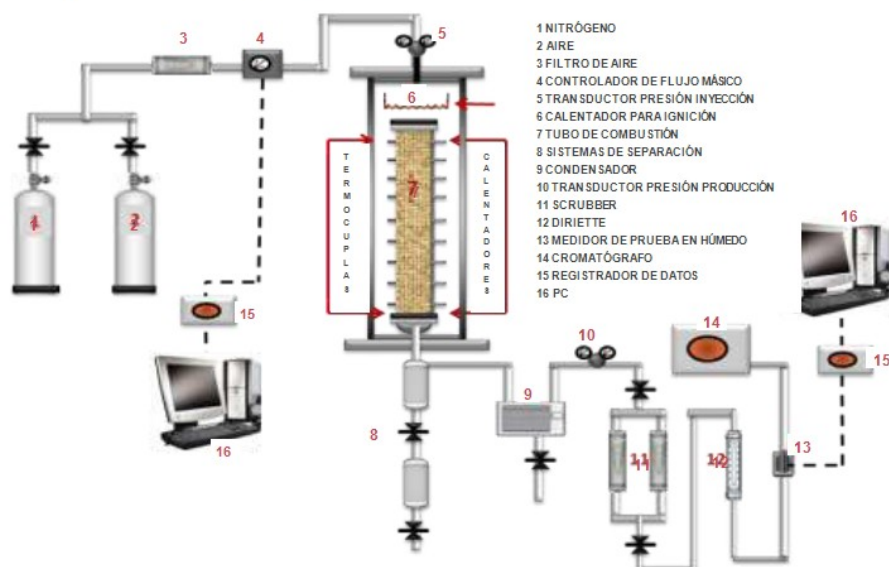
Las pruebas de tubo de combustión unidimensionales constituyen una herramienta experimental relevante para evaluar procesos de combustión in situ a escala de laboratorio. Su propósito es caracterizar el comportamiento del sistema roca-fluido bajo condiciones controladas de inyección de aire o gas enriquecido, permitiendo observar la propagación del frente reactivo y estimar variables de desempeño del proceso. Entre estas variables se encuentran la temperatura máxima alcanzada, la velocidad de propagación del frente, el consumo de oxígeno, la composición

de gases efluentes, los requerimientos de aire y la cantidad de combustible depositado, Cf (Mercado Sierra y Trevisan, 2014).

El diseño y operación de estos montajes experimentales se fundamenta en los principios clásicos descritos por Penberthy y Ramey (1966) y en las consideraciones de diseño y operación recogidas por Moore et al. (1999). De manera general, el equipo consiste en un reactor tubular empacado de forma controlada con arena o roca triturada, aceite y agua representativos del sistema de estudio. El montaje incluye una línea de inyección de aire, medidores o controladores de flujo, un sistema de ignición ubicado cerca del extremo inyector, termocuplas distribuidas axialmente para registrar el perfil térmico, medición de presión, recolección de fluidos producidos y análisis de gases efluentes. La configuración general de una prueba de tubo de combustión se esquematiza en la Figura 3.

Figura 3

Esquema representativo de una prueba de tubo de combustión 1D



Nota. Adaptado de Rodríguez (2004, como se citó en Yatte Garzón, 2011).

Después de la ignición, el sistema atraviesa un periodo transitorio inicial, durante el cual la temperatura, el consumo de oxígeno y la producción de gases pueden variar de manera significativa. Bajo condiciones adecuadas de inyección, transferencia de calor y disponibilidad de combustible, el frente puede alcanzar un intervalo de propagación relativamente estable. En este intervalo se estiman variables promedio más representativas del proceso, como la velocidad de avance del frente, la temperatura máxima sostenida, la composición de gases efluentes y el consumo de oxígeno. Esta interpretación experimental se relaciona con el concepto de régimen autopropagante descrito en la sección anterior, aunque en el tubo de combustión dicha estabilidad se evalúa bajo condiciones geométricas y operativas controladas.

El análisis de los datos obtenidos durante la prueba permite calcular parámetros de diseño y desempeño. A partir de los registros de temperatura de las termocuplas se identifica el avance del frente y se estima su velocidad de propagación. La cromatografía o análisis de gases efluentes

permite determinar el consumo de oxígeno, la generación de CO_2 y CO , y relaciones como CO_2 entre la suma de CO más CO_2 , utilizadas para interpretar el grado de oxidación. Mediante balances de masa y relaciones estequiométricas se pueden estimar requerimientos de aire, relación aire-combustible y cantidad de combustible consumido o depositado. Las principales métricas medidas y parámetros derivados de una prueba de tubo se resumen en la Tabla 1.

Tabla 1

Métricas físicas y parámetros derivados en una prueba de tubo de combustión 1D

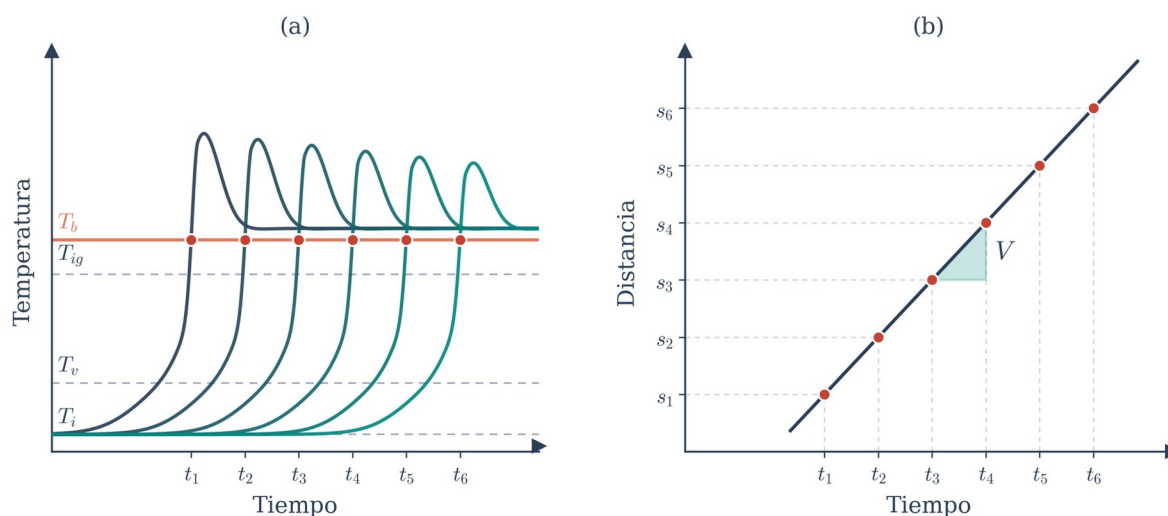
<i>Variable</i>	<i>Método de medición o cálculo</i>	<i>Unidad</i>	<i>Interpretación física</i>	<i>Uso en simulación</i>
Temperatura máxima	Termocuplas axiales	$^{\circ}\text{C}$	Identifica la zona de alta temperatura	Validación térmica del modelo
Velocidad del frente	Tiempo de llegada del pico térmico entre termocuplas	cm/min o ft/día	Mide propagación del frente	Ajuste del avance del frente
Consumo de O_2	Análisis de gases efluentes	% mol o fracción	Indica utilización de oxígeno	Calibración de reacciones
$\text{CO}_2/(\text{CO}+\text{CO}_2)$	Análisis de gases	Fracción	Indica grado relativo de oxidación	Validación de productos gaseosos
Requerimiento de aire	Balance de aire inyectado y volumen barrido	m^3/m^3 o scf/ft^3	Estima aire necesario por volumen tratado	Diseño operacional
Relación aire-combustible	Balance estequiométrico	Volumen/masa	Relaciona aire requerido y combustible consumido	Evaluación de eficiencia
Cf	Balance de masa/estequiometría	kg/m^3 o lb/ft^3	Cantidad de combustible depositado o consumido	Estimación del combustible disponible

El perfil térmico axial es una de las salidas experimentales más importantes, porque permite visualizar la posición y el desplazamiento de la zona de alta temperatura. A medida que el

frente avanza, las termocupas registran picos de temperatura sucesivos, lo que permite reconstruir la velocidad de propagación y diferenciar el periodo de ignición, el intervalo de propagación estable y los efectos de borde del experimento. Un esquema conceptual de la evolución espacial del perfil térmico axial se presenta en la Figura 4.

Figura 4

Perfil térmico axial típico durante una prueba de tubo de combustión



Nota. Esquema basado en perfiles térmicos reportados en pruebas de tubo de combustión.

A pesar de su utilidad, las pruebas de tubo presentan limitaciones inherentes. La geometría unidimensional y la escala reducida simplifican fenómenos presentes en el yacimiento, como heterogeneidad areal y vertical, segregación gravitacional, cabalgamiento de gases, canalización de aire e interacción entre pozos. Además, las condiciones de borde, el aislamiento térmico y los altos fluxes usados en laboratorio pueden diferir de las condiciones reales de campo. Por esta razón, los parámetros obtenidos en pruebas de tubo no deben trasladarse directamente a modelos de campo sin una estrategia de escalamiento adecuada (Showalter, 1963; Wu y Fulton, 1971).

En el contexto colombiano, estudios experimentales y numéricos reportados en fuentes académicas han constituido una base relevante para el análisis de crudos pesados y sistemas roca-fluido de interés nacional. Estos estudios han permitido documentar comportamiento térmico, producción de gases, consumo de oxígeno, estabilidad de propagación y estimación de parámetros de desempeño en pruebas de combustión. Trabajos como los de Yatte Garzón (2011), Padilla Reyes (2016) y Pinzón Díaz (2018) han contribuido a esta base experimental y numérica, aportando, respectivamente, el análisis de los perfiles térmicos y los gases de combustión en pruebas de tubo, el desarrollo del modelo cinético del proceso y la caracterización de la depositación de combustible en el sistema roca-fluido de interés.

En síntesis, las pruebas de tubo de combustión 1D proporcionan una referencia experimental para calibrar modelos cinéticos, interpretar el comportamiento térmico del sistema roca-fluido y estimar el combustible depositado. No obstante, la transferencia de estos resultados hacia simulaciones de dimensiones de campo implica retos de escalamiento asociados al tamaño de celda, la representación del frente y el promediado térmico. Esta limitación conecta directamente con el problema de escalamiento numérico que se desarrolla en la siguiente sección.

2.6 Simulación numérica de combustión in situ en medios porosos

En esta investigación se emplea CMG STARS, un simulador térmico composicional utilizado para representar procesos de recobro térmico y avanzado, entre ellos la inyección de vapor, SAGD, inyección de aire a alta presión y combustión in situ. Su utilidad en procesos ISC radica en la capacidad de integrar, dentro de un mismo modelo numérico, el flujo multifásico no isotérmico, la transferencia de calor, el equilibrio de fases y las reacciones químicas definidas por el usuario. Esta capacidad resulta necesaria en combustión in situ, donde la propagación del frente depende del acoplamiento entre suministro de oxígeno, disponibilidad de combustible, generación

de calor y desplazamiento de fluidos en el medio poroso (Crookston et al., 1979; Gutiérrez et al., 2012).

Desde el punto de vista matemático, STARS resuelve balances de masa por componente, balance de energía, flujo multifásico mediante la formulación de Darcy y relaciones constitutivas para las propiedades de los fluidos y de la roca. En el caso de la combustión in situ, estos balances permiten representar la inyección de aire, el transporte de oxígeno, el calentamiento del medio poroso, la formación y consumo de combustible, la generación de gases de combustión y la transferencia de energía entre fases. Por tanto, la simulación ISC exige una formulación térmica y reactiva capaz de representar simultáneamente fenómenos de transporte, equilibrio termodinámico y cinética química (Belgrave et al., 1993; Kavscek et al., 2013).

La representación química del proceso se realiza mediante pseudocomponentes y reacciones estequiométricas, un enfoque que también se ha implementado agrupando el crudo en fracciones SARA (Eguono, 2010). Un modelo simplificado de ISC suele incluir componentes como aceite pesado, aceite liviano, coque, oxígeno, nitrógeno, dióxido de carbono, monóxido de carbono y agua. Sobre estos componentes se definen reacciones como craqueo térmico, formación de combustible sólido, oxidación del coque y, si el modelo lo requiere, oxidación a baja temperatura del aceite. La selección del esquema de reacciones depende del objetivo de la simulación, de la información experimental disponible y del balance entre representatividad física y costo computacional (Burger y Sahuquet, 1972; Dechelette et al., 2006; Mamora, 1993; Millour et al., 1987).

En la simulación numérica de combustión in situ, la representación de las reacciones químicas requiere definir la estequiometría de reactivos y productos, los parámetros cinéticos, las fases participantes, la entalpía de reacción, que puede acotarse a partir de calores de combustión

medidos para el crudo y sus fracciones SARA (Mendez-Kuppe et al., 2008), y los criterios térmicos o composicionales que controlan su activación. Estas reacciones suelen formularse mediante expresiones tipo Arrhenius, en las que la velocidad depende del factor pre-exponencial, la energía de activación, el orden de reacción, la concentración de reactivos y la temperatura local de la celda. Con esto, el modelo puede representar el consumo de oxígeno, la formación o consumo de combustible y la generación de calor dentro del balance energético del simulador.

Una característica crítica de la simulación ISC es que la cinética tipo Arrhenius depende fuertemente de la temperatura local asignada a cada celda. En modelos de laboratorio con discretizaciones finas, el frente de combustión puede representarse con mayor resolución espacial. En contraste, en modelos de campo, el aumento del tamaño de celda puede generar promediado térmico y modificar la temperatura efectiva usada por el simulador para calcular la velocidad de reacción. Por esta razón, la discretización espacial no es solo una decisión numérica, sino una condición que afecta la representación física del frente de combustión (Coats, 1983; Nissen et al., 2015).

En síntesis, CMG STARS proporciona una plataforma adecuada para integrar flujo multifásico, transferencia de calor y reacciones químicas en la simulación de procesos ISC. Sin embargo, su capacidad predictiva a escala de campo depende de representar adecuadamente el frente de combustión y de controlar los efectos asociados al tamaño de celda. Esta limitación conecta directamente con el problema del escalamiento y el promediado térmico de celda, desarrollado en la siguiente sección.

2.7 Escalamiento y promediado térmico asociado al tamaño de celda

El escalamiento de la combustión in situ busca transferir información obtenida en pruebas de laboratorio hacia modelos de campo, manteniendo en la medida de lo posible la

representatividad física del frente de combustión. El desafío principal surge porque las pruebas de tubo y los modelos numéricos de laboratorio suelen emplear discretizaciones finas, mientras que los modelos de campo requieren celdas de mayor tamaño por restricciones computacionales. Esta diferencia de escala afecta la forma en que el simulador representa la zona reactiva y puede modificar la respuesta térmica, cinética y operacional del proceso (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015).

El frente de combustión suele ocupar una región estrecha en comparación con el tamaño de celda utilizado en simulaciones de campo. En una malla fina, la zona de alta temperatura, el consumo de oxígeno y la liberación de calor pueden representarse con mayor resolución espacial. En una malla de mayor tamaño, en cambio, la temperatura local elevada del frente se promedia con volúmenes de roca y fluidos que aún no han sido calentados. Como resultado, la temperatura efectiva asignada a la celda puede ser inferior o diferente a la temperatura local real de la zona reactiva. Este fenómeno, conocido como promediado térmico de malla o *thermal averaging*, constituye una fuente importante de dependencia del tamaño de celda en simulaciones ISC (Coats, 1983; Gutiérrez et al., 2012).

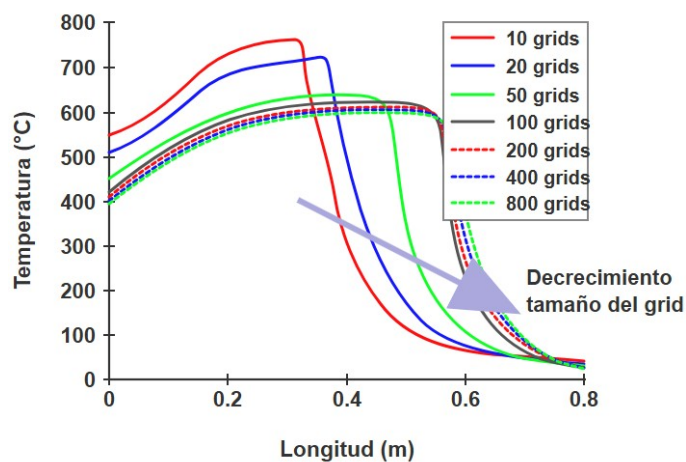
La sensibilidad de las expresiones tipo Arrhenius frente a la temperatura amplifica este problema. En este tipo de formulaciones, la tasa de reacción depende de manera exponencial de la temperatura absoluta. Por tanto, pequeñas diferencias entre la temperatura local del frente y la temperatura efectiva calculada para la celda pueden producir cambios significativos en la velocidad de reacción estimada por el simulador. En consecuencia, una simulación con celdas de mayor tamaño puede subestimar o sobreestimar la velocidad de propagación del frente, modificar la temperatura máxima, alterar la formación y consumo de combustible, generar consumos de

oxígeno no representativos o incluso producir extinción numérica prematura del frente (Kovscek et al., 2013; Nissen et al., 2015; Sadeghi et al., 2007).

Es importante aclarar que esta limitación no implica que la cinética tipo Arrhenius sea incorrecta desde el punto de vista químico. La dificultad aparece cuando la temperatura usada como variable de entrada para calcular la reacción no representa adecuadamente la temperatura local de la zona reactiva, sino una temperatura efectiva afectada por el volumen de la celda. Por ello, el problema no corresponde a una falla de la ley cinética, sino a su implementación en modelos donde el frente no se encuentra suficientemente resuelto espacialmente (Gutiérrez et al., 2012; Nissen et al., 2015). Este efecto se ilustra en la Figura 5.

Figura 5

Efecto del tamaño de celda sobre la temperatura efectiva del frente de combustión



Nota. Adaptado de Zhu (2011).

Diversas estrategias han sido propuestas para mitigar estos efectos. Entre ellas se encuentran el refinamiento de malla, los modelos de frente móvil, el uso de temperaturas de activación, el escalamiento cinético dependiente del tamaño de celda, los enfoques sub-grid y los métodos basados en la representación explícita del combustible disponible. En el marco teórico basta con reconocer que estas estrategias buscan reducir la dependencia de malla y preservar los

rasgos físicos esenciales del frente: temperatura efectiva, velocidad de propagación, consumo de oxígeno, generación de calor y disponibilidad de combustible. La revisión detallada de dichas metodologías y su comparación crítica corresponde al capítulo de estado del arte (Glatz, 2012; Marjerrison y Fassihi, 1992; Nissen et al., 2015; Sadeghi et al., 2007).

Para la presente investigación, el problema de escalamiento se interpreta como la necesidad de representar en modelos de campo de mayor escala la disponibilidad de combustible, la temperatura efectiva y la propagación del frente sin recurrir necesariamente a mallas tan finas como las usadas en laboratorio. Esta idea conecta directamente el marco teórico con la hipótesis de que el combustible depositado puede emplearse como una variable física de enlace entre la escala experimental y la escala de simulación de campo. En este sentido, el promediado térmico de malla no solo representa una limitación numérica, sino también el punto de partida para plantear estrategias de escalamiento orientadas a conservar la física local del frente de combustión.

3. Estado del arte

El presente capítulo revisa críticamente los antecedentes que enmarcan la investigación. La sección 3.1 examina las correlaciones históricas para la estimación del combustible depositado, C_f , identificando sus alcances y limitaciones. La sección 3.2 analiza el problema del escalamiento entre pruebas de laboratorio y modelos de campo, junto con la sensibilidad de la cinética al tamaño de celda. La sección 3.3 revisa las estrategias numéricas propuestas para mitigar dicha dependencia. La sección 3.4 reúne antecedentes académicos y técnicos relacionados con la evaluación experimental, cinética y numérica de la combustión in situ en crudos pesados colombianos. Finalmente, la sección 3.5 sintetiza las brechas de conocimiento identificadas, las cuales sustentan la orientación metodológica adoptada en los capítulos siguientes.

3.1 Correlaciones históricas para la estimación del combustible depositado C_f

La estimación del combustible depositado, C_f , surgió como una necesidad de diseño en los primeros desarrollos de combustión in situ, especialmente para calcular requerimientos de aire, velocidad de propagación del frente, volumen de roca barrido térmicamente y recuperación esperada. Antes de la consolidación de simuladores térmicos composicionales, los métodos analíticos y las correlaciones empíricas ofrecían una forma práctica de vincular datos de laboratorio con parámetros de diseño de campo.

Los primeros enfoques estuvieron orientados principalmente al diseño volumétrico y operacional del proceso. Nelson y McNeil (1961) propusieron metodologías de ingeniería para estimar parámetros operativos de proyectos de combustión in situ, mientras que Penberthy y

Ramey (1966) formalizaron criterios de diseño y operación de tubos de combustión. Estos trabajos permitieron relacionar el avance del frente, el suministro de aire y el volumen de roca afectado térmicamente. Sin embargo, su alcance fue principalmente ingenieril y no incorporó una descripción detallada de la composición química del combustible depositado ni de su variabilidad frente a sistemas roca-fluido diferentes.

Alexander et al. (1962) abordaron directamente la disponibilidad y composición del combustible durante la combustión in situ. Su aporte consistió en relacionar la formación de combustible con propiedades del crudo y condiciones experimentales, incluyendo variables como temperatura, saturación inicial y gravedad API. Este enfoque permitió reconocer que la cantidad de combustible no es arbitraria, sino dependiente del sistema. No obstante, su aplicación directa a crudos pesados colombianos requiere cautela, debido a que variables como composición SARA, contenido de asfaltenos y resinas, mineralogía de la roca y condiciones de presión no necesariamente quedan representadas de manera explícita.

Showalter (1963) aportó evidencia experimental mediante desplazamientos por combustión y pruebas en medios porosos, relacionando el comportamiento del frente con la disponibilidad de combustible y la eficiencia del proceso. Su valor radica en conectar observaciones experimentales con variables de desempeño. Sin embargo, una parte importante de estos estudios se desarrolló bajo condiciones controladas y medios simplificados, por lo que su extrapolación hacia yacimientos heterogéneos y sistemas roca-fluido de crudo pesado requiere validación adicional.

Burger y Sahuquet (1972) ampliaron la comprensión del combustible depositado desde una perspectiva cinético-química. Su trabajo mostró que la formación y el consumo de combustible no dependen únicamente de variables geométricas o volumétricas, sino también de los mecanismos

de reacción, el calor de combustión y la cinética asociada al sistema. Esta contribución permite interpretar C_f como una variable condicionada por la química del sistema. Su limitación, para los fines de esta tesis, es que los parámetros cinéticos y los sistemas analizados no necesariamente representan las condiciones específicas de crudos pesados colombianos.

Gates y Ramey (1980) propusieron un método de ingeniería para evaluar proyectos de combustión in situ, incorporando variables como combustible disponible, requerimiento de aire, volumen afectado por el frente y recuperación esperada. Este enfoque resulta útil para estimaciones preliminares y análisis de diseño. Sin embargo, al tratarse de una formulación de ingeniería de alcance general, su aplicación a sistemas locales exige verificar si las condiciones de crudo, presión, saturaciones, roca y operación se encuentran dentro de un dominio compatible.

Con el avance de los modelos cinéticos, trabajos como los de Fassihi et al. (1984) y Belgrave et al. (1993) permitieron representar con mayor detalle reacciones de craqueo, oxidación a baja temperatura y oxidación a alta temperatura. Estos enfoques fortalecieron la descripción reactiva del proceso, pero se orientaron principalmente al ajuste de parámetros cinéticos y a la simulación del comportamiento termoquímico. En consecuencia, C_f suele aparecer como resultado del balance de masa o de la calibración del modelo, más que como una variable explícita de transferencia entre laboratorio y simulación de campo.

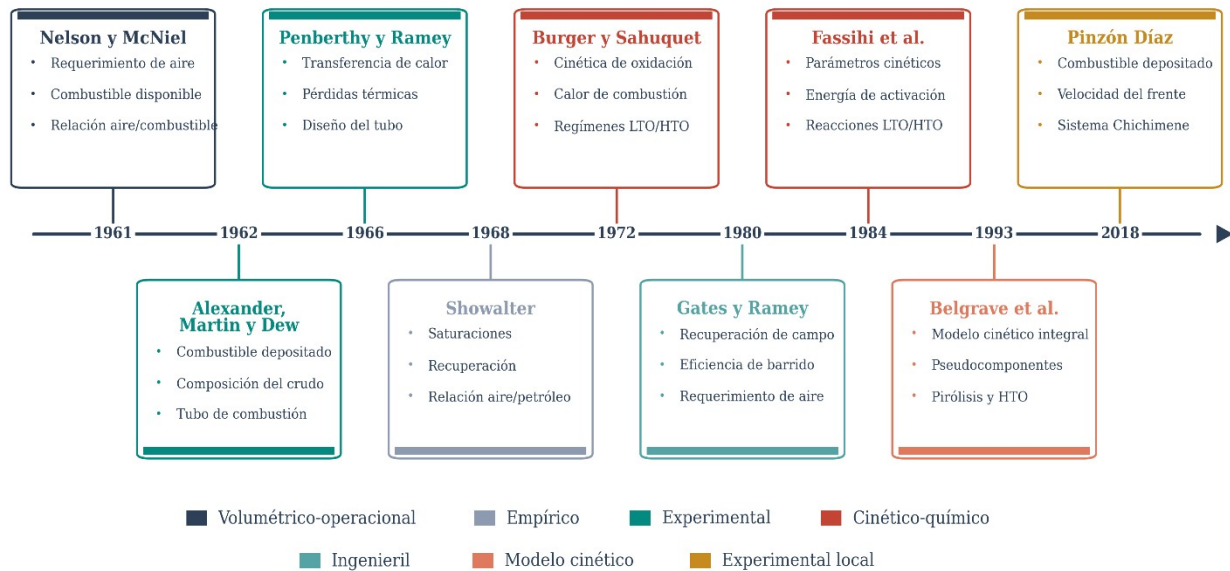
En el contexto colombiano, Pinzón Díaz (2018) constituye una fuente pública relevante sobre datos experimentales de combustible depositado en un sistema roca-fluido de crudo pesado colombiano. Su trabajo permitió identificar tendencias de C_f frente a variables como flux de aire, presión, saturación y propiedades del medio poroso. No obstante, la dispersión de los datos experimentales impidió consolidar una correlación multivariable cerrada, por lo que se recomendaron interpolaciones múltiples a partir de tendencias variable por variable. Esta

limitación evidencia la necesidad de contar con una expresión programable que permita estimar localmente el combustible depositado dentro de un dominio de aplicación definido

En síntesis, los métodos históricos establecieron que el combustible depositado es una variable central para el diseño y la simulación de procesos de combustión in situ. Sin embargo, no se identifica una formulación multivariable cerrada, construida para un sistema roca-fluido colombiano y directamente programable en simulaciones de mayor escala, que integre simultáneamente variables como flux de aire, porosidad, saturación inicial de aceite y propiedades del medio poroso. Esta brecha justifica avanzar hacia una estrategia de correlación y escalamiento que conecte la información experimental con modelos numéricos de campo. La evolución de los métodos y su comparación se sintetizan en la Figura 6 y la Tabla 2.

Figura 6

Línea de tiempo de métodos y antecedentes para la estimación del combustible depositado



Nota. Síntesis de la revisión de la literatura discutida en la sección.

Tabla 2

Comparativa de correlaciones y métodos históricos para la estimación del combustible depositado

<i>Autor y año</i>	<i>Enfoque</i>	<i>Variables consideradas</i>	<i>Aporte principal</i>	<i>Limitación para crudo pesado colombiano</i>
Nelson y McNeil (1961); Penberth y Ramey (1966)	Volumétrico-operacional	Aire, volumen afectado, velocidad de frente	Base de diseño ingenieril y pruebas de tubo	Baja representación química del combustible
Alexander et al. (1962)	Empírico	API, temperatura, saturación inicial	Relaciona propiedades del crudo con disponibilidad de combustible	No incorpora explícitamente composición SARA ni mineralogía
Showalter (1963)	Experimental	Medio poroso, desempeño del frente	Evidencia experimental en desplazamientos por combustión	Medios simplificados y extrapolación limitada
Burger y Sahuquet (1972)	Cinético-químico	Cinética, calor de combustión	Muestra que Cf depende de mecanismos químicos	No calibrado para crudo pesado colombiano
Gates y Ramey (1980)	Ingeniería de proyectos	Aire, volumen afectado, recuperación	Útil para diseño preliminar	Requiere validación en condiciones locales
Belgrave et al. (1993)	Modelo cinético	LTO, cracking, HTO	Mejora representación reactiva	Cf aparece como resultado, no como variable directa

<i>Autor y año</i>	<i>Enfoque</i>	<i>Variables consideradas</i>	<i>Aporte principal</i>	<i>Limitación para crudo pesado colombiano</i>
Pinzón Díaz (2018)	Experimental local	Flux, presión, saturación, medio poroso	Antecedente directo en crudo pesado colombiano	Tendencias dispersas; no propone ecuación cerrada

Nota. Las limitaciones se refieren al uso directo de la correlación en el contexto de un sistema roca-fluido de crudo pesado colombiano.

3.2 Escalamiento laboratorio-campo y sensibilidad al tamaño de celda

El escalamiento numérico de los procesos de combustión in situ busca transferir de manera representativa la información termoquímica y fenomenológica obtenida en pruebas de tubo de combustión, celdas cinéticas o modelos de alta resolución hacia simulaciones a escala de campo. Para que esta transición sea útil desde el punto de vista predictivo, las estrategias de escalamiento deben procurar conservar variables críticas del proceso, como la temperatura efectiva del frente reactivo, la velocidad de propagación, el consumo de oxígeno, la generación de calor y la cantidad de combustible disponible para sostener la oxidación. Sin embargo, la diferencia de escala entre un montaje de laboratorio y un modelo de yacimiento introduce dificultades numéricas asociadas a la resolución espacial del frente.

Uno de los puntos de partida más citados en esta discusión es el trabajo de Coats (1983), quien formalizó el problema de la sensibilidad de la simulación al tamaño de celda, conocido como grid size effect. Este fenómeno, descrito en detalle en la sección 2.7, establece que la transferencia directa de parámetros ajustados en laboratorio hacia modelos de campo con celdas de mayor tamaño puede alterar la temperatura efectiva del frente y, en consecuencia, las tasas de reacción

calculadas. A partir de este diagnóstico, la literatura comenzó a proponer estrategias de escalamiento orientadas a reducir la dependencia de malla en simulaciones ISC.

Como respuesta temprana a esta problemática, Marjerrison y Fassihi (1992) propusieron procedimientos para escalar resultados de tubo hacia modelos pseudotrídimensionales. Su enfoque incluyó ajustes paramétricos, entre ellos el uso de una temperatura de activación artificial para compensar la disminución térmica asociada al tamaño de celda y facilitar la propagación numérica del frente. Aunque este enfoque representó un avance relevante para su época, su aplicabilidad depende del caso de estudio, del crudo, de la red de reacciones y de las condiciones de simulación adoptadas. Por tanto, no constituye una solución general para cualquier sistema roca-fluido ni para cualquier configuración de malla.

Gutiérrez et al. (2012) analizaron con mayor detalle las dificultades de transferir cinéticas de laboratorio hacia modelos de campo. Sus trabajos resaltan que una aplicación directa de redes reaccionales calibradas en condiciones controladas puede perder capacidad predictiva cuando se aplica en modelos de mayor escala, especialmente si el frente no se resuelve adecuadamente. Esta contribución es relevante porque muestra que el escalamiento ISC no consiste únicamente en trasladar parámetros cinéticos, sino en preservar la fenomenología del frente, los perfiles de flujo y la respuesta térmica del sistema.

Una línea posterior de investigación se ha enfocado en estrategias de escalamiento cinético dependiente de malla. Sadeghi et al. (2007) y Nissen et al. (2015) desarrollaron metodologías basadas en promediado de volumen y modificación de parámetros de Arrhenius, como el factor pre-exponencial o la energía de activación, en función del tamaño del bloque. En una dirección similar, Zhu (2011) propuso un flujo de trabajo orientado a reducir la dependencia de malla mediante la anulación de la dependencia exponencial respecto a la temperatura, llevando la energía

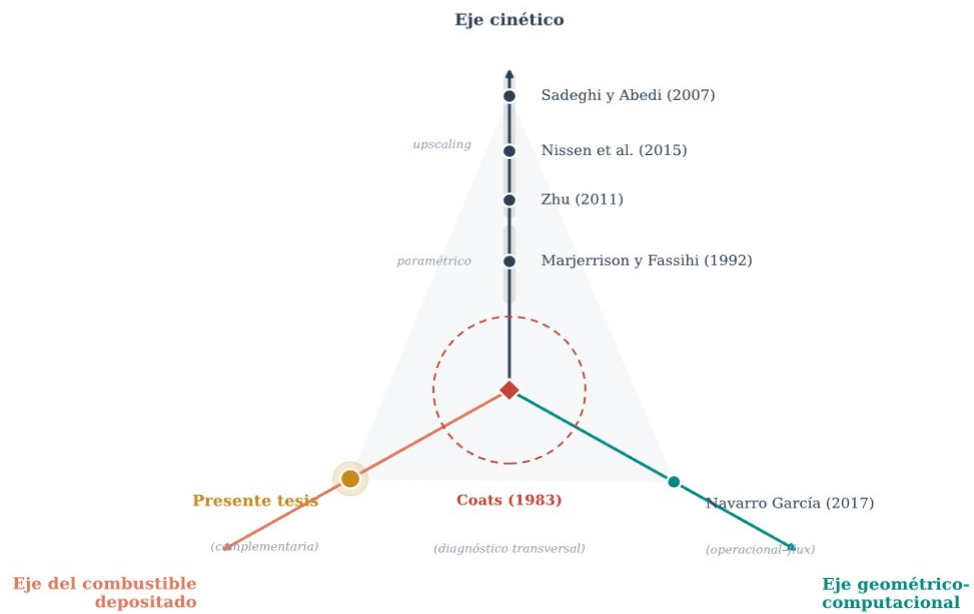
de activación a cero y reajustando el factor pre-exponencial. Si bien estos enfoques favorecen la propagación del frente en modelos con celdas de mayor tamaño, su corrección se concentra en parámetros cinéticos efectivos y no en la estimación local del combustible depositado a partir de variables de roca, fluido y operación.

En el contexto colombiano, Navarro García (2017) constituye un antecedente relevante al escalar conceptualmente el proceso de combustión de un crudo extrapesado hacia modelos 2D y el coque inicializado en cada celda empleando cinéticas simplificadas. Su trabajo mostró que la estabilidad del régimen de oxidación a alta temperatura depende de la configuración del perfil de inyección de aire y de la forma en que el modelo representa la expansión del frente. Este antecedente aproxima la discusión internacional de escalamiento a sistemas colombianos y refuerza la necesidad de considerar las condiciones operacionales locales en la representación del frente.

En conjunto, las estrategias revisadas abordan el problema de escalamiento principalmente desde el lado cinético: modifican parámetros de reacción, condiciones efectivas o formulaciones numéricas para compensar el efecto del tamaño de celda sobre la propagación del frente. La presente investigación adopta un ángulo complementario, centrado en la disponibilidad local de combustible depositado como variable física de enlace entre laboratorio y simulación de campo. Antes de desarrollar este planteamiento en la metodología, la sección siguiente revisa estrategias numéricas y computacionales que han buscado mitigar la dependencia asociada al tamaño de celda desde enfoques geométricos, cinéticos y de control numérico. Estos enfoques y su relación con la presente investigación se sintetizan en la Figura 7 y la Tabla 3.

Figura 7

Ejes de las estrategias de escalamiento laboratorio-campo en combustión in situ



Nota. El esquema enfatiza la complementariedad entre los enfoques revisados y la estrategia adoptada en esta investigación, centrada en el combustible depositado como variable física de transferencia.

Tabla 3

Estrategias de escalamiento laboratorio-campo y su relación con la presente investigación

<i>Autor</i>	<i>Enfoque</i>	<i>Variable o rasgo preservado</i>	<i>Límite de aplicabilidad</i>	<i>Relación con esta tesis</i>
Coats (1983)	Diagnóstico del efecto del tamaño de celda	Temperatura efectiva y avance del frente	Identifica el problema sin proponer una solución general	Base conceptual del problema de escalamiento
Marjerrison y Fassihi (1992)	Ajuste de parámetros y temperatura de activación	Propagación del frente	Calibración específica por sistema y malla	Evidencia el uso temprano de ajustes para compensar el promediado térmico
Gutiérrez et al. (2012)	Transferencia de cinética laboratorio-campo	Comportamiento o termoquímico global	Pérdida de predictibilidad en celdas de mayor tamaño	Respalda la necesidad de estrategias de escalamiento
Sadeghi et al. (2007); Nissen et al. (2015); Zhu (2011)	Escalamiento cinético dependiente de malla	Velocidad y estabilidad del frente	Requiere modificar parámetros cinéticos efectivos	Muestra una ruta alternativa basada en cinética, no en C_f local
Navarro García (2017)	Escalamiento conceptual 2D/3D con perfiles de inyección	Régimen HTO y avance del frente	Modelo dependiente de la configuración de inyección	Confirma la influencia de las condiciones operacionales locales en la estabilidad del frente

Nota. La columna de relación con esta tesis describe cómo cada antecedente complementa o difiere del ángulo adoptado en esta investigación.

3.3 Estrategias numéricas para mitigar la dependencia asociada al tamaño de celda

El desarrollo de simulaciones predictivas a escala de campo para combustión in situ exige enfrentar el efecto del tamaño de celda sobre la representación del frente reactivo. Además de las estrategias de escalamiento cinético discutidas en la sección anterior, la literatura ha propuesto enfoques numéricos y computacionales orientados a mejorar la resolución espacial del frente, controlar la activación de reacciones o estabilizar la propagación térmica en modelos con celdas de mayor tamaño. Estas estrategias no necesariamente compiten entre sí; por el contrario, pueden entenderse como alternativas complementarias que actúan sobre distintos aspectos del problema: geometría, cinética, transporte y estabilidad numérica.

Una primera línea corresponde al refinamiento adaptativo de malla (AMR) y al mallado dinámico. Estos enfoques buscan mantener alta resolución solo en las regiones donde se localizan altos gradientes térmicos, composicionales o reaccionales, evitando refinar de manera uniforme todo el modelo de campo. En simulación térmica, trabajos como Christensen et al. (2004) han mostrado la utilidad de subdividir dinámicamente la malla en torno a la zona de interés y volver a una resolución de menor detalle en regiones ya barridas. La ventaja principal de esta estrategia es que mejora la representación local del frente sin multiplicar innecesariamente el número de celdas en todo el dominio. Sin embargo, su aplicación en modelos 3D heterogéneos puede incrementar de forma considerable el costo computacional y generar dificultades de convergencia durante las transiciones entre refinamiento y coarsening.

Otra línea relevante es la representación de frente móvil. Hwang et al. (1982) desarrollaron un enfoque en el cual la zona de combustión se trata como una entidad espacial o superficie móvil, separada de las propiedades promedio de la celda que la contiene. Esta idea es conceptualmente importante porque reconoce que el frente reactivo no siempre puede representarse adecuadamente

como una propiedad homogénea del bloque. Al aislar matemáticamente la posición del frente, se reduce el efecto del promediado térmico y se mejora la descripción del avance de la zona reactiva. No obstante, estos modelos implican mayor complejidad algorítmica, especialmente cuando el frente se deforma en geometrías heterogéneas o bajo condiciones de flujo no uniforme.

Una tercera familia de estrategias se basa en funciones de activación térmica y umbrales cinéticos. En este caso, el objetivo no es modificar la geometría de la malla, sino controlar cuándo una reacción puede activarse o desactivarse dentro del simulador. Estas herramientas suelen emplear temperaturas mínimas o máximas de reacción, criterios de activación y restricciones de estabilidad para evitar extinciones numéricas prematuras o picos térmicos no representativos. En simuladores comerciales como CMG STARS, este tipo de control puede implementarse mediante opciones que regulan la activación térmica, la dependencia respecto al oxígeno o la limitación por transporte de masa. Estas herramientas son útiles para mejorar la estabilidad del modelo, aunque por sí solas no definen una correlación física del combustible depositado.

De manera complementaria, la literatura reporta enfoques sub-grid o modelos internos de celda. Estos métodos buscan representar fenómenos que ocurren a una escala menor que el tamaño de la celda, sin exigir refinamiento explícito en todo el dominio. Trabajos como los de Sadeghi et al. (2007), Zhu (2011) y Nissen et al. (2015) se ubican en esta familia al modificar parámetros cinéticos efectivos o al representar la fracción reactiva de la celda de forma equivalente. La ventaja de estos enfoques es que permiten simular procesos de campo con menor costo computacional que una discretización fina en todo el dominio. Su limitación principal es que suelen requerir calibración específica para el sistema roca-fluido, la red de reacciones y el tamaño de celda seleccionado.

En conjunto, estas estrategias muestran que la dependencia de malla puede abordarse desde tres ejes principales. El primero es geométrico-computacional, representado por AMR, mallado dinámico y frente móvil. El segundo es cinético, asociado a modelos sub-grid, funciones de activación y parámetros efectivos. El tercero corresponde al control computacional de la activación y estabilidad de las reacciones dentro del simulador, mediante herramientas nativas que mejoran la estabilidad de las reacciones. La presente tesis se ubica en un eje complementario: la estimación local del combustible depositado como variable física de transferencia entre la escala de laboratorio y la escala de campo.

Desde esta perspectiva, la estimación de C_f no reemplaza el refinamiento adaptativo, los modelos de frente móvil ni las herramientas nativas del simulador. Su papel es diferente: proporcionar una representación más consistente de la disponibilidad local de combustible sobre la cual actúan las reacciones y los controles numéricos. Por tanto, el enfoque de esta investigación puede integrarse con estrategias geométricas, cinéticas o computacionales ya existentes. Esta lectura permite posicionar la tesis no como una sustitución de los métodos previos, sino como una contribución complementaria orientada a mejorar la transferencia física entre tubo de combustión, modelo de alta resolución y simulación de campo. Las estrategias y su complementariedad se resumen en la Tabla 4.

Tabla 4

Estrategias numéricas para mitigar la dependencia de malla y su complementariedad con la presente investigación

<i>Autor y año</i>	<i>Categoría</i>	<i>Principio</i>	<i>Variable controlada</i>	<i>Límite</i>	<i>Complementariedad</i>
Christensen et al. (2004)	AMR / mallado dinámico	Refina localmente la malla donde existen altos gradientes térmicos o reaccionales	Resolución espacial y térmica	Mayor costo computacional en 3D	Reduce el problema por vía geométrica
Hwang et al. (1982)	Frente móvil	Representa el frente como entidad espacial separada del bloque promedio	Localización del frente	Alta complejidad algorítmica	Trata el frente como fenómeno localizado
Sadeghi et al. (2007); Zhu (2011); Nissen et al. (2015)	Sub-grid / cinético	Ajusta parámetros efectivos o representa la fracción reactiva	Tasa cinética aparente	Calibración específica por sistema	Ruta cinética distinta a Cf local
Simuladores térmicos comerciales	Funciones nativas	Umbrales térmicos y controles cinéticos	Estabilidad numérica	No define correlación física de combustible	Complemento de la estimación local de Cf

Nota. Las categorías son orientativas; varias estrategias pueden ubicarse simultáneamente en más de un eje.

3.4 Antecedentes experimentales y numéricos en crudos pesados colombianos

La evaluación de la combustión in situ en crudos pesados colombianos ha requerido el desarrollo de antecedentes experimentales, cinéticos y numéricos propios, debido a que la respuesta termoquímica del proceso depende del sistema roca-fluido, de las condiciones operacionales y de la forma en que se representa el frente de combustión en laboratorio y simulación. En este contexto, diversos trabajos académicos y técnicos han contribuido a construir una base para interpretar la ignición, la propagación del frente, la cinética de reacción, la depositación de combustible y el escalamiento conceptual hacia modelos de mayor dimensión.

La caracterización experimental constituyó uno de los puntos de partida de esta línea de trabajo, mediante pruebas de tubo de combustión que aportaron información sobre ignición, comportamiento térmico y respuesta del sistema bajo inyección de aire. Estos antecedentes permitieron consolidar una base experimental para interpretar la combustión en sistemas roca-fluido de interés nacional.

A partir de dicha base, los estudios cinéticos buscaron representar con mayor precisión la evolución de las reacciones involucradas en ISC. Padilla (2016) desarrolló un modelo cinético mediante análisis isoconversional, con el propósito de describir la variación de la energía de activación durante la conversión del crudo. Este enfoque aportó una caracterización detallada del comportamiento reactivo, aunque su uso directo en simulaciones dinámicas de campo puede implicar mayor complejidad computacional.

Como fuente pública sobre datos experimentales de combustible depositado, Pinzón Díaz (2018) evaluó el efecto del flux de aire y de propiedades del medio poroso sobre la cantidad de

combustible depositado en un sistema roca-fluido colombiano. Su aporte principal fue identificar tendencias de C_f frente a variables como flux de aire, presión, porosidad y saturaciones. Sin embargo, como se discutió previamente, el trabajo no consolidó una ecuación multivariable cerrada directamente programable, sino que recomendó el uso de tablas e interpolaciones múltiples para estimar el combustible disponible. Esta limitación es relevante para simulaciones de campo, donde se requiere una función que permita asignar valores locales de C_f dentro del dominio de variables evaluado.

En paralelo, otros trabajos contribuyeron al desarrollo de capacidades de simulación numérica. Yatte Garzón (2011) analizó la influencia de la tasa de inyección de aire sobre perfiles de temperatura y gases de combustión mediante la simulación de una prueba de tubo. Este tipo de estudio aportó sensibilidad operacional en modelos 1D y permitió relacionar el suministro de aire con la respuesta térmica y composicional del proceso. De forma complementaria, Mercado Sierra y Trevisan (2014), aunque trabajaron con un crudo pesado brasileño, aportaron un referente metodológico para la simulación numérica de pruebas de tubo de combustión seca, útil como antecedente regional en el ajuste y análisis de modelos de laboratorio.

El escalamiento conceptual hacia dimensiones superiores fue abordado por Navarro García (2017), quien estudió perfiles de inyección de aire para mantener un frente de combustión estable en régimen de oxidación a alta temperatura en modelos conceptuales de crudos pesados. Su trabajo es relevante porque conecta la simulación de tubo con modelos 2D y 3D, mostrando que la estabilidad del frente depende de la configuración del suministro de aire y de la representación geométrica de la propagación. No obstante, el enfoque se centró principalmente en el control del

perfil de inyección y no en formular C_f como una variable local de transferencia entre laboratorio y campo.

La presente tesis se apoya en estos antecedentes para formular una estrategia metodológica propia, orientada a articular información experimental, modelamiento cinético, estimación del combustible depositado y evaluación numérica a escala de campo. Su aporte se centra en construir una correlación empírico-numérica multivariable de C_f , válida dentro del dominio evaluado, que pueda emplearse como variable física de enlace entre el comportamiento observado a escala de laboratorio y la simulación de campo.

A partir de esta revisión se identifican dos vacíos principales. Primero, la ausencia de una correlación multivariable cerrada y programable para estimar C_f en un sistema roca-fluido colombiano, superando la dependencia exclusiva de tablas e interpolaciones. Segundo, la falta de una metodología integrada que conecte la caracterización experimental, la cinética simplificada, la estimación local de combustible y la simulación con celdas de escala de campo bajo un mismo marco de escalamiento. Estos vacíos justifican la orientación de la presente investigación y permiten cerrar el estado del arte con una brecha concreta y defendible. Los trabajos previos que sustentan esta síntesis se resumen en la Tabla 5.

Tabla 5

Trabajos previos sobre combustión in situ y simulación térmica relacionados con crudos pesados colombianos

<i>Autor / año</i>	<i>Tipo de estudio</i>	<i>Variable principal</i>	<i>Aporte específico</i>	<i>Relación</i>
Yatte Garzón (2011)	Simulación 1D	Tasa de inyección, temperatura, gases	Sensibilidad de la prueba de tubo a la inyección de aire	Antecedente de ajuste y análisis numérico 1D
Mercado Sierra y Trevisan (2014)	Simulación numérica de tubo (Brasil)	Perfil térmico y respuesta del tubo	Referente metodológico sudamericano en simulación de tubo	Apoya la estructura de modelamiento de laboratorio
Padilla (2016)	Cinético	Energía de activación, conversión	Modelo cinético mediante análisis isoconversional	Soporta la comprensión cinética del proceso
Navarro García (2017)	Simulación 2D/3D	Perfil de inyección y estabilidad HTO	Escalamiento conceptual hacia geometrías superiores	Conecta la estabilidad del frente con condiciones operacionales
Pinzón Díaz (2018)	Experimental / numérico	Cf, flux, presión, porosidad, saturaciones	Identifica tendencias de combustible depositado	Antecedente directo de la correlación empírico-numérica

Nota. La columna de relación describe el rol específico de cada antecedente dentro del flujo metodológico integrador propuesto.

3.5 Brecha de conocimiento

La revisión de la literatura presentada en el Capítulo 3 permite establecer un panorama sobre los avances y desafíos persistentes en la simulación de combustión in situ. En la sección 3.1 se examinaron las correlaciones históricas formuladas para estimar el combustible depositado, Cf, evidenciando sus límites de aplicabilidad en sistemas roca-fluido diferentes a aquellos para los

cuales fueron desarrolladas. La sección 3.2 abordó el escalamiento laboratorio-campo y la sensibilidad de los simuladores térmicos al tamaño de celda. La sección 3.3 revisó estrategias numéricas y computacionales para mitigar dicha dependencia. Finalmente, la sección 3.4 consolidó los antecedentes experimentales, cinéticos y numéricos desarrollados en el contexto de crudos pesados colombianos.

A partir de esta revisión se identifican tres brechas principales. La primera corresponde a la ausencia de una correlación local cerrada y programable para el combustible depositado. Las aproximaciones clásicas reconocen la importancia de C_f para la propagación del frente de combustión; sin embargo, no ofrecen una correlación multivariable cerrada aplicable a un sistema roca-fluido colombiano. En el contexto local, Pinzón Díaz (2018) identificó tendencias de depositación frente a variables como flux de aire, presión, porosidad y saturaciones, pero recomendó el uso de tablas e interpolaciones múltiples ante la dispersión de los datos. Esta limitación dificulta la asignación automatizada y heterogénea de C_f en celdas de simulación a escala de campo.

La segunda brecha se relaciona con el predominio de enfoques cinéticos en las estrategias de escalamiento. Métodos como los propuestos por Sadeghi et al. (2007), Zhu (2011) y Nissen et al. (2015) buscan reducir la dependencia de malla mediante ajustes de parámetros cinéticos, formulaciones efectivas o modificaciones dependientes del tamaño de celda. Estas estrategias han contribuido a preservar la propagación del frente en mallas gruesas, pero no estiman directamente el combustible depositado como una variable local asociada a condiciones de roca, fluido y operación.

La tercera brecha corresponde a la falta de integración metodológica de los antecedentes locales. Existen avances en caracterización experimental, análisis isoconversional, simulación de

pruebas de tubo y escalamiento conceptual, como los desarrollados por Pinzón Díaz (2018), Padilla (2016) y Navarro García (2017), complementados por marcos metodológicos de simulación de tubo como el de Mercado Sierra y Trevisan (2014), adaptables al contexto local. Aun así, estos aportes permanecen parcialmente fragmentados y no conforman todavía un flujo de trabajo unificado que conecte la caracterización experimental, la estimación empírico-numérica de C_f y la simulación a escala de campo.

Esta tesis se estructura con el propósito de abordar las brechas previamente declaradas mediante un enfoque integrador orientado a estimar el combustible depositado como variable física de enlace entre laboratorio y simulación de campo. El diseño de la ruta de trabajo concebida para abordar estas brechas se desarrolla en el Capítulo 4, donde se describe el flujo metodológico, las variables consideradas, los escenarios de simulación y los criterios de evaluación adoptados. La correspondencia entre las brechas identificadas y el aporte de la tesis se resume en la Tabla 6.

Tabla 6

Brechas de conocimiento identificadas y correspondencia con el aporte de la tesis

<i>Brecha identificada</i>	<i>Sustento en el Capítulo 3</i>	<i>Aporte general de la tesis</i>
Ausencia de una correlación local cerrada y programable para C_f	Secciones 3.1 y 3.4	Estimación empírico-numérica multivariable de C_f dentro del dominio evaluado
Predominio de estrategias centradas en ajustes cinéticos	Secciones 3.2 y 3.3	Enfoque complementario basado en combustible depositado como variable física local
Falta de integración metodológica de antecedentes locales	Sección 3.4	Flujo de trabajo que conecta caracterización, cinética, C_f y simulación con dimensiones de celda a escala de campo

Nota. La tabla sintetiza la correspondencia entre las brechas identificadas en el estado del arte y la contribución general de la presente investigación.

4. Metodología

4.1 Visión general del flujo metodológico

La metodología de esta investigación se estructuró para desarrollar una estrategia empírico-numérica orientada a estimar el combustible depositado y evaluar su uso como variable física de enlace entre la escala de tubo de combustión y modelos de simulación de mayor escala. Como base experimental se adoptaron resultados de una prueba de tubo de combustión reportada por Pinzón Díaz (2018), realizada a 1200 psig y con un flux de aire de $32 \text{ m}^3(\text{ST})/\text{m}^2\cdot\text{h}$. Esta información sirvió como base para la calibración y comparación del modelo numérico, a partir del cual se desarrollaron las etapas posteriores de diseño de experimentos, construcción de la correlación y evaluación en modelos de campo.

En esta investigación, el término escalamiento se emplea en el sentido de escalamiento numérico y metodológico de la simulación de combustión in situ. En consecuencia, no corresponde a un escalamiento clásico basado en similitud dinámica mediante números adimensionales, tales como Damköhler, Biot u otros grupos de semejanza. El propósito no es derivar una ley general de escalamiento físico entre laboratorio y campo, sino transferir información experimental del tubo de combustión hacia modelos de simulación con celdas de mayor tamaño. Esta transferencia se realiza mediante la reparametrización del combustible depositado como una variable local, estimada a partir de una correlación empírico-numérica e incorporada posteriormente como condición inicial de coque celda a celda. Por tanto, el escalamiento abordado corresponde a una estrategia de representación numérica del combustible disponible para sostener el frente de

combustión, orientada a reducir la dependencia asociada al tamaño de celda durante la evaluación en modelos de campo, dentro del alcance de esta investigación.

La metodología se fundamentó en la construcción de un modelo numérico propio de tubo de combustión 1D, diseñado para representar la generación y el consumo de combustible depositado bajo condiciones controladas. Como soporte experimental se consideró la información reportada por dicho autor, principalmente en lo relacionado con el sistema roca-fluido colombiano. Con esta base, se desarrolló un flujo metodológico orientado a generar escenarios de simulación, construir una correlación empírico-numérica programable para el combustible depositado y evaluar su transferencia hacia modelos de campo bajo diferentes tamaños de celda.

El desarrollo metodológico se organizó en tres fases macro. La primera corresponde a la construcción y calibración del modelo numérico unidimensional de tubo de combustión. La segunda integra la definición de variables candidatas, la generación de escenarios mediante diseño de experimentos y la construcción de la correlación empírico-numérica del combustible depositado y la fracción que se deposita con respecto al crudo inicial (C_f y F_c). La tercera comprende la inicialización del coque en modelos de evaluación de complejidad creciente y la comparación de sensibilidad al tamaño de celda frente al esquema cinético convencional.

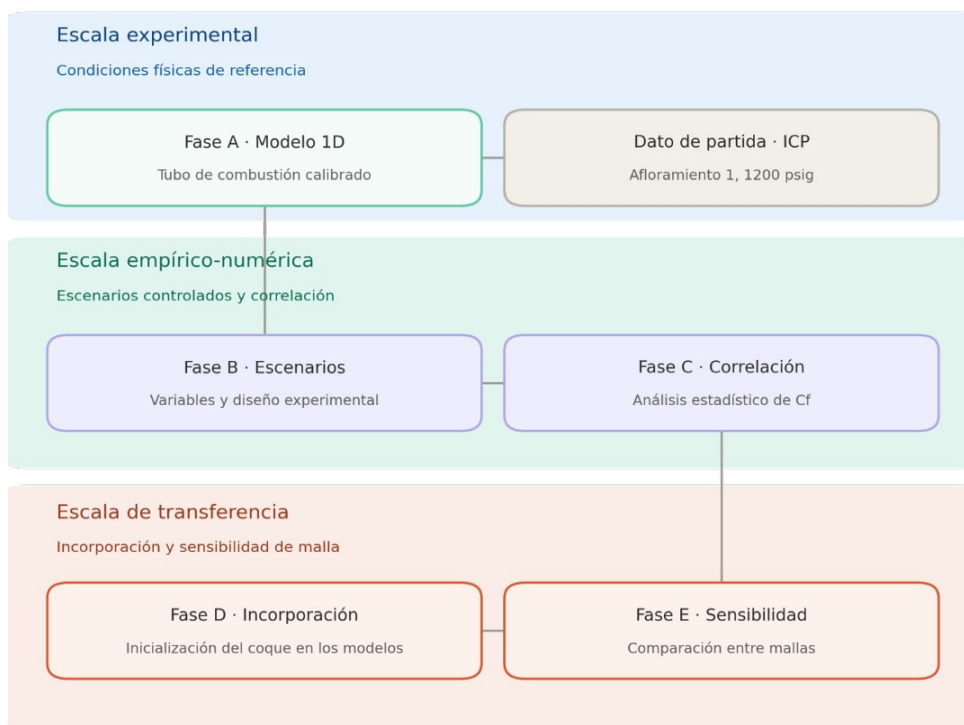
Este flujo metodológico permite diferenciar tres niveles de trabajo. El primer nivel corresponde a la escala experimental, donde se definen las condiciones físicas de referencia y las variables de interés. El segundo nivel corresponde a la escala empírico-numérica, en la cual se generan escenarios controlados y se evalúa la relación entre el combustible depositado y las variables candidatas. El tercer nivel corresponde a la escala de transferencia, donde la estimación

de C_f se incorpora a los modelos numéricos para analizar su efecto sobre la propagación del frente, parámetros de desempeño de la combustión y la sensibilidad al tamaño de celda.

En este sentido, la metodología no busca sustituir la cinética de combustión previamente calibrada ni reemplazar las estrategias de escalamiento existentes, sino complementar el modelamiento mediante una estimación local del combustible disponible. La correlación resultante se interpreta como una herramienta válida dentro del dominio de variables evaluado y no como una formulación universal para cualquier crudo, roca o condición operacional. Esta delimitación permite mantener la trazabilidad entre el antecedente experimental, la generación de escenarios, el análisis estadístico y la evaluación numérica de la estrategia propuesta. El flujo metodológico resultante se resume en la Figura 8.

Figura 8

Flujo metodológico general del trabajo



La articulación entre las fases se sustenta en tres principios metodológicos. Primero, el modelo 1D debe reproducir de manera representativa el comportamiento experimental sin imposición artificial de perfiles térmicos. Segundo, la cinética calibrada en el régimen del tubo de combustión debe mantenerse dentro del rango paramétrico evaluado en el diseño de experimentos. Tercero, la correlación del combustible depositado debe responder físicamente a variaciones de porosidad, saturación inicial de aceite, permeabilidad y flux de aire, preservando las sensibilidades reportadas en la literatura (Belgrave et al., 1993; Sarathi, 1999).

4.2 Fase A: construcción y calibración del modelo 1D de tubo de combustión

La Fase A tuvo como propósito construir un modelo numérico unidimensional representativo de una prueba de tubo de combustión, orientado a reproducir la generación, acumulación y consumo del combustible depositado bajo condiciones controladas. El modelo fue desarrollado en CMG STARS, empleando una geometría radial equivalente al reactor de laboratorio y un esquema composicional capaz de representar agua, aceite, gases de combustión y fases sólidas asociadas al combustible carbonoso.

El modelo 1D se utilizó para evaluar la respuesta del combustible depositado frente a cambios en variables petrofísicas y operacionales. La calibración se verificó mediante comparación con información experimental disponible, principalmente perfiles térmicos, composición de gases efluentes y parámetros de desempeño de la combustión. Una vez verificado el comportamiento base, el modelo fue empleado para generar escenarios controlados que alimentaron la construcción de la correlación empírico-numérica de Cf.

4.2.1 Configuración geométrica y propiedades del sistema

El modelo numérico se construyó en CMG STARS 2021 preservando la geometría cilíndrica radial del reactor experimental reportado por Pinzón Díaz (2018). La malla está compuesta por 5 celdas radiales ($I = 1$ a 5) y 178 celdas axiales ($K = 1$ a 178), con simetría angular ($J = 1$). El espesor radial se distribuye como cuatro celdas de 1.22 cm correspondientes al medio poroso y una celda externa de 0.375 cm que representa la camisa metálica del reactor. El espesor axial es de 1.108 cm/celda, generando una longitud total efectiva del medio poroso de 197 cm, congruente con la geometría del tubo de combustión (Pinzón Díaz, 2018).

Las propiedades petrofísicas y de fluidos se asignaron a partir de información experimental disponible para el sistema roca-fluido de estudio y se compararon con la configuración reportada por Pinzón Díaz (2018) para garantizar trazabilidad. La Tabla 7 resume las propiedades adoptadas y su consistencia con la prueba experimental.

Las curvas de permeabilidad relativa agua-aceite y líquido-gas se incorporaron al archivo de datos del modelo a partir de información experimental reportada por Pinzón Díaz (2018). El sistema asume una porosidad efectiva del 40 %, medida sobre el empaquetamiento de arena del sistema roca-fluido de estudio, con distribución granulométrica predominante entre 425 y 300 μm . Las curvas adoptadas se presentan en la Figura 10.

Figura 9

Configuración geométrica del modelo numérico unidimensional

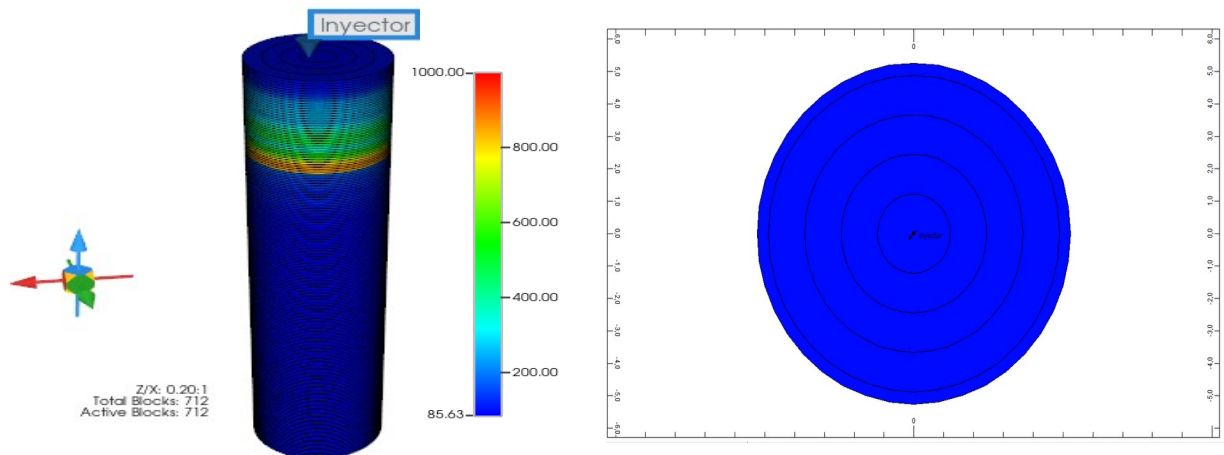


Tabla 7

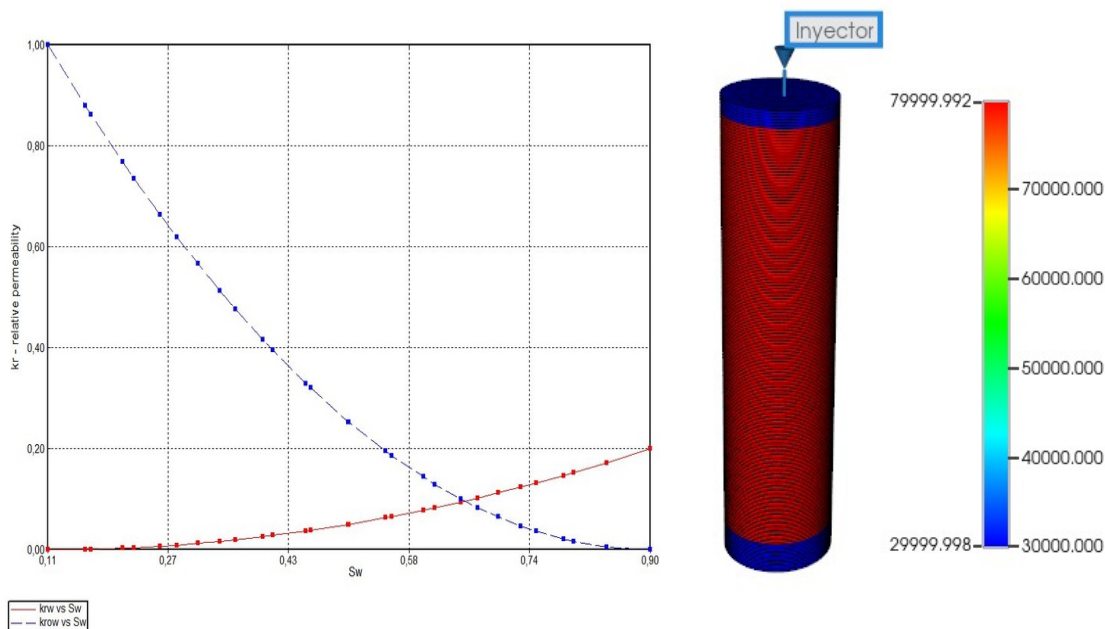
Configuración geométrica y propiedades base del modelo numérico 1D

<i>Parámetro</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidad</i>
Tipo de discretización	Radial cilíndrico	—
Divisiones radiales	4	—
Divisiones angulares	1	—
Divisiones axiales	178	—
Radio externo del modelo	4.88	cm
Diámetro efectivo	9.76	cm
Longitud efectiva	197.26	cm
Espesor de celda axial	1.1082	cm
Espesor de celda radial	1.22	cm
Ángulo de barrido	360	°
Total de celdas activas	712	—
Porosidad de la zona de empaque (extremos)	0.45	fracción
Permeabilidad de la zona de empaque	30 000	mD
Porosidad base de la zona reactiva (caso ref.)	0.41	fracción
Permeabilidad base de la zona reactiva	80 000	mD
Presión inicial	8 273.7	kPa
Temperatura inicial	86	°C
Ubicación pozo inyector	(1, 1, 1)	—
Ubicación pozo productor	(1, 1, 178)	—

Nota. Las celdas axiales 1 a 6 y 167 a 178 corresponden a la arena de empaque destinada a la dispersión y captación de fluidos.

Figura 10

Permeabilidad absoluta y curvas de permeabilidad relativa agua-aceite



4.2.2 Modelo cinético

La representación cinética de un proceso de combustión in situ requiere un esquema reactivo que capture los principales mecanismos termoquímicos sin introducir un número excesivo de parámetros ajustables. Los esquemas elementales detallados, aunque químicamente rigurosos, resultan inviables para la simulación numérica de yacimientos por la dificultad de calibrar cada constante cinética y por el costo computacional asociado (Belgrave et al., 1993; Crookston et al., 1979). Por ello, los enfoques actuales privilegian esquemas agrupados que conservan la fenomenología esencial del proceso y resultan manejables para el análisis a escala de campo.

Bajo este criterio, el punto de partida fue el esquema de cuatro reacciones de Cinar et al. (2011), aplicado previamente a sistemas roca-fluido colombianos de crudo pesado. Padilla (2016)

obtuvo los parámetros cinéticos asociados mediante análisis isoconversional sobre pruebas de oxidación con rampa de temperatura, y Pinzón Díaz (2018) verificó su capacidad para reproducir los resultados experimentales de las pruebas de tubo de combustión sobre el sistema colombiano. Este esquema agrupa la oxidación a baja temperatura (LTO), la oxidación a alta temperatura (HTO) del primer combustible sólido, el craqueo que lo transforma en un segundo combustible y la HTO de este último.

Sobre esta base, en la presente investigación el esquema se extendió a cinco reacciones mediante la incorporación de una reacción adicional de oxidación a baja temperatura temprana de la fracción aromática del crudo. Esta extensión responde a la necesidad de representar el régimen LTO temprano sin recurrir a la imposición de perfiles de temperatura, una dificultad discutida en antecedentes experimentales y numéricos disponibles para sistemas roca-fluido colombianos de crudo pesado. El esquema completo, con sus reacciones, estequiometría y parámetros cinéticos, así como el procedimiento de ajuste de la reacción incorporada, se detalla en la Sección 4.2.3.

En esta investigación, la expresión “cinética no Arrhenius” no se emplea para indicar que las reacciones químicas hayan sido formuladas con una ley cinética diferente a la ecuación de Arrhenius. Las reacciones implementadas en el simulador conservan una estructura cinética tipo Arrhenius, definida mediante energía de activación, factor pre-exponencial, temperatura y concentración de reactivos. El uso del término se refiere, en sentido metodológico, a una estrategia no convencional de representación del proceso, en la cual la formación dinámica del combustible sólido se sustituye por una inicialización controlada del coque, calculada a partir de una correlación empírico-numérica y de un balance de masa local. Por tanto, la modificación principal no corresponde a una nueva ley cinética química, sino a una reparametrización del balance de masa del combustible disponible para la reacción de alta temperatura. Esta aclaración permite diferenciar

la formulación cinética empleada por el simulador de la estrategia numérica propuesta para reducir la dependencia asociada al tamaño de celda.

Tabla 8

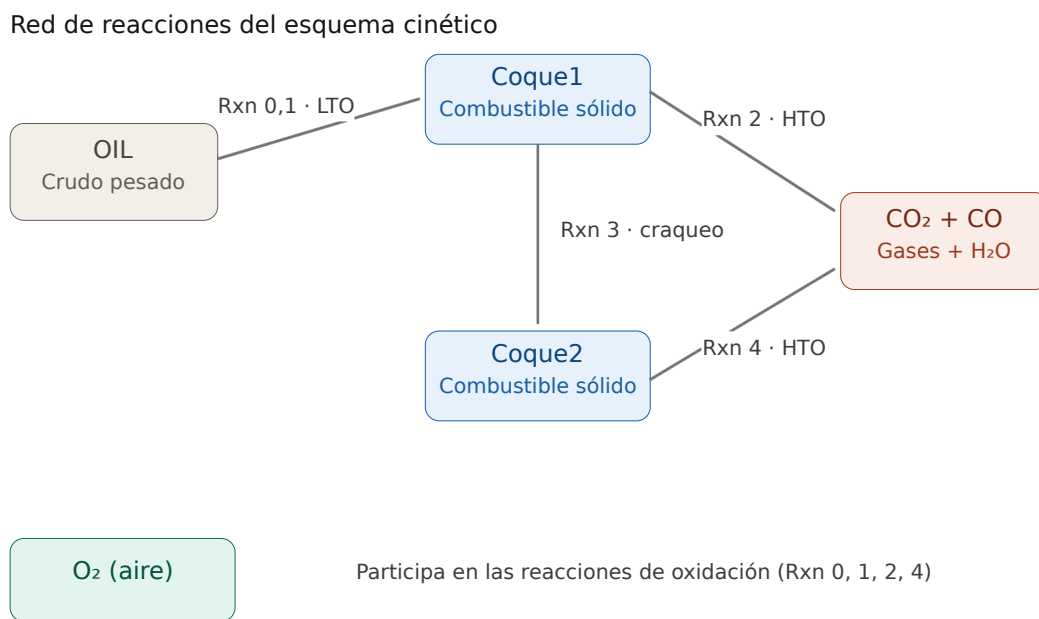
Esquema reaccional adoptado en el modelo numérico 1D

<i>N°</i>	<i>Reacción</i>	<i>Tipo</i>	<i>Ea (kJ/mol)</i>	<i>ΔH (J/gmol)</i>
0	$\text{OIL} + 0,5 \text{ O}_2 \rightarrow 0,95 \text{ OIL} + 2,15 \text{ H}_2\text{O} + 0,05 \text{ Coque1}$	Adición de oxígeno	69	250 000
1	$\text{OIL} + 7,27 \text{ O}_2 \rightarrow 14,54 \text{ H}_2\text{O} + 23,61 \text{ Coque1}$	Adición de oxígeno	100	2 194 085
2	$\text{Coque1} + 1,43 \text{ O}_2 \rightarrow 1,29 \text{ CO}_2 + 0,28 \text{ CO}$	Combustión LTO	114	626 921
3	$\text{Coque1} \rightarrow 1,38 \text{ Coque2}$	Craqueo térmico	60	0
4	$\text{Coque2} + 1,03 \text{ O}_2 \rightarrow 0,93 \text{ CO}_2 + 0,20 \text{ CO}$	Combustión HTO	140	453 517

Los parámetros cinéticos del esquema se presentan en la Tabla 9 e incluyen la energía de activación, el factor pre-exponencial, el orden de reacción y la entalpía de cada reacción. Los valores adoptados provienen del análisis isoconversional de Padilla (2016). Esta metodología estima la energía de activación de forma independiente de los órdenes de reacción asumidos a priori, lo que reduce el sesgo de calibración frente a los métodos convencionales basados en una sola prueba experimental. Las velocidades de reacción se calculan con la expresión de Arrhenius, y las reacciones de oxidación incorporan una dependencia explícita de la presión parcial de oxígeno, necesaria para representar el efecto del suministro de aire sobre la velocidad del frente.

Figura 11

Diagrama de la red de reacciones del esquema cinético adoptado



LTO: oxidación a baja temperatura · HTO: oxidación a alta temperatura.

La estequiometría de cada reacción se determinó mediante balances de masa entre los reactivos consumidos y los productos generados, conservando la consistencia química y termodinámica del sistema. Los coeficientes estequiométricos se vinculan a las relaciones medidas de CO_2/CO y O_2/CO_2 , de modo que la representación numérica refleje el comportamiento oxidativo observado para el sistema roca–fluido en estudio.

En conjunto, el esquema adoptado conserva los rasgos termoquímicos esenciales de la combustión in situ con un número reducido de parámetros, mantiene continuidad con los antecedentes locales y resulta viable para ejecutar un diseño de experimentos extenso, condición

necesaria para construir la correlación empírico-numérica de combustible depositado, cuyo procedimiento metodológico se describe en la Sección 4.3.

Tabla 9

Componentes del modelo composicional

<i>N°</i>	<i>Componente</i>	<i>Tipo</i>	<i>Peso molecular (kg/mol)</i>
1	WATER	Líquido condensable	0.018
2	OIL	Líquido condensable	0.473
3	N ₂	Gas no condensable	0.028
4	O ₂	Gas no condensable	0.032
5	CO ₂	Gas no condensable	0.044
6	CO	Gas no condensable	0.028
7	Coque1	Sólido	0.0188
8	Coque2	Sólido	0.0136

El sistema composicional adoptado consta de ocho componentes, presentados en la Tabla 9. La selección responde a tres criterios. Primero, la representación de las fases líquida (agua y aceite) y gaseosa no condensable (nitrógeno, oxígeno, dióxido de carbono y monóxido de carbono), suficientes para describir el balance global de masa y la composición de gases efluentes monitoreada experimentalmente. Segundo, la inclusión de dos componentes sólidos (Coque1 y Coque2) que permiten diferenciar el combustible inicialmente depositado por reacciones de adición de oxígeno del combustible posterior al craqueo térmico, manteniendo la distinción

fenomenológica entre ambos sin recurrir a una representación composicional más detallada. Tercero, la omisión de gases hidrocarburos livianos producto de la pirólisis se justifica considerando que su efecto sobre el balance global de masa y energía es secundario frente al de las reacciones principales, y que su inclusión incrementaría sin beneficio sustancial el número de parámetros del modelo.

4.2.3 Calibración experimental

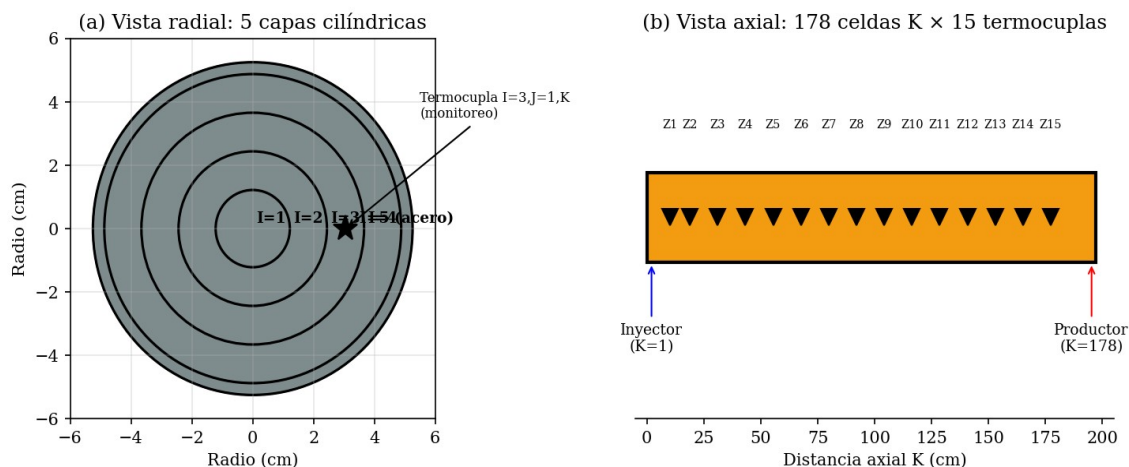
La calibración del modelo numérico 1D se planteó como una etapa de verificación y ajuste del comportamiento térmico, composicional y reactivo del sistema bajo condiciones controladas de tubo de combustión. En este tipo de ensayos, la respuesta del proceso no se evalúa solo a partir de la temperatura máxima, sino mediante un conjunto de señales complementarias: perfiles térmicos, consumo de oxígeno, generación de gases de combustión, avance del frente y balance de combustible disponible. Este enfoque es coherente con la literatura clásica sobre tubos de combustión, en la que el seguimiento térmico y la composición de gases efluentes son las variables principales para interpretar la propagación del frente y el régimen de oxidación (Penberthy y Ramey, 1966; Showalter, 1963; Wu y Fulton, 1971).

La verificación térmica se sustentó en el seguimiento de temperaturas en posiciones axiales representativas del tubo. Se adoptó este criterio porque el desplazamiento secuencial de los picos de temperatura permite identificar la propagación de la zona de alta temperatura y diferenciar la ignición, la propagación estable y los efectos de borde del ensayo. Un modelo de tubo debe reproducir de forma representativa el avance de la zona caliente, ya que esta variable integra la

generación de calor, el transporte de aire, la disponibilidad de combustible y la transferencia térmica. La posición de las termocupas empleadas en esta verificación se muestra en la Figura 12.

Figura 12

Esquema de posición de las termocupas en el tubo de combustión



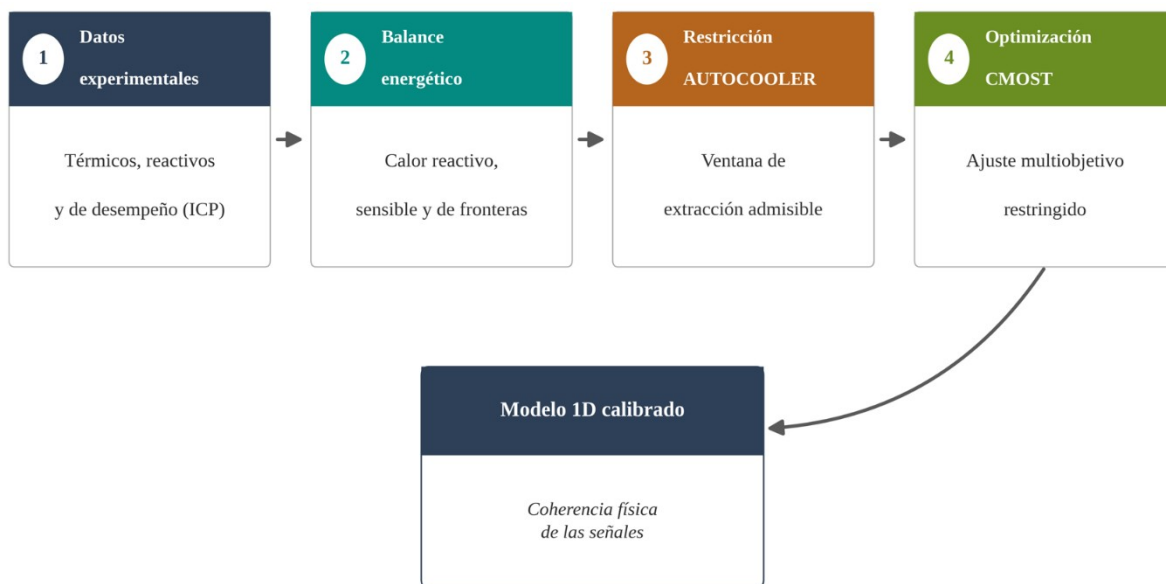
La verificación composicional se basó en la evolución de las fracciones molares de O_2 , CO_2 y CO en los gases efluentes. El consumo de O_2 indica si el oxidante está siendo utilizado por el frente reactivo, mientras que la producción de CO_2 y CO permite interpretar el grado relativo de oxidación y la coherencia de los productos de combustión. Esta selección se fundamenta en los modelos cinéticos y experimentales de combustión in situ, donde la composición de los gases producidos se usa para inferir la eficiencia de combustión, las relaciones estequiométricas y el comportamiento del régimen HTO (Belgrave et al., 1993; Burger y Sahuquet, 1972; Fassihi et al., 1984).

Además, se monitoreó el avance del frente térmico y las variables asociadas al combustible sólido, porque el objetivo de esta investigación no se limita a reproducir perfiles de temperatura, sino que busca cuantificar el combustible depositado como variable de enlace entre la escala de

tubo y la simulación de campo. La literatura clásica ha reconocido que la cantidad de combustible disponible controla el requerimiento de aire, la velocidad de avance del frente y la estabilidad de la combustión (Alexander et al., 1962; Gates y Ramey, 1980). Para el sistema roca–fluido de interés, se cuenta además con datos experimentales de tubo de combustión y pruebas de oxidación reportadas en fuentes académicas disponibles para sistemas roca-fluido colombianos (Pinzón Díaz, 2018), que sirven como referencia de comparación. El flujo integrado de calibración se resume en la Figura 13.

Figura 13

Flujo metodológico de la calibración térmico-reactiva del modelo 1D



En esta investigación, la información experimental disponible se utilizó como referencia técnica para verificar el modelo propio, sin reproducir directamente modelos numéricos previos. Por ello, el criterio de aceptación no fue la coincidencia exacta punto a punto, sino la coherencia física de las señales principales: avance progresivo del frente, consumo de oxígeno, producción de

gases de combustión y generación o consumo de combustible sólido. Las salidas de simulación revisadas como temperatura axial, posición del frente, fracciones molares de N_2 , O_2 , CO_2 y CO , concentraciones sólidas y balances de reacción, permiten vincular las variables observables del tubo con las variables internas necesarias para calcular Cf.

Tabla 10

Variables de referencia para la calibración térmico-reactiva del modelo 1D

Grupo	Variable experimental	Uso en la calibración	Confianza
Térmico	Temperaturas del núcleo (T1–T15)	Curva térmica, arribo del frente y T máxima	Alto
Térmico	Temperaturas de pared	Control centro–pared y borde térmico	Alto/medio
Reactivo	Fracciones efluentes de O_2 , CO_2 y CO	Consumo de O_2 y selectividad de combustión	Alto
Reactivo	Agua formada y relación H/C	Control de rutas LTO/HTO	Medio/alto
Energético	Calor reactivo experimental	Restricción del calor de reacción	Alto
Global	Velocidad del frente	Validación de la propagación del frente	Alto

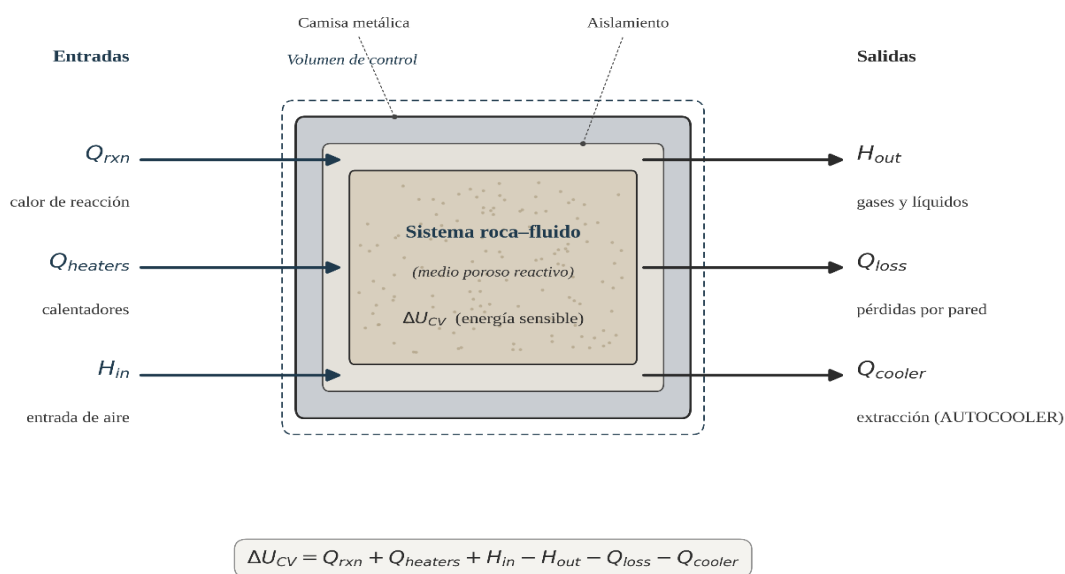
Un aspecto central del montaje experimental es que el reactor no operó como un tubo adiabático ideal, sino bajo un esquema de control térmico con calentadores zonales, camisa metálica y aislamiento. En consecuencia, los perfiles de temperatura no son la respuesta aislada de la cinética del crudo, sino el resultado de un sistema acoplado entre el calor de reacción, la transferencia de calor, el almacenamiento sensible y la regulación externa. En el modelo numérico, el mecanismo de extracción térmica se interpretó como una representación efectiva de ese amortiguamiento, y no como una pérdida de calor medida directamente. Esta decisión evita dos

extremos. Por un lado, un modelo casi adiabático que genera picos térmicos no representativos. Por otro lado, un sumidero artificial que distorsiona la propagación del frente.

Para que esta extracción no se comportara como un parámetro libre, su magnitud se acotó mediante un balance energético construido a partir de la información experimental disponible. El calor de reacción se estimó por vías termodinámicas independientes (composición de gases efluentes y consumo de combustible) y se contrastó con el aporte de los calentadores zonales, determinado a partir de los registros del sistema de adquisición de datos del reactor. De este modo, la calibración del comportamiento térmico quedó sujeta a una restricción energética con sustento experimental, y no a un ajuste puramente visual. El esquema conceptual de este balance y control térmico se presenta en la Figura 14.

Figura 14

Esquema conceptual del ajuste energético y control térmico del modelo 1D



Bajo este enfoque, el criterio de aceptación no fue la coincidencia exacta punto a punto, sino la coherencia física de las señales principales: avance progresivo del frente, consumo de oxígeno, producción de gases de combustión, agua formada y generación o consumo de combustible sólido. La reducción de los picos térmicos se abordó principalmente mediante la cinética de oxidación a alta temperatura y el control proporcional de la camisa, manteniendo la extracción térmica dentro del rango energético admisible. Los resultados cuantitativos de esta calibración, incluyendo el balance energético detallado y los parámetros finales, se presentan en la Sección 5.1.

Una vez verificado el comportamiento base, el modelo se empleó para la generación de múltiples escenarios. La calibración contra datos experimentales debe entenderse, entonces, como una etapa de control metodológico: habilita el uso del modelo 1D para el análisis comparativo y la estimación de F_c y C_f dentro del dominio evaluado, sin asumir que el tubo reproduce por sí solo la complejidad de un yacimiento.

4.2.4 Variables monitoreadas

El archivo de datos del modelo incorporó un conjunto extendido de variables de monitoreo, diseñado para soportar la calibración del modelo 1D y la posterior construcción de la correlación de combustible depositado. La Tabla 11 enumera las principales variables capturadas durante cada simulación.

Tabla 11

Variables de salida monitoreadas en el modelo numérico 1D

<i>Variable</i>	<i>Categoría</i>	<i>Propósito</i>
Temperatura por zona axial	Térmica	Construcción de perfiles térmicos comparables con los termopares experimentales
Posición del frente a 400 °C	Térmica	Estimación de la velocidad de propagación del frente
Temperatura máxima del modelo	Térmica	Caracterización del pico térmico del frente
Fracción molar de N ₂ en productor	Composicional	Verificación del balance de gases del proceso
Fracción molar de O ₂ en productor	Composicional	Cuantificación del consumo de oxígeno
Fracción molar de CO ₂ y CO en productor	Composicional	Identificación del régimen de oxidación predominante
Concentración sólida de Coque1	Combustible sólido	Seguimiento de la formación inicial de combustible
Concentración sólida de Coque2	Combustible sólido	Seguimiento del combustible generado por craqueo
Combustible depositado, Cf	Combustible sólido	Variable central de la investigación
Saturaciones de aceite, agua y gas	Espacial	Identificación de bancos y zonas características del frente
Balance de masa de reactivos y productos	Global	Validación termoquímica del modelo
Velocidad del frente (parámetro agregado)	Desempeño global	Caracterización integrada del proceso
Requerimiento de aire	Desempeño global	Indicador de diseño del proceso
Relación H/C, relación CO ₂ /CO	Desempeño global	Diagnóstico del régimen oxidativo predominante

Esta configuración permitió que el archivo de resultados (.sr3) contenga todas las variables necesarias para realizar history matching contra los perfiles térmicos experimentales en las quince zonas; verificar el balance estequiométrico contra los gases efluentes; cuantificar el combustible

depositado (C_f) por integración espacial; evaluar la energía perdida por las fronteras del sistema; y trazar la evolución temporal de la zona reactiva a través de las saturaciones puntuales.

4.3 Fase B: diseño de experimentos y construcción de la correlación de combustible depositado

La combustión in situ es un proceso de recuperación mejorada de crudos pesados cuyo diseño exige predecir la cantidad de combustible sólido (coque) que se deposita durante el avance del frente. Esta variable, el combustible depositado C_f , gobierna el consumo de oxígeno, la duración del proceso y la viabilidad económica del proyecto (Mamora, 1993; Sarathi, 1999). Estimarla de forma confiable es, por tanto, una condición necesaria para escalar el proceso desde el laboratorio hacia el yacimiento.

En este trabajo, el combustible depositado se expresa de dos maneras. La primera corresponde a la fracción de aceite inicial transformada en combustible, F_c . La segunda corresponde al requerimiento volumétrico de combustible, C_f , expresado en kg/m³.

$$C_f = \frac{M \cdot \text{Coque Depositado}_{(zona\ estable)}}{V_{rock}} \quad (1)$$

$$X_f = \frac{M \cdot \text{Coque Depositado}_{(zona\ estable)}}{M \cdot \text{Oil}_{inicial}} \quad (2)$$

4.3.1 Propósito de la Fase B

En esta fase se construyó una correlación empírico-numérica de C_f a partir de un diseño de experimentos aplicado al modelo numérico 1D calibrado en la Fase A. Dicho modelo se fundamentó en información experimental pública proveniente de una prueba de tubo de combustión sobre un sistema roca–fluido colombiano de crudo pesado. Sobre esa base se analizó la relación entre las condiciones de operación, las propiedades del medio poroso y la cantidad de combustible depositado durante el proceso.

El combustible depositado se abordó como la variable de enlace entre la escala de tubo y los modelos multidimensionales a escala de campo. Su estimación no se limitó a reproducir una salida puntual del simulador, sino que se orientó a construir una respuesta transferible, expresada tanto como fracción del aceite convertido en combustible como en términos del requerimiento volumétrico C_f . Esta doble formulación permite distinguir entre la cantidad absoluta de combustible generada en el tubo y la forma en que esa cantidad debe incorporarse en celdas de distinto tamaño, porosidad y saturación.

La relevancia de C_f radica en que condiciona el consumo de oxígeno, el requerimiento de aire, la velocidad de avance del frente y la estabilidad de la combustión. Por ello su cálculo no puede depender de una lectura puntual de temperatura ni de una respuesta acumulada del simulador: debe relacionarse con el balance de combustible disponible, la masa inicial de aceite y el volumen de roca asociado a la zona de propagación. Esta exigencia cobra mayor importancia al escalar el proceso, pues las reacciones de tipo Arrhenius son sensibles al tamaño de celda y los parámetros cinéticos calibrados en laboratorio pueden perder representatividad en modelos con

celdas de mayor tamaño (Le Thiez y Lemonnier, 1990; Nissen et al., 2015). Si C_f no se estima de forma consistente, la transferencia de la cinética del tubo hacia modelos de campo queda comprometida por los efectos de discretización espacial.

4.3.2 Variables candidatas del diseño de experimentos

La selección de las variables del DoE respondió a tres criterios: la sensibilidad documentada de C_f en la literatura (Belgrave et al., 1993; Sarathi, 1999), su relevancia para el escalamiento a condiciones de yacimiento y su factibilidad operativa dentro del rango de validez del modelo cinético calibrado. A partir de estos criterios, se definieron nueve variables candidatas: una operacional y ocho asociadas a propiedades del yacimiento.

Las variables candidatas fueron seleccionadas porque pueden afectar, directa o indirectamente, la disponibilidad de oxígeno, la cantidad de aceite disponible para formar combustible, el transporte de fluidos y el balance térmico del frente de combustión. Las nueve variables candidatas se resumen en la Tabla 12.

Tabla 12

Variables candidatas evaluadas en el diseño de experimentos

<i>Variable</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Papel físico dentro del proceso</i>
Flux volumétrico de aire	u_{aire}	Variable operativa transferible entre escalas.
Permeabilidad absoluta	k	Afecta el transporte de gas y el contacto aire-aceite.
Porosidad	φ	Controla el volumen poroso y la masa inicial de aceite.
Saturación inicial de aceite	S_{oi}	Representa la disponibilidad inicial de aceite.
Saturación inicial de agua	S_{wi}	Afecta la distribución de fluidos y el balance térmico.
Saturación inicial de gas	S_{gi}	Afecta el volumen disponible y la movilidad inicial.
Temperatura inicial	T_i	Define la condición térmica de arranque del sistema.
Capacidad calorífica de roca	$C_{p,r}$	Controla el almacenamiento térmico del medio.
Conductividad térmica	k_t	Controla la transferencia de calor dentro del tubo.

Nota. Las variables listadas corresponden a factores candidatos. La selección final de predictores se presenta en el capítulo de resultados, no en esta fase metodológica.

La permeabilidad requirió un tratamiento especial debido a que su rango de variación abarca varios órdenes de magnitud. En estos casos su tratamiento en escala aritmética concentraría el peso del análisis en los valores más altos. Por ello, para el análisis estadístico posterior se adoptó una transformación logarítmica, que distribuye la variable de manera más uniforme a lo largo de su rango y resulta apropiada para magnitudes que cambian exponencialmente. Esta transformación no modifica los valores físicos ingresados al simulador, sino la forma en que la variable se analiza estadísticamente. la transformación logarítmica se empleó posteriormente para mejorar la estabilidad de los modelos de regresión y representar de forma más adecuada el efecto de una variable que cambia por órdenes de magnitud comparando los valores de la parte experimental a los del yacimiento.

La permeabilidad se conservó como variable candidata del DoE, aunque no se asumió como un mecanismo químico primario de formación de combustible. En modelos de tubo de combustión con tasa de aire impuesta, su efecto cinético directo puede ser limitado, ya que el simulador puede sostener el flujo requerido mediante aumentos en la presión de inyección. Sin embargo, estudios previos reportan que su variación sí afecta la presión de inyectividad y, en menor medida, el coque depositado y la velocidad del frente (Navarro, 2017). Por ello, en esta investigación k se evaluó como una variable de transporte y contacto, con posible efecto indirecto sobre C_f , más que como un factor dominante de la química de deposición.

Se excluyen del DoE las propiedades cinéticas (factor pre-exponencial, energía de activación y entalpía de reacción) porque corresponden a parámetros calibrados contra el experimento de referencia y su variación implicaría redefinir el sistema químico. Las curvas de permeabilidad relativa se conservan fijas en la configuración 1D por la misma razón, dado que constituyen mediciones experimentales del sistema arena-fluido y no son parámetros calibrables.

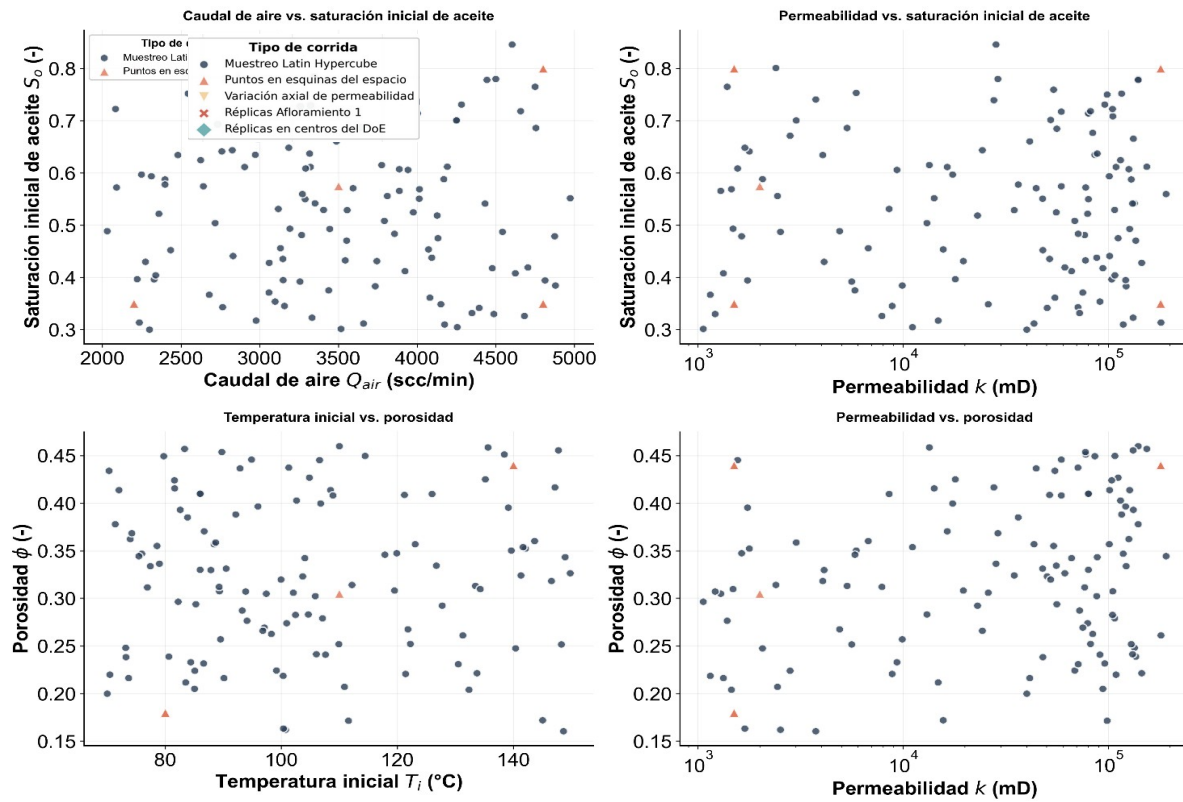
4.3.3 Dominio experimental y rangos evaluados

La regla de Harrell (2015) en regresión multivariable establece un mínimo de 10 observaciones por predictor para selección de variables robusta. Con 9 factores candidatos del DoE, el tamaño mínimo recomendado es $n = 90$. Por encima de $n = 100$ las estimaciones de coeficientes se consideran estables (Eriksson et al., 2013) y los intervalos de validación cruzada presentan baja varianza entre repeticiones.

Los rangos de variación de las variables candidatas se establecen alrededor del caso base experimental ampliados para cubrir el espacio paramétrico esperado en el yacimiento. La Figura 15 permite observar los rangos usados.

Figura 15

Cobertura del espacio experimental del DoE ($n = 146$ simulaciones)



4.3.4 Uso del flux de aire como variable

El caudal absoluto depende del área transversal del sistema; por tanto, un mismo caudal puede representar condiciones muy diferentes si el área del frente cambia. Por esta razón, el caudal se expresó como flux volumétrico de aire:

$$u_{\text{aire}} = Q_{\text{aire}} / A_t \quad (3)$$

donde u_{aire} es el flux volumétrico de aire, Q_{aire} es el caudal de aire inyectado y A_t es el área transversal del tubo. En el tubo 1D, A_t permanece constante, por lo que u_{aire} es proporcional a Q_{aire} . Sin embargo, expresar la correlación en términos de u_{aire} facilita su posterior interpretación en modelos multidimensionales, donde el área efectiva de flujo puede cambiar con la geometría, el tamaño de celda y la forma del frente. Esta decisión permite que la variable operativa usada en la correlación tenga mayor sentido físico para el proceso de escalamiento.

El flux de aire tiene además un significado físico directo sobre la estabilidad del frente, ya que la propagación autosostenida exige mantenerlo por encima de un valor crítico, por debajo del cual las pérdidas de calor hacia las formaciones adyacentes superan la generación interna de energía y el proceso pierde su carácter autosostenido (Akkutlu y Yortsos, 2003).

4.3.5 Definición de la zona estable del frente

La estimación del combustible no se realizó sobre toda la historia del ensayo de forma indiscriminada. En una prueba de tubo de combustión existen etapas con comportamiento diferente: ignición, transición inicial, propagación estable y efectos de borde hacia el final del tubo. Para construir una correlación transferible, el interés principal se centró en el régimen estable del frente, entendido como la etapa en que la combustión se propaga de forma autosostenida, una vez que el calor liberado por la oxidación de alta temperatura (HTO) supera las pérdidas térmicas hacia las formaciones circundantes (Akkutlu y Yortsos, 2003). Esta condición de autopropagación depende de que el flux de aire se mantenga por encima de un valor crítico y de que el combustible disponible sea suficiente para sostener el balance energético del frente (Navarro García, 2017).

Por esta razón, se definió una ventana temporal representativa de la zona estable del frente. En dicha ventana se calculó el combustible generado o consumido por diferencia entre dos tiempos acumulados:

$$Coque_{\text{zona estable}} = Coque(t_2) - Coque(t_1) \quad (4)$$

Para el caso base de análisis, los límites de la ventana se definieron como:

$$t_1 = 421 \text{ min}, \quad t_2 = 1276 \text{ min} \quad (5)$$

Por tanto:

$$Coque_{\text{zona estable}} = Coque(1276) - Coque(421) \quad (6)$$

Esta definición permite excluir el efecto dominante de la ignición inicial y reducir la influencia de los efectos de borde del ensayo. La variable $Coque_{zona\ estable}$ representa la masa de coque asociada al periodo de propagación estable del frente y constituye la base para calcular las variables normalizadas empleadas en la correlación.

4.3.6 Cálculo de la masa inicial de aceite y variables respuesta

Para comparar simulaciones con diferente porosidad y saturación inicial de aceite, no basta con analizar la masa absoluta de combustible. Una misma cantidad de coque puede representar fracciones muy diferentes dependiendo de la cantidad de aceite inicialmente disponible en el sistema. Por esta razón, para cada simulación se calculó la masa inicial de aceite asociada al volumen evaluado:

$$m_{aceite,inicial} = V_{roca} \cdot \varphi \cdot S_o \cdot \rho_o \quad (7)$$

donde $m_{aceite,inicial}$ es la masa inicial de aceite, V_{roca} es el volumen de roca considerado, φ es la porosidad, S_o es la saturación inicial de aceite y ρ_o es la densidad del aceite.

Esta normalización es necesaria porque el DoE modifica φ y S_o . Si todos los casos se dividieran por una masa de aceite fija, se introduciría un sesgo en la interpretación de la fracción de combustible. Por tanto, cada experimento requiere su propia masa inicial de aceite.

4.3.7 Estructura del DoE

La estructura del DoE adopta una matriz de 146 escenarios, distribuidos mediante una combinación de muestreo por Hipercubo Latino (Latin Hypercube Sampling), para cubrir de manera uniforme el espacio multidimensional de variables, con un diseño compuesto central (Central Composite Design) orientado a estimar curvatura y efectos cuadráticos. Esta combinación buscó equilibrar la cobertura amplia del dominio con la posibilidad de detectar relaciones no lineales entre las variables. La estructura resultante se resume en la Tabla 13.

Tabla 13

Estructura general del diseño experimental

<i>Bloque</i>	<i>Propósito metodológico</i>
Latin Hypercube Sampling	Cubrir de forma amplia el espacio multidimensional.
Puntos de esquina	Evaluar respuestas en condiciones extremas.
Puntos centrales	Verificar comportamiento cerca del centro del dominio.
Réplicas verdaderas	Estimar variabilidad numérica y repetibilidad.
Barrido axial de permeabilidad	Evaluar curvatura y efecto no lineal de k.

Esta combinación permitió obtener una base de datos con cobertura amplia, sin depender únicamente de un diseño univariado. El objetivo fue generar información suficiente para evaluar tendencias globales, sensibilidad de variables y formas funcionales candidatas para la correlación.

4.3.8 Criterio de validez de las simulaciones

No todas las simulaciones con terminación numérica normal representan necesariamente un frente de combustión físicamente válido. Algunas combinaciones de propiedades y operación pueden terminar sin desarrollar un régimen HTO sostenido, o con temperaturas insuficientes para representar un frente de combustión estable.

Por esta razón, las simulaciones se filtraron con base en un criterio térmico mínimo asociado a la formación del frente. El inicio del régimen de oxidación de alta temperatura (HTO) depende del tipo de crudo y de las condiciones de operación, pero la literatura lo sitúa de forma consistente entre 340 y 400 °C para crudos pesados (Padilla Reyes, 2016; Pinzón Díaz, 2018), en concordancia con los valores reportados en estudios internacionales de oxidación de crudos (Glatz, 2012). Sobre esta base se adoptó como umbral operativo para identificar casos compatibles con el desarrollo de un frente en régimen HTO:

$$T_{m\acute{a}x} > 400\text{ }^{\circ}\text{C} \quad (8)$$

Las simulaciones que no cumplieron este criterio se interpretaron como casos fuera del dominio operacional de combustión estable. Este filtrado no se consideró una eliminación arbitraria de datos, sino una delimitación física del dominio donde la correlación tiene sentido. La correlación propuesta debe aplicarse únicamente en condiciones donde el frente sea capaz de propagarse bajo régimen HTO.

4.3.9 Procesamiento de salidas de simulación

Para cada simulación se monitorearon variables térmicas, composicionales y reactivas. Estas salidas permitieron conectar las variables observables del tubo con las variables internas necesarias para calcular $Coque_{estable}$, X_f y C_f . En particular, los balances acumulados en el tiempo se utilizaron para separar la etapa estable de la historia total del ensayo. Las principales salidas monitoreadas se resumen en la Tabla 14.

Tabla 14

Salidas principales monitoreadas para el procesamiento de las simulaciones del diseño de experimentos

Tipo de salida	Uso dentro de la metodología
Temperaturas axiales	Seguimiento del frente térmico y verificación del régimen estable.
Posición o avance del frente	Identificación de la propagación de la zona de alta temperatura.
Fracciones molares de O_2 , CO_2 , CO y N_2	Verificación del consumo de oxígeno y productos de combustión.
Balances de reacción	Cálculo de combustible generado o consumido.
Consumo de oxígeno	Evaluación de utilización del oxidante.
Generación de agua	Control de coherencia de las reacciones de oxidación.
Concentración de especies sólidas	Seguimiento de combustible sólido disponible y consumido.

La temperatura máxima se utilizó como señal de control, pero no como único criterio de aceptación. Para considerar representativo un caso, fue necesario verificar que el comportamiento térmico estuviera acompañado por señales reactivas coherentes, especialmente consumo de oxígeno, generación de gases de combustión, balance de combustible y avance progresivo del frente.

4.3.10 Enfoque estadístico posterior

Una vez construida la base de datos, el análisis estadístico se desarrolló en una fase posterior. En esta etapa metodológica solo se define la forma en que se generaron y procesaron los escenarios; la selección final de variables y la correlación resultante se presentan en el capítulo de resultados.

El análisis posterior consideró modelos lineales y modelos tipo ley de potencias. La forma general de una correlación potencial puede expresarse como:

$$X_f = a \cdot u_{\text{aire}}^b \cdot k^c \cdot \varphi^d \cdot S_o^e \quad (9)$$

donde a es el coeficiente de escala, mientras que b , c , d y e representan exponentes de sensibilidad. Esta forma es conveniente porque los exponentes tienen interpretación física como elasticidades. Por ejemplo, un exponente positivo de u_{aire} indicaría que la fracción de combustible aumenta con el flux de aire, mientras que un exponente negativo de S_o indicaría que la fracción disminuye al aumentar la masa inicial de aceite disponible. La forma logarítmica equivalente es:

$$\ln(X_f) = \ln(a) + b \ln(u_{\text{aire}}) + c \ln(k) + d \ln(\varphi) + e \ln(S_o) \quad (10)$$

Esta transformación permite ajustar la ley de potencias mediante regresión lineal en escala logarítmica. No obstante, la selección final de la forma funcional, los predictores retenidos, las métricas de error y la validación estadística se presentan en el capítulo de resultados, con el fin de mantener separadas la metodología de generación de escenarios y la interpretación de los resultados obtenidos.

Para el procesamiento estadístico, la comparación de modelos y la generación de las gráficas de diagnóstico se emplearon scripts propios desarrollados en Python. Estos scripts permitieron integrar las salidas de simulación, calcular las variables respuesta, ajustar modelos de

regresión, comparar formas funcionales, estimar métricas de desempeño y generar las visualizaciones empleadas para interpretar la correlación seleccionada. La selección del modelo final no se basó en un único criterio, sino en la consistencia conjunta entre ajuste estadístico, capacidad predictiva, estabilidad frente a validación y coherencia física de los coeficientes.

4.3.11 Alcance de la Fase B

La Fase B no tuvo como objetivo demostrar todavía la validez final de la correlación ni su desempeño en modelos multidimensionales. Su función fue generar una base numérica controlada, físicamente filtrada y estadísticamente útil para construir la correlación de combustible en una fase posterior.

En consecuencia, esta fase debe entenderse como el puente entre el modelo 1D calibrado y la formulación empírico-numérica de F_c y su conversión a C_f , según la definición operacional adoptada. La validez de la correlación, su comparación con modelos alternativos, la interpretación de sus exponentes y su incorporación como inicialización del coque se desarrollan en las fases y capítulos siguientes.

4.4 Fase C: implementación de la inicialización del coque en modelos de dimensiones de celda a escala de campo

El propósito de esta fase fue trasladar la correlación de combustible depositado, obtenida en la Fase B, hacia modelos de simulación de mayor escala que el tubo de combustión, con el fin de evaluar si la inicialización del coque permite reproducir el frente de combustión y conservar su comportamiento al aumentar el tamaño de celda. A diferencia de la simulación convencional, en la que el combustible sólido se forma dinámicamente mediante el esquema cinético completo, en esta fase el combustible se incorporó como una condición inicial estimada a partir de la correlación y se consumió mediante una reacción de oxidación de alta temperatura. De este modo, la disponibilidad inicial de combustible dejó de depender exclusivamente de la formación dinámica calculada en cada celda, la cual puede verse afectada por la discretización espacial.

La implementación se desarrolló de forma progresiva en dos niveles de evaluación. En el primer nivel, la inicialización del coque se verificó como prueba de concepto en el modelo de tubo de combustión. Esta etapa permitió comprobar que una reacción equivalente, alimentada por el combustible inicializado, podía reproducir la propagación del frente, la respuesta térmica principal y la coherencia composicional del proceso en la escala con referencia experimental directa.

En el segundo nivel, la estrategia se trasladó a un modelo con dimensiones de celdas a escala de campo, con el fin de evaluar la propagación del frente bajo una geometría de flujo más representativa que la del tubo de combustión. En este modelo se analizó la capacidad de la inicialización del coque para sostener el frente, conservar su forma y reducir la sensibilidad asociada al tamaño de celda frente al esquema cinético convencional. Esta evaluación no buscó reproducir la totalidad de la heterogeneidad de un yacimiento real, sino analizar el efecto de la

estrategia propuesta sobre la representación numérica del frente en condiciones de campo controladas.

En cada nivel, los modelos con inicialización del coque se compararon con modelos de simulación convencional para diferentes tamaños de celda, con el fin de analizar la sensibilidad de cada enfoque frente a la discretización espacial. La evaluación se apoyó en métricas físicas del frente, como la temperatura máxima, la velocidad de propagación, la distribución espacial de oxígeno y la generación de gases efluentes. De manera complementaria, se analizaron parámetros de desempeño del proceso, especialmente el requerimiento de aire, el requerimiento de combustible, la relación aire-combustible, el aceite producido y el factor de recobro.

Finalmente, para el modelo de campo, los parámetros de desempeño obtenidos se compararon con los estimados mediante el método analítico de Nelson y McNeil. Esta comparación se planteó como una verificación de consistencia integral del proceso y no como una validación completamente independiente. Lo anterior se debe a que algunos indicadores comparten información de partida con la caracterización experimental, mientras que otros, como el aceite producido y el factor de recobro, aportan una evaluación comparativa de mayor independencia al provenir de vías de cálculo distintas.

5. Calibración y evaluación del modelo numérico de tubo de combustión

En este capítulo se presentan los resultados asociados a la construcción, diagnóstico y calibración del modelo numérico de tubo de combustión utilizado como base para el diseño de experimentos posterior. El análisis se concentra en verificar que el modelo reproduzca de manera coherente la respuesta térmica, composicional, energética y reactiva de una prueba experimental reportada para un sistema roca-fluido colombiano de crudo pesado.

El capítulo se organiza en tres partes. En primer lugar, se analiza el modelo inicial, construido con el esquema cinético base, con el propósito de identificar sus capacidades y limitaciones frente a la información experimental disponible. En segundo lugar, se describen los ajustes introducidos para mejorar la representación del balance energético y de la oxidación a baja temperatura temprana. Finalmente, se evalúa el modelo calibrado mediante la comparación de perfiles térmicos, gases efluentes, balance energético y parámetros de desempeño calculados en la zona estable del frente.

Estos resultados permiten establecer si el modelo de tubo de combustión constituye una base numérica consistente para la construcción posterior de la correlación empírico-numérica del combustible depositado. Por tanto, el objetivo de este capítulo no es presentar todavía la correlación final ni su aplicación a escala de campo, sino demostrar que el modelo base reproduce de forma razonable los rasgos físicos y químicos necesarios para generar escenarios controlados.

5.1 Modelo inicial

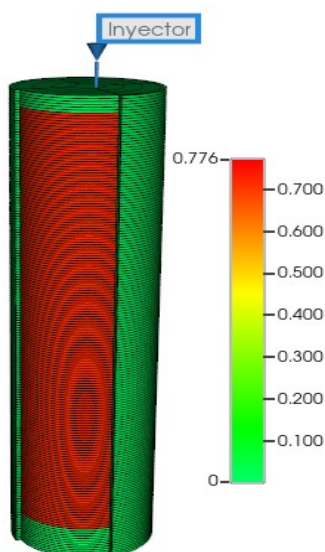
La verificación del modelo inicial tuvo como finalidad comprobar que la configuración numérica desarrollada en la metodología reproduce una respuesta térmica, composicional y

reactiva compatible con la prueba de tubo de combustión del afloramiento 1 reportada por Pinzón Díaz (2018), realizada a 1200 psig y con un flux de aire de $32 \text{ m}^3(\text{ST})/\text{m}^2\cdot\text{h}$. Dicha prueba constituye el referente experimental principal para el sistema roca–fluido colombiano analizado.

El modelo se discretizó en una malla radial de $5 \times 1 \times 178$ celdas, con una longitud axial efectiva del medio poroso de 197.3 cm. Las cuatro celdas radiales internas representan el sistema roca–fluido, mientras que la celda radial externa representa la camisa metálica del reactor (Figura 16). Las condiciones iniciales de presión, temperatura y saturaciones se ajustaron a las del ensayo experimental de referencia; la Tabla 7 resume los valores adoptados y la Figura 9(a) presenta la configuración geométrica del modelo numérico unidimensional.

Figura 16

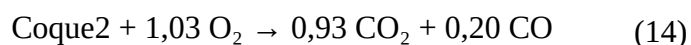
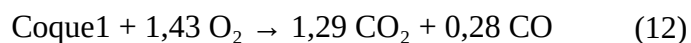
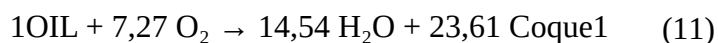
Modelo numérico inicial: saturación inicial de aceite y camisa metálica



Desde el punto de vista composicional, el modelo consideró los componentes necesarios para representar el agua, el aceite, los gases no condensables y las especies sólidas asociadas al

coque. Estos componentes se definieron en la Tabla 9 y constituyen la base para analizar el consumo de oxígeno, la generación de CO₂ y CO, la formación de agua y la evolución de las especies sólidas durante la simulación.

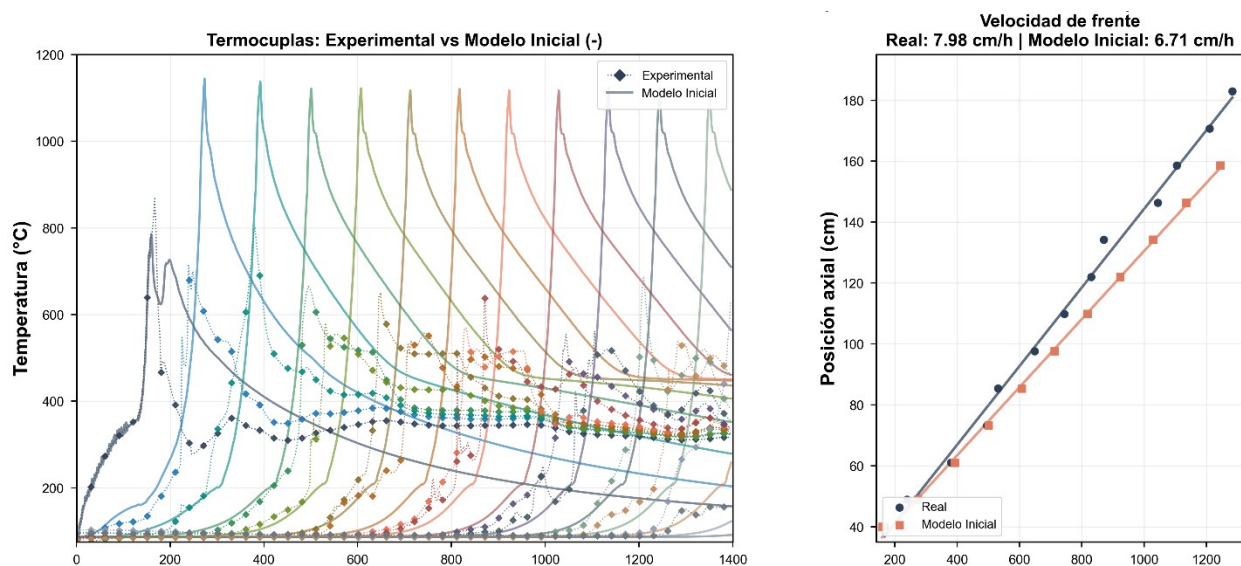
Para la simulación diagnóstica inicial se evaluó el modelo con el esquema cinético de cuatro reacciones, previo a la incorporación de la reacción de oxidación a baja temperatura temprana y a cualquier ajuste del balance de energía. El propósito de esta configuración fue establecer una línea de partida que permitiera identificar, a partir del comportamiento del propio modelo, las limitaciones que justifican las modificaciones introducidas posteriormente. De este modo, el diagnóstico presentado a continuación aporta la evidencia numérica que respalda, para el sistema analizado, la limitación conceptual del esquema de cuatro reacciones anticipada en la Sección 4.2.3. A continuación se presenta el esquema de reacciones empleado en el modelo inicial:



Como se describe en la sección 4.2.3, la verificación se realizó mediante la revisión conjunta de las respuestas térmicas, composicionales y reactivas del modelo. En particular, se evaluó si la temperatura máxima alcanzaba el régimen de oxidación de alta temperatura, si el frente térmico avanzaba de forma progresiva a lo largo del tubo, si el oxígeno era consumido durante la propagación, la producción de CO₂ y CO era coherente con la activación de las reacciones de combustión entre otros parámetros de desempeño descritos previamente en la Tabla 10.

Figura 17

Comparación de la velocidad del frente: modelo inicial y resultados experimentales



Los resultados del caso inicial mostraron que, al emplear el esquema cinético planteado por Padilla (2016), el modelo desarrolló una zona de alta temperatura compatible con la formación de un frente de combustión activo. La respuesta térmica no se restringió al calentamiento inicial asociado a la zona de ignición asistida, sino que evidenció el desplazamiento axial progresivo del frente a través del medio poroso. Este comportamiento permitió diferenciar la etapa influenciada por el calentamiento externo inicial de una etapa posterior de propagación autosostenida del frente. Esta distinción es fundamental, ya que la estimación del combustible depositado debe realizarse sobre la ventana de régimen estable posterior a la ignición, evitando incluir efectos transitorios iniciales o fenómenos asociados al borde final del tubo.

No obstante, la comparación con los registros experimentales evidenció una sobreestimación térmica sistemática. Los picos de temperatura simulados se mantuvieron

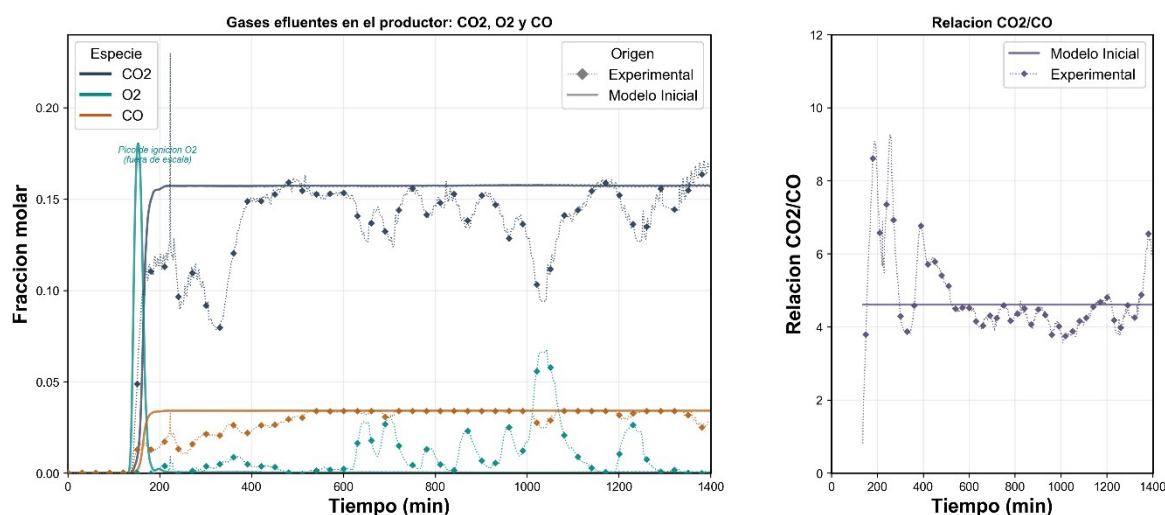
alrededor de 1.100 °C de forma casi uniforme a lo largo del tubo, mientras que los valores experimentales mostraron una disminución progresiva desde la zona de ignición, con temperaturas cercanas a 870 °C, hasta el extremo productor, donde se registraron valores aproximados de 540 °C. Esta diferencia, que en las zonas centrales superó los 400 °C, indica que el modelo inicial conservó una cantidad de energía superior a la observada en el reactor experimental. Aunque la velocidad de propagación del frente calculada numéricamente fue del mismo orden de magnitud que la observada experimentalmente, la discrepancia del modelo inicial no se atribuyó principalmente a una incapacidad para sostener un frente autopropagante.

En la comparación posición–tiempo de la Figura 17, la velocidad experimental fue de aproximadamente 7.98 cm/h, frente a 6.71 cm/h en el modelo inicial. Este resultado indica una propagación más lenta en la simulación, pero aún compatible con el régimen de avance observado experimentalmente. Esta interpretación se refuerza por el hecho de que los parámetros cinéticos empleados para el sistema roca–fluido de estudio fueron obtenidos por Padilla (2016) para los diferentes regímenes de reacción, a partir de la metodología isoconversional propuesta por Cinar (2011) y con la estimación del factor pre-exponencial mediante el enfoque planteado por Chen (2012).

En consecuencia, la discrepancia térmica se asoció principalmente con una representación incompleta del balance energético del sistema. En particular, la configuración inicial no incorporaba de manera suficiente los mecanismos de disipación radial de calor hacia la camisa metálica, el aislamiento y el entorno del reactor. Por ello, el modelo se comportó como un sistema cuasiadiabático no corregido; es decir, logró sostener la combustión y reproducir la propagación del frente, pero conservó más energía que el reactor experimental, lo que condujo a temperaturas máximas superiores a las físicamente observadas.

Figura 18

Gases efluentes: comparación experimental y del modelo inicial



Desde el punto de vista composicional, el modelo reprodujo el consumo de oxígeno y la generación de gases de combustión (Figura 18), lo que confirma que la respuesta térmica estuvo asociada a la activación del esquema reactivo y no únicamente al calentamiento externo inicial. Las fracciones molares de CO₂ y CO durante el régimen estable, así como la relación CO₂/CO, presentaron un acuerdo razonable con los datos experimentales. Este comportamiento sugiere que la estequiometría global de oxidación del esquema base es adecuada para representar la combustión principal del coque depositado. En la Tabla 15 se detallan los principales parámetros de desempeño que se obtuvieron con el modelo inicial en comparación con los datos experimentales obtenidos en ambos casos para la zona estable de la prueba que se evidenció entre la Zona 4 y 12.

Tabla 15

Parámetros de desempeño del modelo inicial del tubo de combustión

<i>Parámetro</i>	<i>Unidad</i>	<i>Experimental Afloramiento 1</i>	<i>Numérico</i>	<i>Error relativo (%)</i>
Velocidad del frente de combustión	cm/h	7.98	6.71	-15.91
Requerimiento de aire	m ³ (S)/m ³	405.07	373.76	-7.73
Carbono consumido	kg	0.29	0.353	+21.65
Oxígeno consumido	%	93.46	94.67	+1.29
Hidrógeno consumido	kg	0.02	0.027	+35.00
Agua formada	kg	0.16	0.240	+50.07
Combustible consumido	kg	0.30	0.379	+26.49
Fracción de crudo inicial depositada como coque	fracción	0.08	0.101	+26.49
Relación aire/combustible	m ³ (S)/kg	10.99	10.51	-4.36
Requerimiento de combustible	kg/m ³	36.86	35.56	-3.53
Relación H/C	fracción	0.75	0.91	+21.00

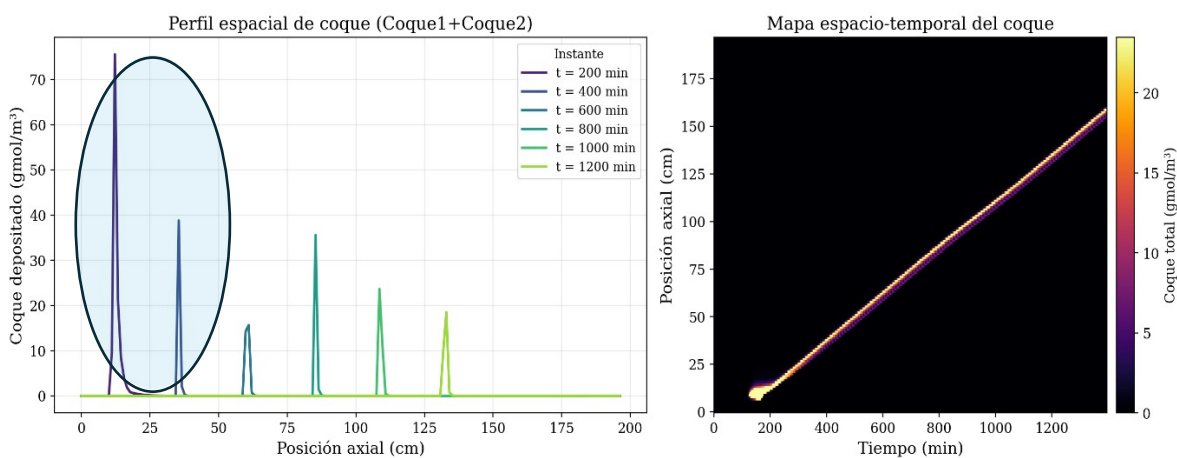
Nota. H/C = relación atómica hidrógeno/carbono; m³(S) = metros cúbicos en condiciones estándar.

Con base en los datos presentados en la Tabla 15 se evidencia que, aunque el modelo inicial reprodujo adecuadamente los parámetros globales del frente estable, el ajuste composicional no fue igualmente satisfactorio en la etapa inicial del proceso. En el intervalo estable los errores en velocidad del frente, requerimiento de aire, consumo de oxígeno, relación aire/combustible y requerimiento de combustible fueron inferiores al 10 %, salvo el oxígeno, cuyo ajuste fue prácticamente directo. Estos resultados indican que la propagación global del frente fue representada de forma razonable. No obstante, el carbono consumido, el hidrógeno consumido, el agua formada, el combustible consumido y la relación H/C fueron sobreestimados entre 21 % y 36

%. Esta diferencia entre el buen ajuste dinámico del frente y la mayor desviación composicional sugiere que la discrepancia no se origina principalmente en la capacidad del modelo para sostener la combustión, sino en la representación de las rutas reactivas tempranas. Por ello, la incorporación de una reacción adicional de LTO temprana resulta necesaria para desacoplar la activación inicial del crudo de la depositación principal de combustible, permitiendo representar con mayor fidelidad la firma composicional observada experimentalmente.

Figura 19

Distribución espacial y temporal del combustible sólido



La Figura 19 permite identificar una característica estructural del modelo y es que el coque no se encuentra disponible desde el inicio de la simulación, sino que aparece de forma localizada y progresiva a medida que avanza el frente térmico siguiendo las rutas establecidas en el esquema de reacciones. En el perfil espacial, el coque total, calculado como la suma de Coque1 y Coque2, se concentra en una banda estrecha que se desplaza axialmente con el tiempo. De manera complementaria, el mapa espacio-temporal muestra una trayectoria continua de depositación y consumo, asociada al avance del frente de combustión.

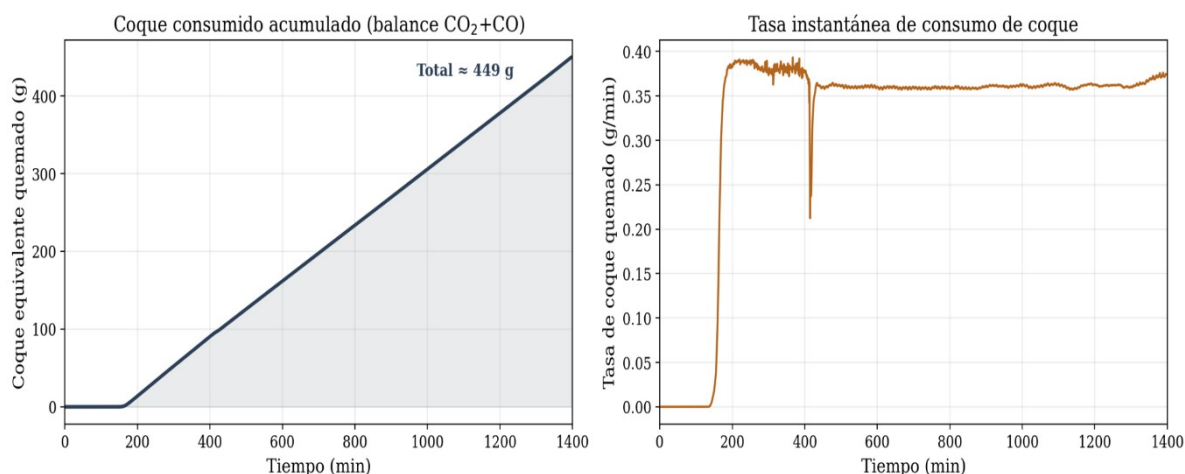
Existe una etapa inicial de acondicionamiento térmico-reactivo en la que el sistema debe generar localmente el combustible antes de sostener la propagación del frente. Por ello, la Figura 19 sirve como antecedente para discutir el desfase temporal entre modelos del tubo de combustión con cinética Arrhenius y no Arrhenius

Al evaluar un modelo con coque inicializado previamente, cambia la condición reactiva inicial. Así, el frente no necesita el mismo tiempo para formar combustible, pues parte de este ya está disponible desde el inicio. Esto puede adelantar de forma aparente su llegada a las termocuplas, sin implicar una mayor velocidad física de propagación, sino una reducción del tiempo de formación inicial del combustible.

Por ello, la comparación entre modelos no debe basarse solo en el tiempo absoluto de llegada del frente a cada termocupla, sino en los indicadores de la zona estable de propagación. Este enfoque permite evaluar su desempeño una vez superado el periodo transitorio inicial asociado a la formación o disponibilidad del combustible.

Figura 20

Coque consumido acumulado y tasa de consumo



La Figura 20 muestra el coque consumido acumulado, estimado a partir del balance de carbono en los gases de combustión ($\text{CO}_2 + \text{CO}$), y la tasa instantánea de consumo de coque durante la simulación. En la etapa inicial no se observa un consumo apreciable de coque como consecuencia de la secuencia operativa de la prueba experimental. Inicialmente se inyecta nitrógeno para la prueba de conectividad, la presurización y el calentamiento del sistema, y posteriormente se cambia a aire para iniciar las reacciones de oxidación. Esta secuencia coincide con el procedimiento experimental reportado para el tubo de combustión del caso de estudio.

Una vez iniciado el suministro de aire, el consumo de coque aumenta rápidamente y alcanza un régimen aproximadamente estable, con tasas cercanas a 0.35–0.37 g/min. Este comportamiento indica que, luego del cambio de gas inyectado y de la activación del frente, el coque se consume de manera sostenida durante la propagación. La curva acumulada muestra un crecimiento casi lineal después del arranque de la combustión, alcanzando un consumo total

aproximado de 449 g al final de la simulación. La Figura 20 permite diferenciar dos aspectos importantes del proceso. Por un lado, el acumulado final representa el combustible total consumido durante toda la simulación. Por otro lado, la tasa instantánea permite identificar el intervalo donde el frente opera en régimen más estable

El caso inicial demostró capacidad para sostener un frente de combustión propagante y químicamente activo. Sin embargo, también reveló dos limitaciones principales: una sobreestimación térmica, asociada a una representación incompleta de las pérdidas de calor del sistema, y una representación parcial del régimen de oxidación a baja temperatura (LTO), evidenciada en las desviaciones composicionales observadas durante las etapas iniciales del proceso.

5.2 Calibración del modelo numérico del tubo de combustión

Como se mencionó anteriormente, de los resultados del modelo inicial se identificaron dos limitaciones o criterios de calibración al modelo numérico del tubo de combustión. La primera limitación se relaciona con el hecho de que el modelo inicial no representaba suficientemente la transferencia radial de calor desde el medio poroso hacia la camisa metálica, el aislamiento y el entorno del tubo de combustión. En consecuencia, el sistema tendía a comportarse como un modelo cuasi adiabático, capaz de sostener la combustión, pero con temperaturas máximas superiores a las observadas experimentalmente. Para corregir este comportamiento, se incorporó en CMG STARS un mecanismo efectivo de disipación térmica, equivalente a las pérdidas de calor radiales del montaje experimental.

La segunda limitación se abordó mediante la incorporación de una reacción adicional de oxidación temprana a baja temperatura, orientada a mejorar la representación de la activación inicial del crudo pesado y de la formación temprana de precursores de combustible. De esta manera, los ajustes posteriores buscaron mejorar simultáneamente la respuesta térmica del tubo y la firma composicional asociada al establecimiento del frente de combustión.

Los datos experimentales se organizaron en tres grupos: variables térmicas, variables reactivas y variables de desempeño global. Esta clasificación permite evitar un ajuste visual de temperatura que reproduzca las curvas, pero falle en gases, consumo de oxígeno, agua formada o energía de reacción como se muestra en la Tabla 16.

Tabla 16

Variables experimentales empleadas como objetivos de calibración

<i>Grupo</i>	<i>Variable experimental</i>	<i>Uso en la calibración</i>	<i>Nivel de confianza</i>
Térmico	Históricos de temperatura core T1–T15	Ajuste de forma de curva, tiempo de llegada y temperatura máxima	Alto
Térmico	Temperaturas de pared TW1–TW15, cuando estén disponibles	Validación del control centro-pared y de la condición de borde	Alto/medio
Reactivo	CO ₂ , CO y O ₂ efluentes	Selectividad de combustión, consumo de oxígeno y avance reactivo	Alto
Reactivo	Agua formada y relación H/C	Control de rutas LTO/HTO y calidad del combustible	Medio/alto
Energético	Calor reactivo experimental	Restricción sobre Q_{rxn} del modelo	Alto
Global	Velocidad del frente	Validación de propagación axial	Alto

Nota. La calibración se formuló como ajuste multiobjetivo, no como ajuste exclusivo de temperatura.

5.2.1 Balance energético

La prueba de combustión no se trató como un tubo aislado ideal. El reactor experimental operó bajo un esquema de control de temperatura cercanamente adiabático, con 15 zonas de calentamiento independientes, camisa metálica, aislamiento microporoso y control del gradiente centro-pared. En consecuencia, los perfiles térmicos medidos por las termocuplas no corresponden únicamente a la respuesta cinética del crudo, sino al resultado de un sistema acoplado entre calor de reacción, transferencia de calor, almacenamiento sensible y regulación externa del montaje experimental.

A partir de los registros del sistema de adquisición de datos del reactor, se estimó que los calentadores externos aportaron aproximadamente 91,6 MJ durante la simulación, con base en la potencia nominal de 750 W por zona y el porcentaje de aporte que se registró en cada una de ellas. Esta magnitud confirma que el tubo de combustión no operó como un sistema térmicamente aislado, sino como un montaje con regulación externa activa, en el cual los calentadores compensan pérdidas, controlan el gradiente centro-pared y contribuyen a mantener una condición cercanamente adiabática. Sin embargo, este aporte no se interpretó como una pérdida directa que deba ser reproducida íntegramente por el modelo numérico. Dado que el modelo en CMG STARS no representa de manera explícita cada zona de calentamiento ni el control térmico externo del reactor, la disipación se incorporó mediante una extracción térmica efectiva, acotada por una ventana de consistencia energética.

En el modelo numérico, la disipación térmica se representó mediante un mecanismo efectivo de extracción de calor en CMG STARS. Este mecanismo no se interpretó como una pérdida de calor medida directamente, sino como una aproximación del amortiguamiento térmico impuesto por la camisa metálica, el aislamiento y el sistema de control del reactor. Esta

representación permitió evitar que el modelo se comportara como un sistema adiabático ideal, condición que en las simulaciones iniciales generaba picos de temperatura superiores a los observados experimentalmente.

El balance energético del volumen de control, conformado por el medio poroso, los fluidos internos y la camisa metálica representada en el modelo, se expresó como:

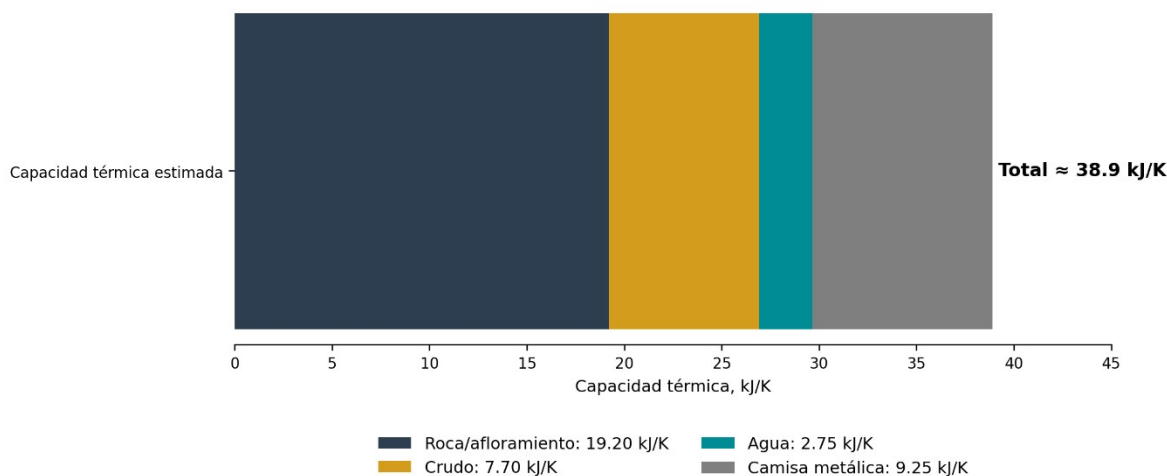
$$\Delta U_{CV} = Q_{rxn} + Q_{heaters} + H_{in} - H_{out} - Q_{loss} - Q_{cooler} \quad (15)$$

Donde ΔU_{CV} es el cambio de energía interna del volumen de control, Q_{rxn} es el calor liberado por las reacciones, $Q_{heaters}$ es el aporte de los calentadores, H_{in} y H_{out} corresponden a la entalpía de entrada y salida de fluidos, Q_{loss} representa las pérdidas térmicas explícitas y Q_{cooler} corresponde a la extracción térmica efectiva aplicada en el modelo

Para estimar la contribución del almacenamiento sensible dentro del volumen de control, se consideró la capacidad térmica equivalente del sistema. La Figura 21 muestra que la capacidad térmica total estimada fue de aproximadamente 38,9 kJ/K, distribuida principalmente entre la roca/afloramiento y la camisa metálica. Este resultado evidencia que una fracción del calor liberado por las reacciones no se manifiesta inmediatamente como aumento de temperatura del frente, sino que se almacena como energía sensible en los elementos del sistema.

Figura 21

Capacidad térmica estimada del sistema experimental



Nota. La capacidad térmica estimada del medio y la camisa justifica que una fracción del calor de reacción se almacene como energía sensible y no aparezca únicamente como pico térmico.

En consecuencia, el balance energético del modelo no puede evaluarse únicamente a partir del calor de reacción. La energía liberada por las reacciones debe distribuirse entre el incremento de energía sensible del sistema, la entalpía transportada por los fluidos producidos, las pérdidas térmicas explícitas y la extracción térmica efectiva. Esta consideración sustenta la necesidad de acotar el mecanismo de enfriamiento dentro de una ventana energética físicamente razonable como se muestra en la Tabla 17.

Tabla 17

Componentes energéticos usados para acotar la extracción térmica efectiva del modelo

<i>Término</i>	<i>Rango estimado</i>	<i>Mecanismo</i>	<i>Uso metodológico</i>
Qrxn,exp	15.6–16.4 MJ	Productos de combustión y reconstrucción estequiométrica	Referencia de calor químico experimental
ΔU Roca + Fluidos	6–9 MJ	Masa de roca, crudo, agua y respuesta térmica	Almacenamiento sensible mínimo
ΔU Roca + Fluidos + Camisa Metálica	8–12 MJ	Roca y fluidos + camisa metálica	Base para amortiguamiento térmico
Hout,gas	1–2.5 MJ	Gas total producido y composición global	Corrección por entalpía de gases
Hout,liq	1–3 MJ	Líquidos recuperados	Corrección por entalpía de líquidos
Qextracción	7–12 MJ	Síntesis de balance y simulaciones	Calibración Modelo Numérico 1D Tubo CIS

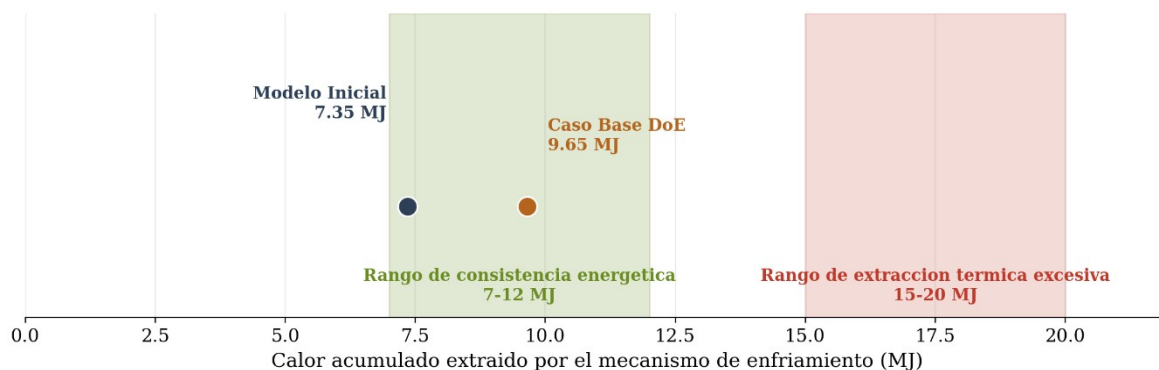
Nota. Los valores son rangos de consistencia energética. No se presentan como mediciones directas de pérdidas experimentales.

Con base en los términos del balance energético, la extracción térmica efectiva del modelo se acotó a una ventana de 7–12 MJ. Este rango no representa una pérdida de calor medida directamente en el experimento, sino una ventana de consistencia energética compatible con el calor químico liberado, la energía sensible almacenada en el medio y la camisa metálica, y la energía transportada por los fluidos producidos. Para el modelo calibrado utilizado posteriormente en el diseño de experimentos, el balance de la simulación numérica reportó una extracción térmica acumulada de aproximadamente 9.65 MJ, valor ubicado dentro de la ventana adoptada. Este resultado se obtuvo con la configuración calibrada del mecanismo de enfriamiento en CMG STARS, en la cual el parámetro HEATR se estableció en -1000 J/min, frente al valor de -200 J/min evaluado en una simulación comparativa previa.

La ubicación del modelo calibrado dentro de la ventana de 7–12 MJ permite descartar que la reducción de los picos térmicos se haya logrado mediante una extracción de calor excesiva. En consecuencia, el mecanismo de enfriamiento se interpreta como una representación efectiva del amortiguamiento térmico impuesto por la camisa metálica, el aislamiento y el sistema de control del reactor, y no como un parámetro libre de ajuste. Una vez restringida esta extracción, las desviaciones remanentes en temperatura máxima, gases, agua formada o relación H/C deben corregirse principalmente mediante ajustes cinéticos y no mediante un aumento indefinido del enfriamiento.

Figura 22

Ventana energética de extracción térmica efectiva



Nota. Datos obtenidos de las salidas .out de CMG STARS y del balance energético experimental. La ventana de 7–12 MJ se usó como restricción de consistencia.

5.2.2 Ajuste del modelo cinético

Una vez acotada la representación efectiva de pérdidas térmicas dentro de una ventana energéticamente consistente en el modelo numérico del tubo de combustión, el ajuste de los picos de temperatura no debía lograrse incrementando indefinidamente el enfriamiento numérico. En esta etapa, el mecanismo implementado en CMG STARS ya cumplía su función de representar el efecto térmico equivalente de la camisa metálica, el aislamiento y el sistema de regulación del reactor. Por tanto, las discrepancias remanentes debían analizarse desde la respuesta cinética y composicional del modelo, especialmente en la transición entre la activación inicial del crudo, la formación de combustible y la combustión HTO del coque. Esta decisión evita que el control

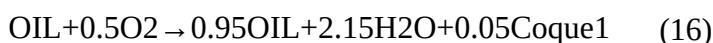
térmico numérico sustituya artificialmente la física de combustión y permite separar el problema energético del problema reactivo.

En los registros experimentales, cada termocupla inicia una elevación progresiva de temperatura a partir de aproximadamente 160–180 °C, con pendientes del orden de 1.0–1.3 °C/min, mucho antes de que el frente de alta temperatura alcance esa posición. En el modelo de cuatro reacciones, en cambio, la misma elevación no se activa hasta los 210–220 °C, y con pendientes notablemente menores (0.4–0.5 °C/min en las zonas alejadas del inyector). Esta diferencia de 40–55 °C en el punto de activación, sistemática en todas las termocuplas, indica que el esquema original carece de un mecanismo capaz de liberar calor en la ventana de baja temperatura.

El análisis de las constantes cinéticas del esquema de cuatro reacciones confirma esta carencia. A 170 °C, ninguna de las reacciones exotérmicas del esquema presenta una velocidad de reacción apreciable: la LTO ($E_a = 100$ kJ/mol), la HTO de Coque1 ($E_a = 114$ kJ/mol) y la HTO de Coque2 ($E_a = 140$ kJ/mol) son cinéticamente inactivas a esa temperatura, y la única reacción activa, reacción de craqueo, no libera calor. En consecuencia, en la región situada por delante del frente, el modelo solo dispone de la convección del aire inyectado y de la conducción axial como mecanismos de calentamiento, ambos lentos, lo que retrasa la activación de cada zona y reduce la velocidad global de propagación.

Este comportamiento es consistente con la naturaleza bimodal del régimen de oxidación a baja temperatura en crudos pesados, ampliamente documentada en la literatura. La LTO no constituye un proceso único, sino dos regímenes diferenciados: una LTO temprana (150–300 °C), asociada a la oxidación de las fracciones aromáticas y resinas con formación de hidroperóxidos, de carácter exotérmico moderado; y una LTO tardía (300–450 °C), responsable de

la depositación de combustible (Ambalae et al., 2006; Khansari, 2014; Padilla, 2016; Sarathi, 1999). El esquema consolidado de Cinar et al. (2011), adoptado por Pinzón Díaz (2018), agrupa ambos regímenes en una sola reacción de alta energía de activación, por lo que no representa la fase temprana exotérmica que en el crudo real precalienta la zona antes de la llegada del frente. Por esta razón, el esquema cinético se extendió mediante la incorporación de una reacción adicional de oxidación a baja temperatura temprana, que representa la oxidación parcial de la fracción aromática del crudo:



Los parámetros cinéticos de esta reacción se establecieron dentro del rango reportado para la LTO temprana en crudos pesados, con una energía de activación de 69 kJ/mol, comprendida en el intervalo de 50–80 kJ/mol indicado por Khansari (2014) y consistente con los dos regímenes de activación (bajo ≈ 70 kJ/mol y alto ≈ 110 kJ/mol) descritos por Padilla (2016). Una entalpía de reacción moderada, sustancialmente inferior a la de las reacciones de alta temperatura. De este modo, la reacción cierra la "ventana fría" de no reactividad del modelo entre 150 y 300 °C, aportando el mecanismo de autocalentamiento previo al frente que el esquema original no contemplaba, sin saturar el sistema de combustible sólido.

La incorporación de una reacción adicional de LTO temprana se justifica además porque, aunque el modelo inicial reprodujo la propagación general del frente, presentó desviaciones composicionales importantes. En la zona estable del tubo (zonas 3–13), el carbono consumido, el agua formada, el combustible consumido y la fracción de crudo convertida en combustible se sobreestimaron en 21.65 %, 50.07 %, 26.49 % y 26.69 %, respectivamente (Tabla 15). Esto indica que la discrepancia no era solo térmica, sino también de la ruta reactiva, especialmente en la

oxidación temprana, la formación de agua y la generación de coque. Por ello, se incorporó una reacción adicional de LTO temprana para desacoplar la activación inicial del crudo de la deposición principal de combustible y representar mejor la transición de LTO a HTO. Los resultados de la calibración del modelo numérico se presentan en la sección siguiente.

5.3 Evaluación del modelo calibrado de tubo de combustión

Una vez establecidas las dos modificaciones introducidas sobre el modelo inicial, la incorporación de un mecanismo efectivo de disipación térmica y la extensión del esquema cinético con una reacción de oxidación a baja temperatura temprana, se evaluó el desempeño del modelo numérico calibrado frente a los datos experimentales del ensayo de tubo de combustión del afloramiento 1. Esta evaluación tiene un doble propósito: verificar que las correcciones aplicadas reprodujeran de manera consistente la respuesta térmica, composicional y energética del reactor, y confirmar que el modelo resultante constituye una base físicamente confiable para la posterior construcción de la correlación de combustible depositado mediante el diseño de experimentos llevado a cabo.

La evaluación se organizó en torno a los criterios que motivaron la calibración. En primer lugar, se examinó el balance energético del sistema, con el fin de comprobar que la extracción térmica efectiva permaneciera dentro de la ventana físicamente admisible y no actuara como un parámetro de ajuste arbitrario. Posteriormente, se analizó la respuesta térmica del frente de combustión a través de los perfiles de temperatura de las termocuplas, seguida de la validación composicional de los gases efluentes y, finalmente, de la comparación integrada de los parámetros

de desempeño del proceso. Este orden permite verificar que el ajuste térmico se sustenta en una base energética coherente antes de evaluar su efecto sobre las variables observables del sistema.

5.3.1 Balance energético y dimensionamiento de la disipación térmica

El balance energético del modelo calibrado mostró un calor neto de reacción global de 16.80 MJ, valor coherente con el rango experimental estimado de 15–17 MJ. Por su parte, la energía disipada equivalente fue de 9.65 MJ, valor que se ubicó dentro de la ventana de consistencia energética definida entre 7 y 12 MJ (Figura 9). Esta correspondencia permite interpretar la disipación térmica implementada en el modelo como una representación efectiva de las pérdidas asociadas a la camisa metálica, el aislamiento y el sistema de regulación del reactor, y no como un parámetro libre empleado para forzar el ajuste de los picos de temperatura.

Durante la zona estable 3–13, el calor de reacción fue de 12.40 MJ y la energía disipada alcanzó 8.45 MJ, equivalente al 68.1 % del calor de reacción en dicho intervalo. Este resultado evidencia que el amortiguamiento térmico del sistema experimental tiene un papel relevante durante la propagación estable del frente. Por tanto, una vez calibrada esta representación de pérdidas térmicas, sus parámetros se mantuvieron fijos durante el diseño de experimentos para la construcción de la correlación que permita calcular el combustible depositado en la zona estable, con el fin de que las diferencias entre simulaciones respondieran principalmente a los cambios cinéticos y petrofísicos evaluados, y no a variaciones artificiales del control térmico. El balance completo se resume en la Tabla 18.

Tabla 18

Balance energético

<i>Parámetro</i>	<i>Resultado</i>	<i>Rango de Aceptación</i>	<i>Evaluación</i>	<i>Descripción</i>
Q _{rxn} global	16.80 MJ	16-17.2 MJ	Cumple	Calor de reacción
Q _{extracción}	9.65 MJ	7-12 MJ	Cumple	Energía disipada
Q _{cooler} /Q _{rxn} global	57.5 %	~40-55 %	Levemente alto	Relación disipación/Q _{rxn} global
Q _{rxn} zona estable	11.36 MJ	Consistente con propagación estable	Cumple	Calor de reacción en zona estable
Q _{extracción} zona estable	7.70 MJ	Control térmico significativo	Alto	Energía disipada equivalente en zona estable
Q _{extracción} / Q _{rxn} zona estable	67.8 %	~40-55 %	Alto	Relación disipación/Q _{rxn} zona estable
Error balance de energía %	0.508 %	<~1-2 % deseable	Cumple	Error de balance de energía global

Nota. Q_{rxn} = calor liberado por las reacciones; Q_{extracción} = energía térmica extraída; Q_{cooler} = extracción térmica efectiva aplicada por el mecanismo de enfriamiento.

5.3.2 Esquema cinético extendido

Con base en el diagnóstico anterior, el esquema cinético final se estructuró en cinco rutas reactivas: una oxidación temprana a baja temperatura, una etapa de formación dominante de coque, la oxidación de Coque1, la conversión de Coque1 a Coque2 y la oxidación de Coque2. De esta forma, el modelo diferencia la activación inicial del crudo, la generación de combustible y la combustión de alta temperatura. La Tabla 19 resume los parámetros cinéticos principales empleados en el modelo calibrado.

Tabla 19

Parámetros cinéticos del esquema de cinco reacciones del modelo calibrado

<i>Reacción</i>	<i>Tipo</i>	<i>Ecuación estequiométrica</i>	<i>A</i>	<i>E_a</i> (J/gmol)	<i>Entalpia</i> (J/gmol)
Rxn 0	LTO temprana	OIL + 0.5 O ₂ → 2.15 H ₂ O + 0.95 OIL + 0.05 Coque1	8	69 000	2.50E5
Rxn 1	LTO de depósito	OIL + 7.269 O ₂ → 14.538 H ₂ O + 23.613 Coque1	500	100 000	2.19E6
Rxn 2	HTO Coque1	Coque1 + 1.427 O ₂ → 1.287 CO ₂ + 0.279 CO	1.0×10 ⁶	114 000	6.27E5
Rxn 3	Craqueo	Coque1 → 1.382 Coque2	3.0×10 ⁶	80 000	0.00E0
Rxn 4	HTO Coque2	Coque2 + 1.032 O ₂ → 0.931 CO ₂ + 0.202 CO	2.5×10 ⁶	140 000	4.54E5

Nota. LTO = oxidación a baja temperatura; HTO = oxidación a alta temperatura; Rxn = reacción; A = factor preexponencial; E_a = energía de activación. Las filas Rxn 1–Rxn 4 se adaptaron de Pinzón Díaz (2018), a partir de Cinar et al. (2011); Rxn 0 corresponde al ajuste incorporado en esta investigación.

Los valores de la Tabla 19 corresponden al modelo cinético calibrado y son coherentes con la función asignada a cada ruta. La reacción de oxidación temprana, cuya energía de activación (69 kJ/mol) y justificación se detallaron en la Sección 5.3.2, opera además con el factor preexponencial más bajo del esquema ($A = 8$). Este valor reducido garantiza que la reacción active el sistema en el régimen de baja temperatura sin consumir el crudo de forma prematura ni dominar la generación de combustible o de agua, de modo que su papel se limita al calentamiento previo al frente.

En contraste, las reacciones de oxidación a alta temperatura concentran los valores de factor pre-exponencial más elevados (del orden de 10^6) junto con las mayores energías de activación, lo que las mantiene inactivas en el régimen LTO pero las convierte en las rutas dominantes una vez establecido el frente de combustión. La reacción de craqueo es la única no

exotérmica del esquema ($\text{Entalpia} = 0$), al representar una reorganización del coque y no una oxidación.

Las cuatro reacciones heredadas conservan la estructura del esquema consolidado por Pinzón Díaz (2018) sobre la base de Cinar et al. (2011); durante la calibración, los vales del factor pre-exponencial se ajustaron dentro del mismo orden de magnitud y las energías de activación se mantuvieron en los rangos reportados por Padilla (2016) para el sistema de estudio, de modo que la modificación se limitó a la incorporación de la ruta de activación temprana.

5.3.3 Validación térmica

La Figura 23 presenta la comparación, termocupla por termocupla, entre los perfiles de temperatura experimentales (línea continua) y los obtenidos con el modelo calibrado (línea discontinua), en las quince posiciones axiales del reactor, desde la zona de ignición (TC 9) hasta el extremo productor (TC 160). Esta disposición individual permite evaluar el ajuste local del frente de combustión en cada posición a lo largo del tubo.

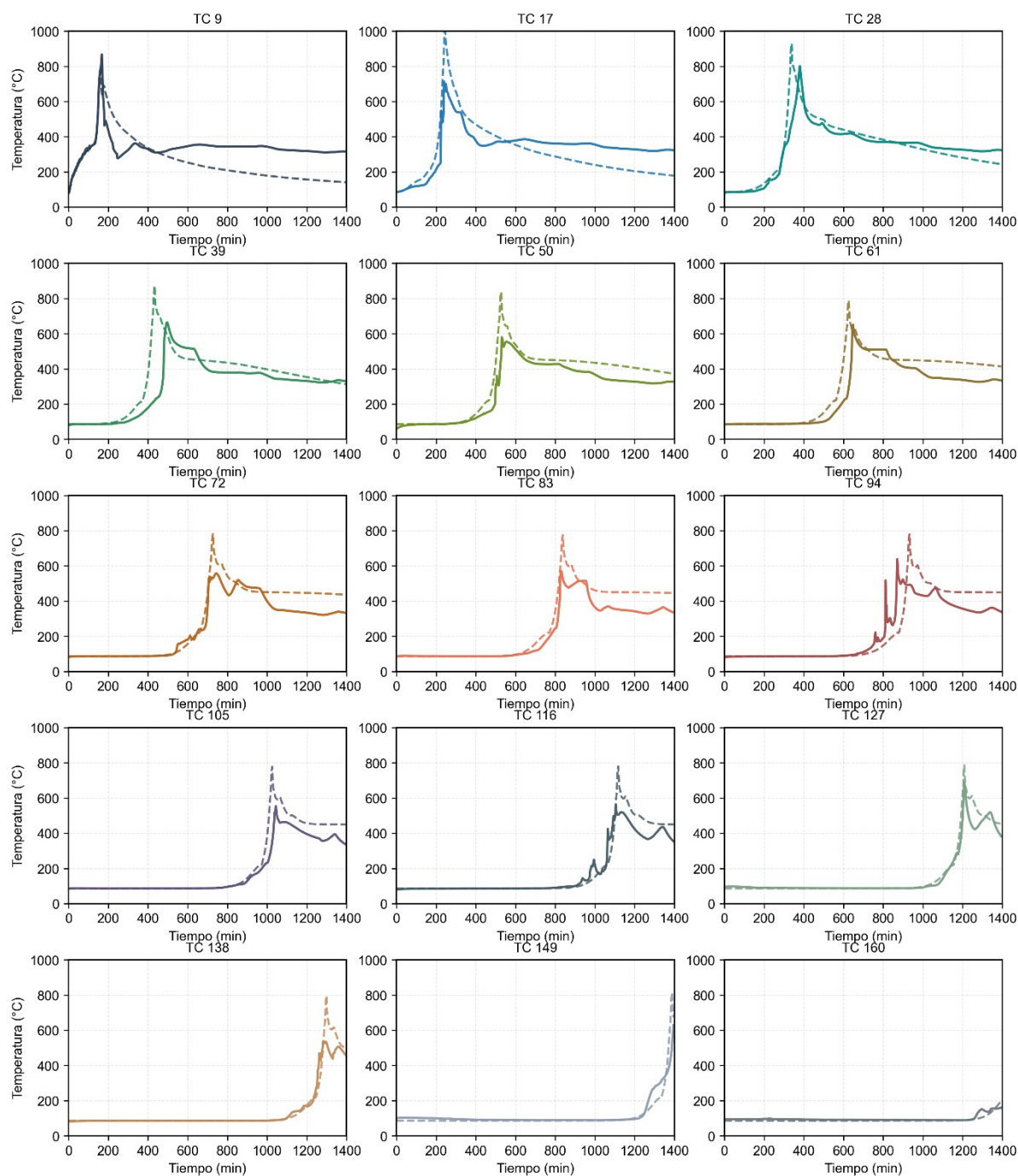
El modelo calibrado reproduce de forma consistente la dinámica del frente de combustión a lo largo de todo el reactor. En cada termocupla se conserva la estructura característica del perfil térmico en cuanto a el ascenso abrupto asociado a la llegada del frente, el pico de combustión y la declinación posterior. El orden de activación de las termocuplas y los tiempos de llegada del pico siguen la progresión axial observada experimentalmente, lo que confirma que la velocidad de propagación del frente está correctamente representada (Figura 24). En las zonas centrales (TC 28 a TC 138), correspondientes al régimen de propagación estable, el ajuste entre los perfiles

simulados y experimentales es particularmente estrecho, tanto en la magnitud del pico como en su instante de ocurrencia.

Las mayores diferencias se concentran en los extremos del reactor: en las zonas de ignición (TC 9 y TC 17), donde la imposición de las condiciones iniciales de encendido condiciona la respuesta térmica. Estas diferencias, propias de las regiones de borde, no comprometen la representación del proceso en la zona de interés, que es la de propagación estable.

Figura 23

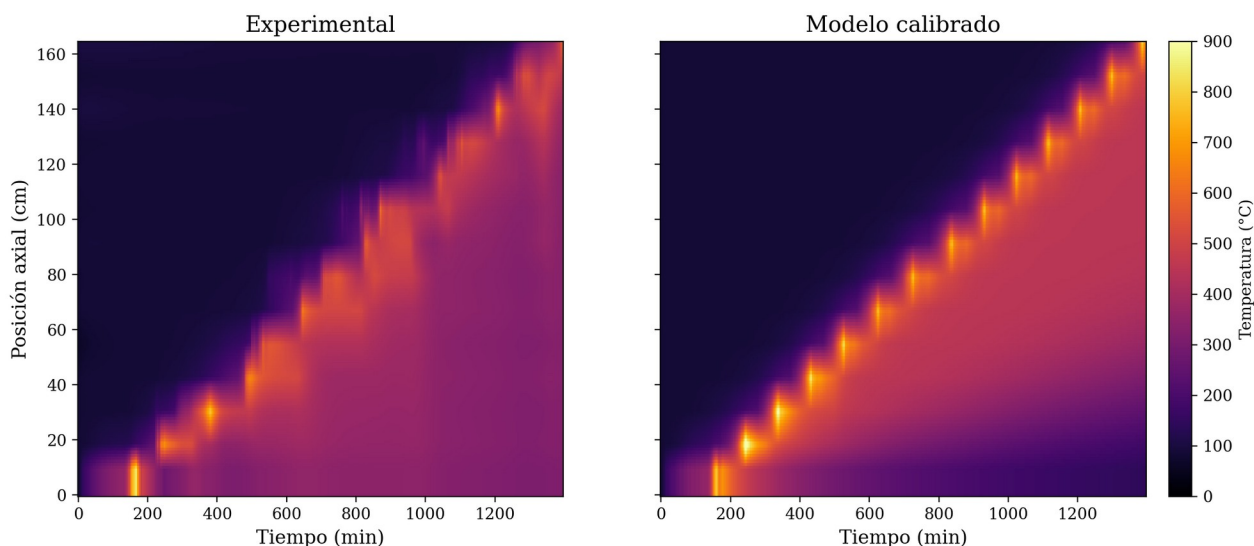
Comparación de perfiles de temperatura por termocupla



Nota. TC 9 a TC 160 indican el índice de celda en la dirección axial (eje K) de la malla, desde el inyector (K = 9) hasta el productor (K = 160).

Figura 24

Evolución espacio-temporal del frente de combustión: comparación experimental y del modelo calibrado



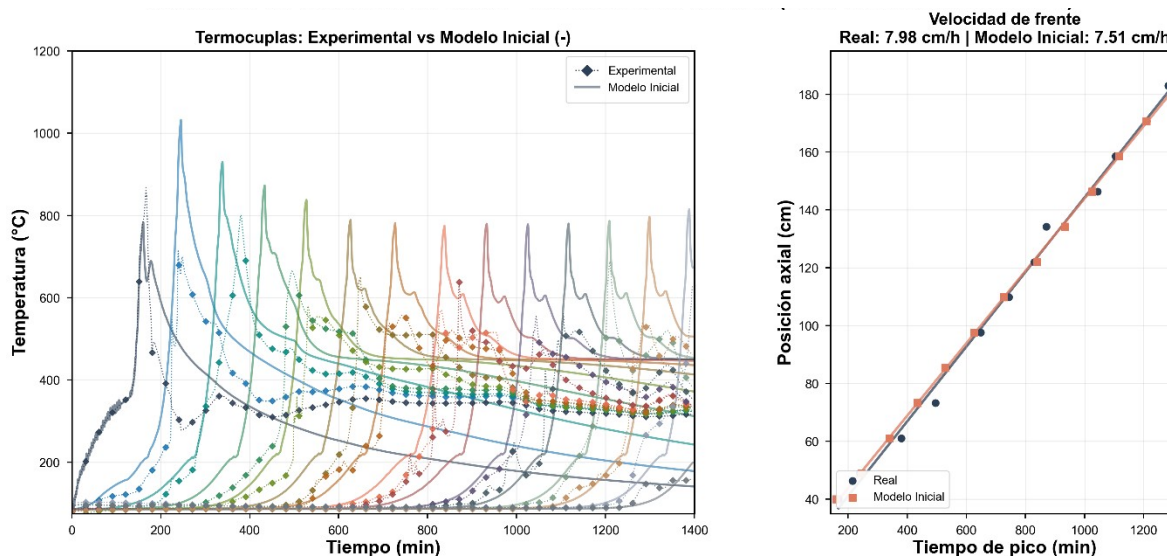
Más allá de la coincidencia en posición y velocidad del frente, la Figura 24 muestra un ajuste más profundo entre el modelo y el experimento en la región barrida por el frente de combustión. En ambos casos, esta zona no se enfría bruscamente, sino que conserva una banda de temperatura intermedia que disminuye gradualmente hacia el extremo de inyección, reflejando el calor almacenado en el sistema.

La similitud de esta cola térmica es especialmente relevante. Si bien reproducir la posición del frente depende sobre todo de la cinética, reproducir el enfriamiento posterior exige representar correctamente el balance energético del sistema, incluida la inercia térmica de la roca y la camisa, así como la disipación de calor hacia el entorno. Por ello, estos resultados validan de forma conjunta las dos correcciones introducidas en el modelo inicial que son el esquema cinético

extendido, que gobierna la posición y el avance del frente, y el mecanismo de disipación térmica acotado, que controla el calor liberado.

Figura 25

Comparación de la velocidad del frente: modelo calibrado y resultados experimentales



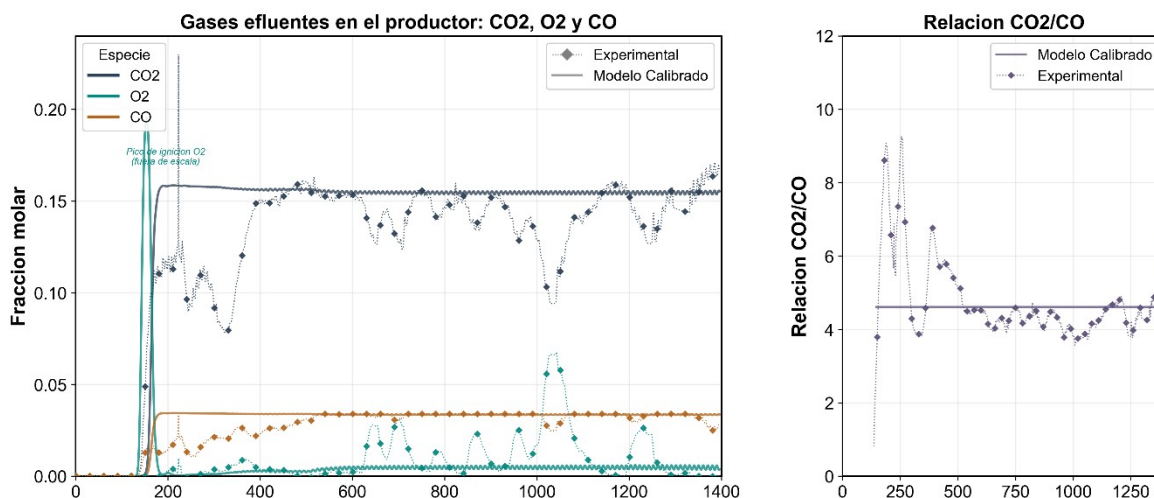
La coincidencia simultánea de la forma, la amplitud y la sincronización de los perfiles térmicos en las quince posiciones axiales, observada en la Figura 25, constituye una evidencia robusta de la calidad de la calibración, al tratarse de un ajuste alcanzado de manera consistente sobre todo el dominio y no en una posición aislada. Esta consistencia se refleja cuantitativamente en la velocidad de propagación del frente de combustión: el modelo calibrado predice un valor de 7.51 cm/h, frente a los 7.98 cm/h obtenidos a partir de los datos experimentales, lo que corresponde a un error relativo de 5.89 %.

En la simulación con el modelo calibrado, posterior a la etapa de ignición, las fracciones molares de los gases efluentes (CO_2 , O_2 , CO) y la relación CO_2/CO en el productor alcanzan valores estables que reproducen los niveles medios observados experimentalmente (Figura 26).

Una fracción de CO_2 en torno a 0.15, una de CO cercana a 0.035 y un consumo de O_2 casi completo, reflejado en su baja fracción residual. Esta comparación complementa la validación térmica, al evaluar si el modelo reproduce no solo la dinámica del frente, sino también la química de la combustión.

Cabe resaltar que la curva experimental de las fracciones molares de estos gases presenta fluctuaciones alrededor de los valores medios, atribuibles a las heterogeneidades del medio poroso y a la naturaleza dinámica del proceso real, mientras que la respuesta simulada describe una envolvente estable que sigue dichos promedios. Esta diferencia es esperable: el modelo representa el comportamiento medio del proceso y no las oscilaciones locales instantáneas del ensayo.

El panel derecho muestra la relación CO_2/CO , indicador de la selectividad de las reacciones de oxidación del combustible. El modelo calibrado reproduce el valor medio experimental, en torno a 4.6, lo que confirma que la repartición entre la oxidación completa (a CO_2) y la parcial (a CO) está correctamente representada. Dado que esta relación es independiente de la cantidad total de combustible depositado y depende únicamente de la ruta de oxidación, su correcto ajuste constituye una validación directa del esquema cinético de alta temperatura.

Figura 26
Fracciones molares de gases efluentes


La Tabla 20 compara los parámetros de desempeño del modelo calibrado con los valores experimentales y con los del modelo inicial, lo que permite dimensionar el efecto conjunto de las dos correcciones introducidas. La calibración redujo de forma generalizada las desviaciones de parámetros que en el modelo inicial presentaban errores superiores al 20 %, como el carbono consumido (21.65 %), la fracción de crudo depositada como coque (26.49 %) o el agua formada (50.07 %) y se ajustaron hasta situarse, en su mayoría, dentro de márgenes de pocos puntos porcentuales.

Especial relevancia tienen los parámetros que gobiernan el escalamiento del proceso. La fracción de crudo inicial depositada como combustible, el requerimiento de aire y la relación aire/combustible se reprodujeron con errores inferiores al 1.4 % (1.25 %, 1.20 % y 1.36 %, respectivamente). Estos tres parámetros son determinantes para el diseño de combustión in situ, ya que vinculan la cantidad de combustible disponible con el caudal de aire necesario para sostener el frente; su correcto modelamiento es condición indispensable para que la predictibilidad conserve

validez al trasladarse a escalas mayores. El requerimiento de combustible, estrechamente relacionado con estos, se ajustó igualmente con un error de apenas 0.14 %.

Los parámetros restantes confirman la solidez global del ajuste. La velocidad del frente y el consumo de oxígeno se reproducen con gran fidelidad, lo que respalda la correcta representación de la dinámica de propagación y del balance oxidativo. Las variables ligadas al balance de hidrógeno presentan una sensibilidad mayor, coherente con la complejidad de representar el contenido de hidrógeno del crudo mediante un esquema cinético de pseudocomponentes; aun así, ambas se mantienen dentro de márgenes aceptables para un modelo de esta naturaleza y reducen de manera notable las desviaciones que presentaba el modelo inicial.

Tabla 20

Parámetros de desempeño en la zona estable del modelo calibrado

<i>Parámetro</i>	<i>Unidad</i>	<i>Experimental</i>	<i>Numérico</i>	<i>Error relativo Modelo Calibrado (%)</i>	<i>Error relativo Modelo Inicial (%)</i>
Velocidad del frente de combustión	cm/h	7.98	7.51	-5.89	-15.91
Requerimiento de aire	m ³ (S)/m ³	405.07	400.20	-1.20	-7.73
Carbono consumido	kg	0.29	0.294	+1.38	+21.65
Oxígeno consumido	%	93.46	93.43	-0.03	+1.29
Hidrógeno consumido	kg	0.02	0.021	+5.0	+35.00
Agua formada	kg	0.16	0.19	+18.7	+50.07
Combustible consumido	kg	0.30	0.31	+3.3	+26.49
Fracción de crudo inicial depositada como coque	fracción	0.08	0.081	+1.25	+26.49
Relación aire/combustible	m ³ (S)/kg	10.99	10.84	-1.36	-4.36
Requerimiento de combustible	kg/m ³	36.86	36.91	+0.14	-3.53
Relación H/C	fracción	0.75	0.8	+6.67	+21.00

Nota. H/C = relación atómica hidrógeno/carbono; m³(S) = metros cúbicos en condiciones estándar.

En conjunto, el modelo calibrado reproduce de manera consistente la respuesta térmica, composicional y de desempeño de la prueba de tubo de combustión, con especial ajuste en los parámetros que condicionan el escalamiento del proceso. Aunado a lo anterior cabe resaltar que la solución numérica obtenida es robusta, sin errores de ejecución ni fallos del solver, con un error global del balance de energía de 0.51 % y errores de balance de masa inferiores al 2 % para las especies que gobiernan la combustión, lo que confirma su consistencia y reproducibilidad. Este

nivel de ajuste, alcanzado simultáneamente sobre variables térmicas, energéticas y másicas, permite considerar el modelo numérico como una base confiable para la siguiente etapa del estudio, que consiste en el diseño de experimentos orientado a la construcción de la correlación de la fracción de combustible depositado con respecto a la masa de crudo inicial presente en el modelo.

6. Construcción y validación de la correlación de la fracción de aceite inicial convertida en combustible

La metodología desarrollada en el Capítulo 4 estableció el diseño de experimentos como la vía para construir una correlación de la fracción de crudo inicial convertida en combustible (F_c), usando el combustible en gramos (C_g) y el requerimiento volumétrico (C_f) como variables de verificación física, a partir de la definición de nueve factores candidatos, sus rangos de variación y la estructura del muestreo. El Capítulo 5, por su parte, proporcionó el instrumento requerido para su ejecución: un modelo numérico del tubo de combustión calibrado, capaz de reproducir de manera consistente la respuesta térmica, composicional y energética del ensayo experimental. Con el diseño definido y el modelo validado, en el presente capítulo se materializa el diseño de experimentos y se presentan sus resultados.

Sobre el modelo calibrado se ejecutaron 146 simulaciones que barrieron de forma sistemática el espacio de propiedades del yacimiento y condiciones de operación; de ellas, 133 desarrollaron un frente de combustión plenamente establecido. El conjunto resultante no se analizó con un único método, sino que se contrastó la regresión por mínimos cuadrados con dos técnicas multivariadas independientes, el análisis de componentes principales (PCA) y la regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS), y se verificó la robustez de los resultados mediante validación cruzada y remuestreo bootstrap. Con esto se logró discriminar, entre los nueve factores evaluados, cuáles gobiernan realmente el combustible depositado y cuáles no aportan capacidad predictiva, además de comparar distintas formas funcionales para identificar la que mejor describe el fenómeno.

Se evidenció que la correlación obtenida, de base física y forma compacta, reproduce el combustible depositado con un grado de ajuste elevado y, lo más importante, estable frente a la

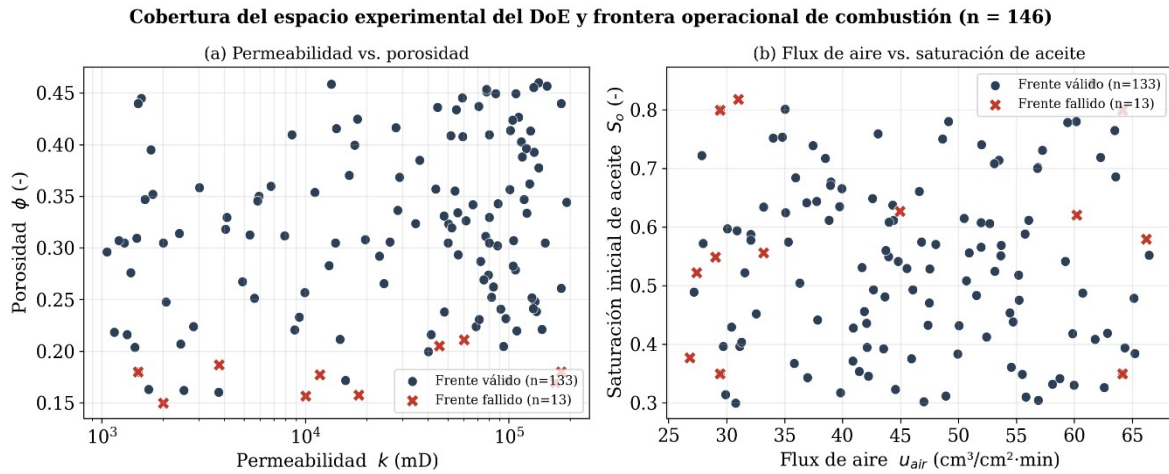
variabilidad muestral. A lo largo de este capítulo se desarrolla el análisis en detalle, desde la ejecución y el filtrado de las simulaciones hasta la selección de variables, la comparación de modelos, la validación y la interpretación física de la correlación. El producto final constituye el insumo central para la inicialización del combustible o coque celda a celda, ya que la fracción obtenida puede aplicarse directamente sobre la masa de crudo inicial disponible en cada celda. Las variables en “Cg” y “Cf” se emplean como controles de consistencia para verificar la coherencia del escalamiento que se aplica en los modelos a escala de yacimiento abordados posteriormente.

6.1 Ejecución y filtrado del diseño de experimentos

El diseño de experimentos se ejecutó sobre el modelo calibrado, completándose las 146 simulaciones programadas con terminación normal. Sin embargo, no todas las combinaciones de parámetros lograron sostener la combustión: se identificaron 13 simulaciones en las cuales no se desarrolló un frente de combustión, identificadas por no superar los 400 °C en ninguna termocupla del tubo. Estas correspondieron principalmente a combinaciones de baja permeabilidad con baja porosidad o saturaciones de aceite extremas, condiciones bajo las cuales el frente no se autopropaga (Figura 27). Lo importante es que su exclusión no representa una pérdida de información, sino que permite delimitar la frontera operacional dentro de la cual el proceso es viable. Con esto, el conjunto efectivo de análisis quedó conformado por 133 simulaciones válidas.

Figura 27

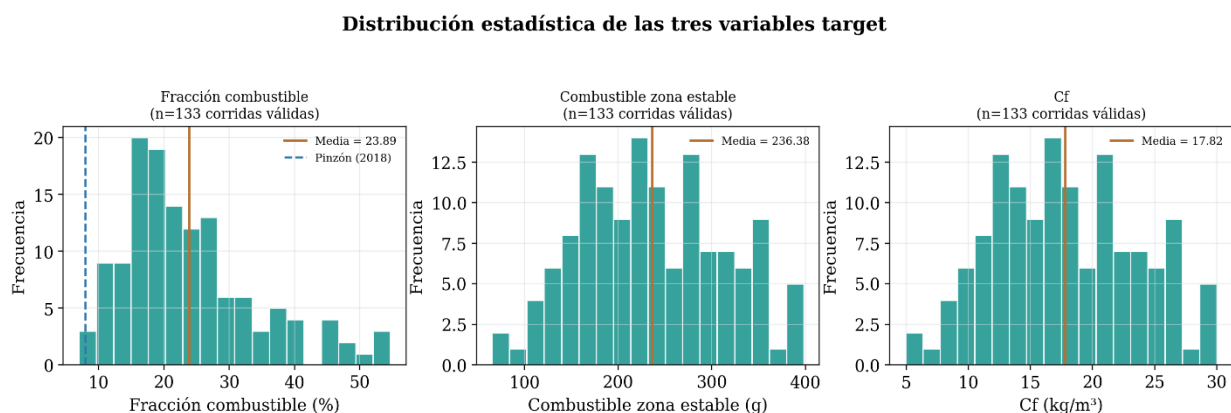
Cobertura del espacio experimental del DoE y frontera operacional



A partir del balance de masa reportado por el simulador se determinó el combustible depositado en la zona estable definida en la sección 4.3.2. que corresponde a la zona de régimen autopropagante del frente de combustión. Sobre esta base se calcularon tres variables objetivo: el combustible depositado en gramos (Cg), la fracción de crudo inicial convertida en combustible (Fc) y el requerimiento volumétrico (Cf) expresado en kg/m³; sus distribuciones se presentan en la Figura 28.

Figura 28

Distribución de las tres variables objetivo



Nota. La línea naranja indica la media muestral; la línea azul punteada en el panel izquierdo (8%) corresponde al valor reportado por Pinzón Díaz (2018, Tabla 10) para el experimento Afloramiento 1.

Aunque las tres variables se reportan para caracterizar el comportamiento del DoE, la interpretación central se realiza sobre la fracción de crudo convertida en combustible (Fc). Se observó que el combustible depositado en gramos y el requerimiento volumétrico Cf siguen distribuciones aproximadamente simétricas alrededor de sus medias (236 g y 17,8 kg/m³, respectivamente), lo que refleja un muestreo equilibrado del espacio experimental. La fracción de crudo convertida en combustible (Fc), en cambio, abarcó un rango más amplio, entre 7,0 % y 54,7 %, con una media de 23,9 %. Este valor medio resulta superior al 8 % reportado experimentalmente por Pinzón Díaz (2018) para Afloramiento 1, lo cual tiene sentido si se considera que el diseño de experimentos incluye condiciones alejadas del punto experimental, como caudales de aire altos y bajas saturaciones de aceite. Esta amplitud no es un problema, sino una condición buscada en el diseño, ya que es precisamente la variabilidad de la respuesta la que permite extraer con buena potencia estadística cómo depende el combustible depositado de cada variable independiente.

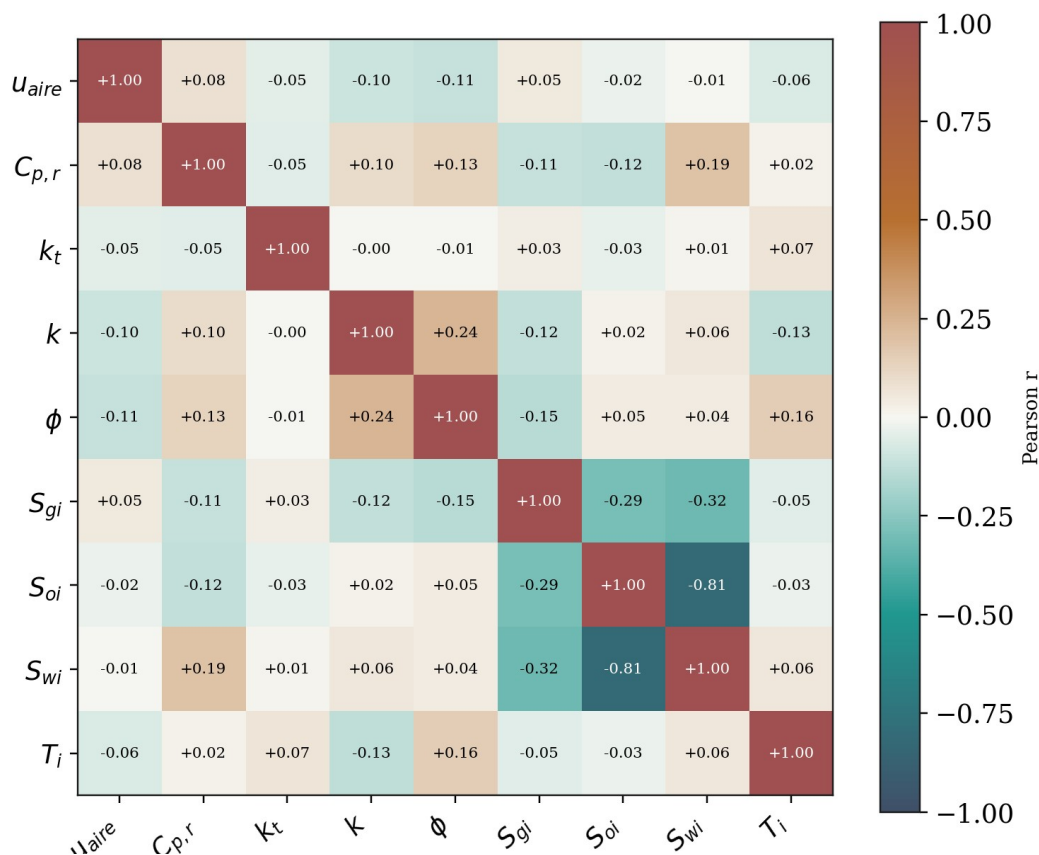
6.2 Análisis exploratorio

Antes de proceder con el ajuste del modelo de regresión se realizó un análisis exploratorio con dos objetivos: verificar que los factores del diseño fueran estadísticamente independientes entre sí y cuantificar de forma preliminar cómo se asocia cada uno con el combustible depositado. Este análisis se aplicó sobre las tres variables objetivo: la fracción de crudo convertida en combustible, el requerimiento volumétrico C_f y la cantidad de combustible en gramos, ya que cada una aporta una mirada complementaria del mismo fenómeno. La fracción es la variable de interés para construir la correlación, por estar normalizada respecto a la masa inicial de aceite y ser directamente transferible al esquema de inicialización en los modelos numéricos a escala de campo; mientras que el combustible en gramos y el C_f sirven como verificación, al confirmar que los factores dominantes se mantienen, aunque cambie la forma de medir el combustible.

Los factores de inflación de la varianza (VIF) de los nueve factores fueron calculados y se observó que los seis factores no sujetos a restricciones como son flux de aire, permeabilidad, porosidad, temperatura inicial, capacidad calorífica y conductividad térmica de la roca, presentaron valores de VIF cercanos a uno, lo que indica que no existe multicolinealidad entre ellos y confirma que el muestreo logró variarlos de forma independiente, como se muestra en la Figura 29. Las tres saturaciones, en cambio, presentaron multicolinealidad perfecta, lo cual tiene sentido si se considera que están sujetas a la restricción física de que su suma debe ser igual a uno. Esta dependencia no es un problema, sino una condición conocida del sistema, y se maneja en la etapa de regresión seleccionando un subconjunto de saturaciones independientes.

Figura 29

Matriz de correlación de Pearson entre los nueve factores del DoE

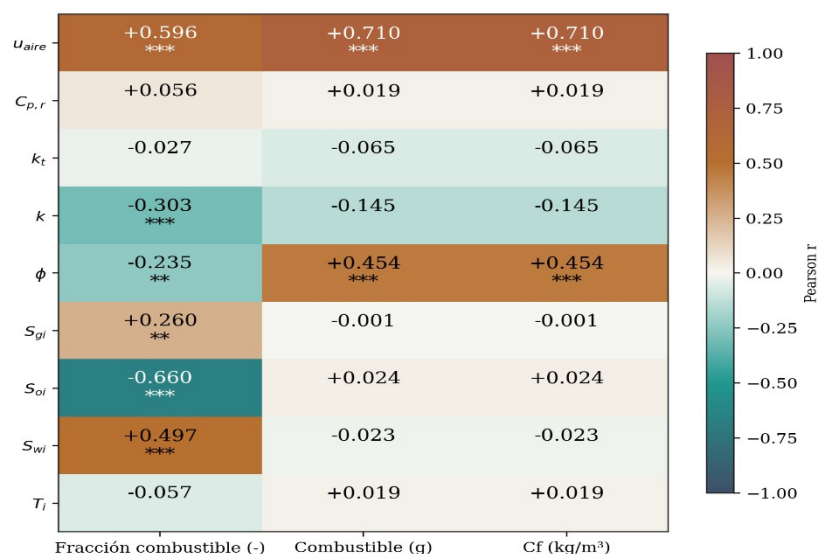


Al analizar la correlación de cada factor con las variables objetivo (Figura 30) se evidenciaron patrones consistentes. El flux de aire mostró la correlación positiva más fuerte con el combustible depositado en gramos “Cg” ($r = 0,71$), lo que lo confirma como el factor operativo dominante. La saturación inicial de aceite, por su parte, presentó la correlación más fuerte con la fracción de crudo convertida en combustible (FC), pero de signo negativo ($r = -0,66$). Esto tiene sentido, ya que a mayor saturación inicial el frente termina quemando una fracción menor de un volumen de petróleo mayor, de modo que la proporción depositada como combustible disminuye.

La permeabilidad y la porosidad también resultaron significativas, aunque con menor magnitud, mientras que la capacidad calorífica, la conductividad térmica y la temperatura inicial no mostraron una influencia apreciable sobre ninguna de las tres variables objetivo.

Figura 30

Matriz de correlación de Pearson entre los factores del DoE y las variables objetivo

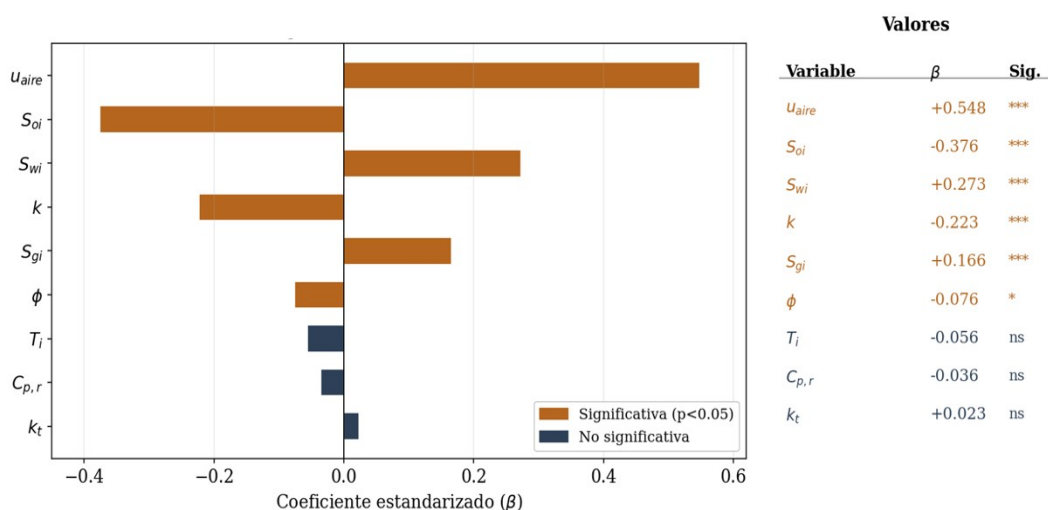


Nota. *** $p < 0.001$, ** $p < 0.01$, * $p < 0.05$

El diagrama de Pareto de los coeficientes estandarizados (Figura 31) ordena la influencia relativa de cada factor sobre la fracción que se deposita como combustible (Fc) y confirma la jerarquía anterior; es decir, que la saturación inicial de aceite y el flux de aire encabezan la magnitud del efecto, seguidos por la permeabilidad y la porosidad, mientras que las propiedades térmicas se ubican por debajo del umbral de significancia. Este análisis preliminar anticipa el conjunto de variables que la regresión formal seleccionará como predictores de la correlación.

Figura 31

Diagrama de Pareto de coeficientes estandarizados para la fracción de combustible depositado (F_c)



6.3 Selección de variables y forma funcional

Para identificar el conjunto de predictores más adecuado, se realizó una búsqueda exhaustiva entre todas las combinaciones posibles de los factores no redundantes, evaluando cada modelo con el criterio de información bayesiano (BIC), que penaliza la complejidad para evitar el sobreajuste. En otras palabras, se probaron distintas combinaciones de factores y se compararon las correlaciones resultantes. Esta búsqueda se realizó tomando la fracción de crudo convertida en combustible (F_c) como respuesta principal, mientras que los resultados de las otras dos variables (C_g y C_f) se emplearon para verificar que la selección no fuera un artefacto de la normalización escogida.

Se evidenció que el modelo con menor BIC fue el de cuatro variables independientes (flux de aire, permeabilidad, porosidad y saturación inicial de aceite), todas con coeficientes significativos. Lo importante es que añadir más factores no mejoró el criterio, lo que confirma que estas cuatro variables capturan la mayor parte de la información sobre la fracción de combustible depositado.

Tabla 21

Mejores modelos OLS evaluados mediante el BIC

<i>N° Variables</i>	<i>Variables</i>	<i>R²</i>	<i>R²adj</i>	<i>BIC</i>	<i>AIC</i>	<i>C_p</i>	<i>p_max</i>
3	$u_{\text{aire}}, k, S_{oi}$	0,829	0,825	-439,4	-450,9	9,93	<0,001
4	$u_{\text{aire}}, k, \phi, S_{oi}$	0,836	0,831	-440,6	-455,1	5,82	0,015
4	$u_{\text{aire}}, k, S_{oi}, T_i$	0,834	0,829	-438,5	-453,0	7,87	0,048
5	$u_{\text{aire}}, k, \phi, S_{oi}, T_i$	0,840	0,833	-438,3	-455,7	5,35	0,117
5	$u_{\text{aire}}, C_{p,i}, k, \phi, S_{oi}$	0,838	0,831	-436,7	-454,1	6,87	0,331

Nota. OLS = mínimos cuadrados ordinarios; BIC = criterio de información bayesiano; AIC = criterio de información de Akaike; C_p = estadístico de Mallows; p_{max} = mayor valor p de los coeficientes.

La Tabla 21 resume los mejores modelos de regresión obtenidos en la búsqueda exhaustiva, junto con los indicadores que se emplearon para compararlos. La selección entre ellos no puede basarse solo en el coeficiente de determinación R^2 , ya que este puede aumentar al agregar variables que no aportan información relevante. Por esta razón, la comparación se apoyó en criterios que penalizan la complejidad del modelo. El BIC y el AIC evalúan el equilibrio entre ajuste y simplicidad: entre menores sean, mejor es el modelo, y de los dos el BIC penaliza con mayor rigor las variables adicionales. El C_p de Mallows complementa este análisis, ya que un buen modelo presenta un valor cercano a su número de parámetros. A su vez, el $p_{\text{máx}}$ corresponde al mayor valor-p entre los coeficientes y permite verificar que todas las variables sean significativas.

De acuerdo con estos criterios, el modelo de cuatro variables (u_{aire} , k , ϕ y Soi) se perfila como el más favorable, ya que presenta el menor BIC, un C_p cercano a su número de parámetros y un $p_{máx}$ de 0,015, lo que indica que todas sus variables son significativas. El modelo de cinco variables que agrega la temperatura inicial (T_i) alcanza un R^2 un poco mayor, pero su BIC es más alto y su $p_{máx}$ de 0,117 evidencia que la T_i no es significativa. Estos resultados apuntan hacia el modelo de cuatro variables; sin embargo, antes de adoptarlo como correlación definitiva, esta selección se contrasta más adelante con técnicas multivariadas independientes y con un análisis de robustez. Lo importante es que la decisión no se basa en un único criterio, sino en la convergencia de varios métodos que se verifican entre sí.

Una vez definidas las variables, se evaluó la forma funcional más adecuada para representar su relación con el combustible depositado. Además del modelo lineal, que suma los efectos individuales, se probó una forma potencial (Power-Law), más consistente con las interacciones multiplicativas propias de la combustión entre transporte, disponibilidad de aceite y suministro de oxígeno. La Tabla 22 compara ambas formas, con tres y cuatro variables, mediante métricas de ajuste y validación cruzada. Lo importante es que el cambio de la forma lineal a la potencial produjo la mejora más notable: el error porcentual medio se redujo de 15,19 % a 11,40 %, lo que representa una disminución cercana al 25% del error de predicción. La forma potencial de cuatro variables mostró el mejor desempeño global, con un R^2 de 0,860, un R^2_{CV} de 0,844 y el menor error porcentual medio (MAPE 11,40 %).

Tabla 22

Comparación de formas funcionales (lineal y potencial) según métricas de ajuste

<i>Modelo</i>	<i>k</i>	<i>R²</i>	<i>R²adj</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>MAPE (%)</i>	<i>R²CV</i>	<i>RMSECV</i>
OLS Lineal (<i>u_{aire}</i> , <i>k</i> , <i>S_{oi}</i>)	3	0,829	0,825	0,043	0,032	15,19	0,817	0,045
OLS Lineal (<i>u_{aire}</i> , <i>k</i> , ϕ , <i>S_{oi}</i>)	4	0,836	0,831	0,042	0,030	14,42	0,823	0,044
Power-Law (<i>u_{aire}</i> , <i>k</i> , <i>S_{oi}</i>)	3	0,858	0,855	0,039	0,029	12,67	0,845	0,041
Power-Law (<i>u_{aire}</i> , <i>k</i> , ϕ , <i>S_{oi}</i>)	4	0,860	0,856	0,039	0,027	11,40	0,844	0,041

Nota. N° = número; *k* = número de variables; RMSE = raíz del error cuadrático medio; MAE = error absoluto medio; MAPE = error porcentual absoluto medio; *R²adj* = coeficiente de determinación ajustado; *R²CV* y RMSECV = métricas de validación cruzada.

Los coeficientes de la forma potencial con cuatro variables se estimaron mediante una regresión logarítmica. La Tabla 23 presenta los coeficientes, sus errores estándar, los estadísticos *t* y los valores *p*. Los cuatro predictores resultaron significativos.

Tabla 23

Coeficientes del modelo potencial seleccionado para la fracción de combustible

<i>Término</i>	<i>Coeficiente</i>	<i>Error estándar</i>	<i>t</i>	<i>p</i>	<i>IC 95 %</i>
Constante (lna)	-5,770	0,241	-23,95	<0,001	[-6,247; -5,293]
<i>u_{aire}</i>	+1,018	0,055	+18,50	<0,001	[+0,909; +1,127]
<i>K</i>	-0,045	0,008	-5,36	<0,001	[-0,061; -0,028]
Φ	-0,167	0,050	-3,35	0,001	[-0,266; -0,069]
<i>Soi</i>	-0,950	0,046	-20,54	<0,001	[-1,042; -0,859]

Nota. La constante representa el logaritmo natural del coeficiente multiplicativo *a*, de modo que $a = \exp(-5,770) = 3,12 \times 10^{-3}$. Todos los predictores son significativos ($p < 0,05$).

Los exponentes del flux de aire y de la saturación inicial de aceite fueron los mayores, lo que confirma su papel dominante. En particular, el exponente del flux, cercano a uno, indica una relación casi proporcional con el combustible depositado. Los exponentes de la porosidad y la permeabilidad fueron menores, pero significativos, en línea con su papel de factores de segundo orden.

6.4 Verificación multivariada

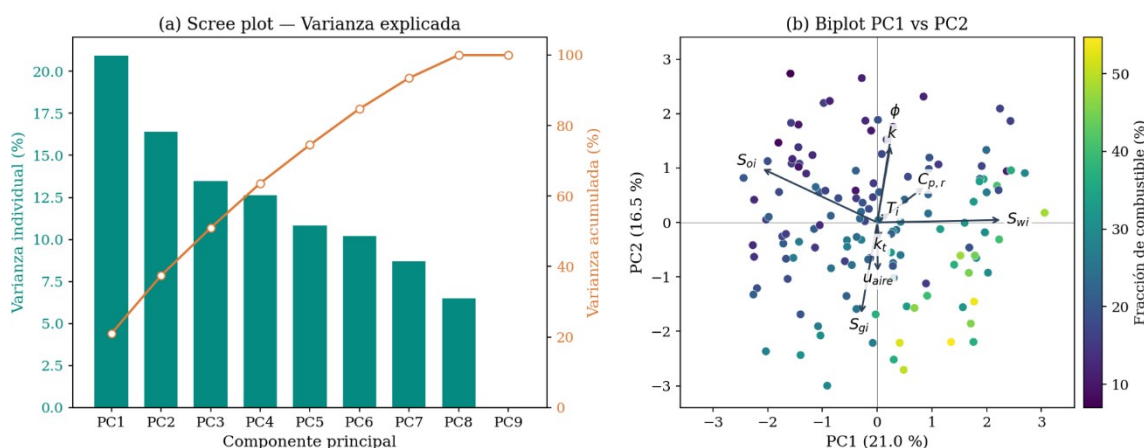
Para verificar que la correlación no dependiera del método de regresión, la selección de variables se contrastó con dos técnicas multivariadas de fundamento distinto: análisis de componentes principales (PCA) y regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS). Como ambas analizan directamente la estructura de covarianza de los datos, constituyen una prueba independiente de la robustez de las variables seleccionadas.

El PCA confirmó dos aspectos clave. Primero, la novena componente principal tuvo varianza nula, en concordancia con la restricción física $S_g + S_o + S_w = 1$, lo que valida tratar las saturaciones como variables dependientes. Segundo, las ocho componentes restantes distribuyeron la varianza sin direcciones dominantes, lo que indica que factores como el flux de aire, la permeabilidad y la porosidad aportan información propia y no redundante. Así, el análisis respalda que la permeabilidad y la porosidad no son variables colineales ni superfluas. Estos resultados se resumen en la Figura 32, que presenta la varianza explicada por componente (panel a) y el biplot de las dos primeras componentes coloreado por la fracción de combustible (panel b). En el biplot se observa que los vectores del flux de aire y de la saturación de aceite apuntan en direcciones contrarias, lo que indica que actúan de forma opuesta sobre el combustible depositado: el flux lo

incrementa y la saturación lo reduce, en concordancia con los signos de los coeficientes de la regresión (Tabla 23).

Figura 32

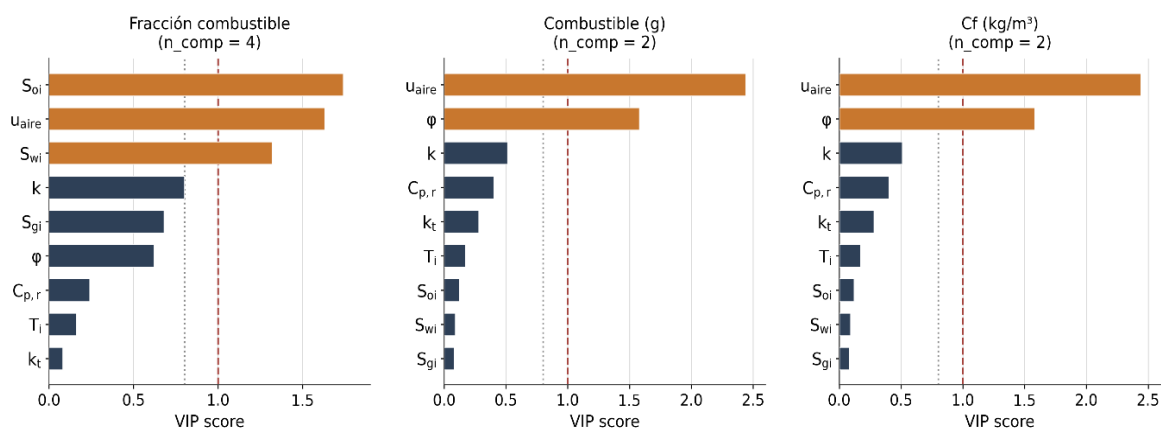
Varianza y biplot del análisis de componentes principales



El PLS asigna a cada factor un puntaje de importancia (VIP) según su contribución a la covarianza con la variable objetivo. La Figura 33 muestra que el flux de aire y la saturación inicial de aceite obtuvieron los mayores puntajes en las tres variables objetivo, confirmando su papel dominante. La permeabilidad y la porosidad presentaron valores intermedios; esta última alcanzó un VIP alto para la variable objetivo “combustible en gramos” y para “Cf”. Cabe resaltar que el VIP y la significancia estadística no miden lo mismo, el primero refleja el peso de un factor en la estructura global de covarianza, mientras que la segunda indica si su efecto sobre la respuesta es distinto de cero al controlar los demás factores. Por ello, que la permeabilidad y la porosidad tengan un VIP moderado pero coeficientes significativos no es contradictorio, sino consistente con un efecto secundario, pero real.

Figura 33

Scores VIP del PLS por variable objetivo



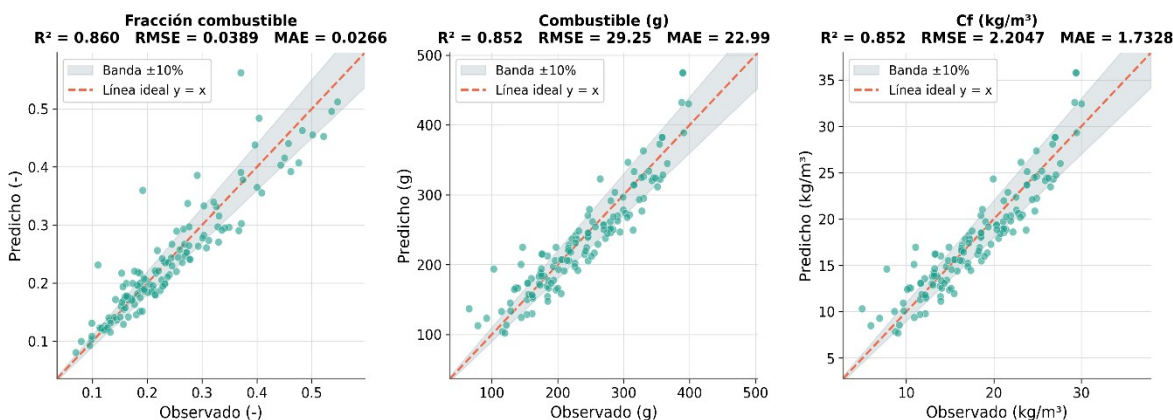
6.5 Comparación de modelos y robustez

La evaluación de los modelos candidatos se basó en múltiples métricas de ajuste, predicción y error en unidades originales, ya que el R^2 por sí solo es insuficiente; puesto que es un coeficiente de determinación adimensional, no una medida directa del error de predicción.

La regresión por mínimos cuadrados, el PCA y el PLS coinciden en que el flux de aire y la saturación inicial de aceite dominan la fracción de crudo convertida en combustible (F_c), y que esta jerarquía se mantiene en C_g y C_f . La dependencia entre saturaciones responde a una restricción estructural del sistema, no a un artefacto del análisis. Sobre ese núcleo de variables dominantes, la permeabilidad y la porosidad actúan como factores de segundo orden, respaldados por su significancia estadística, su aporte a los criterios de información y su fundamento físico. Así, la correlación no depende de un solo criterio, sino de la convergencia de métodos independientes, lo que sustenta su robustez.

Figura 34

Comparación cuantitativa de modelos para la fracción de combustible



Tras la verificación con PCA y PLS, el modelo Power-Law de cuatro variables se confirma como la mejor alternativa. Presenta el menor error de predicción ($RMSE = 0,0389$; $MAE = 0,0266$) y reduce el error porcentual de 15,2 % a 11,4 %, mientras que las diferencias en R^2 son marginales. Por ello, su selección se basa en su mayor capacidad predictiva, no en un R^2 más alto. Esto se aprecia en la Figura 34, donde los valores predichos y observados para las tres respuestas se agrupan cerca de la línea ideal y dentro de la banda de $\pm 10\%$, con R^2 entre 0,852 y 0,860.

6.6 Correlación final

Como cierre del análisis y con el fin de contar con una herramienta de aplicación directa, se adoptó como correlación final la correspondiente a la fracción de aceite convertida en combustible en la zona estable (F_c), que es la variable objetivo principal del estudio. Esta correlación no pretende ser universal, sino aplicarse únicamente dentro de los rangos

experimentales explorados en el diseño, reportados en la Tabla 24. Su forma funcional se presenta a continuación:

$$F_c = 3,12 \times 10^{-3} u_{air}^{+1,018} k^{-0,045} \phi^{-0,167} S_{oi}^{-0,950} \quad (17)$$

Tabla 24

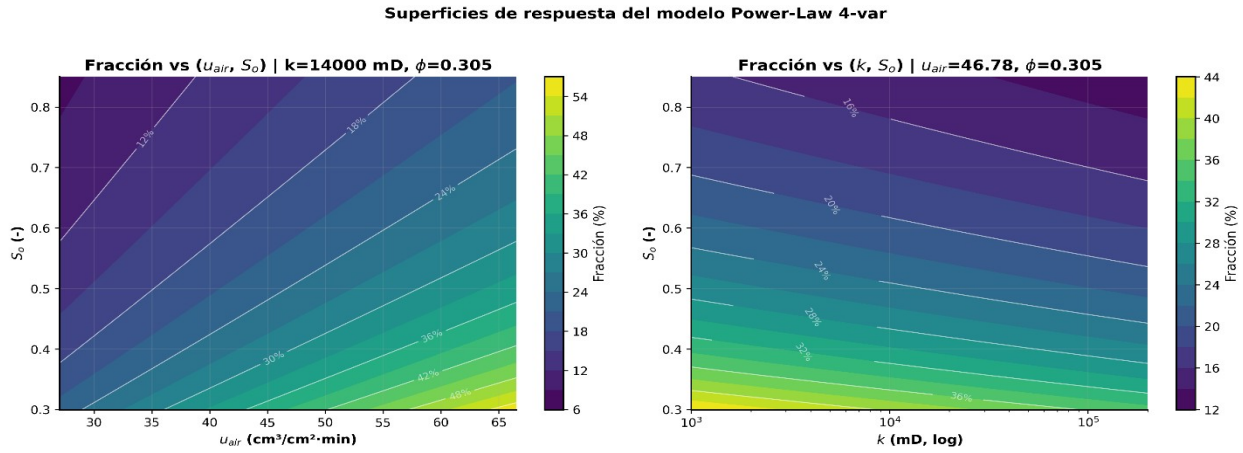
Rangos de validez de las variables incluidas en la correlación de F_c

Variable	Rango de validez
Flux de aire, u_{air}	27,1 a 66,5 cm ³ ST/(cm ² ·min)
Permeabilidad, k	1.000 a 200.000 mD (1 a 200 Darcy)
Porosidad, ϕ	0,15 a 0,46
Saturación inicial de aceite, S_{oi}	0,30 a 0,85

Las superficies de respuesta en la Figura 35 muestran que la fracción de combustible (F_c) aumenta con el flux de aire y disminuye con la saturación de aceite inicial en todo el rango del DoE. El efecto de la permeabilidad es notablemente menor, lo que justifica que su exponente sea pequeño ($-0,045$). La validez del modelo se mantiene en todo el espacio operacional del DoE expandido, incluyendo el rango de permeabilidad analizado.

Figura 35

Superficies de respuesta del modelo seleccionado para el cálculo de la fracción de combustible (Fc)



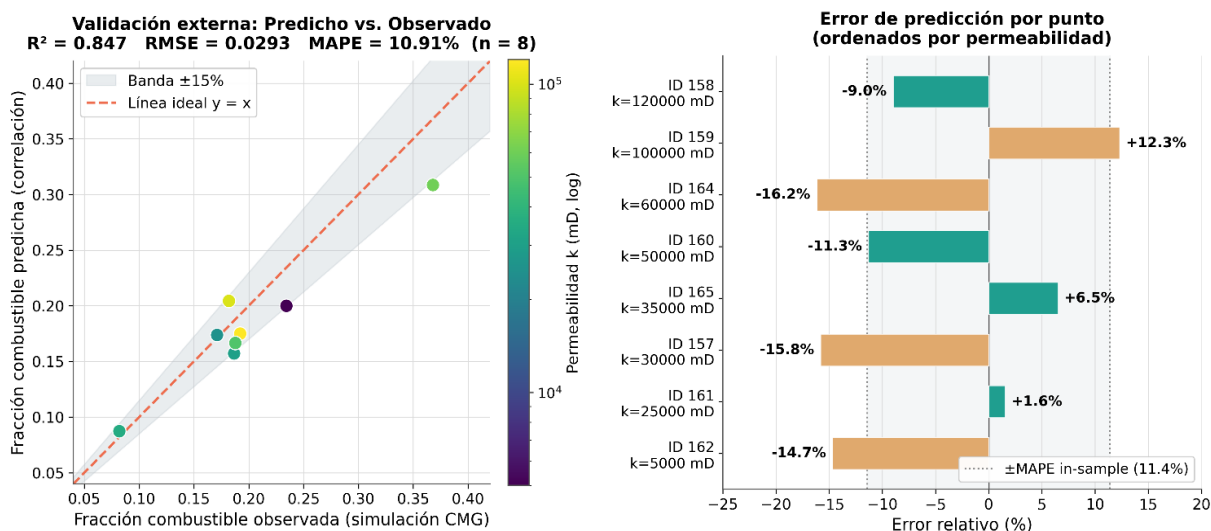
En el caso del combustible depositado en gramos absolutos (C_g) y del requerimiento volumétrico de combustible (C_f), las correlaciones son matemáticamente equivalentes, ya que C_f se obtiene al dividir ese combustible entre un volumen de roca constante (C_f = Fuel / V_{roca}). Por eso, ambas comparten el mismo conjunto de variables (flux de aire, permeabilidad, conductividad térmica y porosidad), a diferencia de la fracción, que se expresa respecto al aceite inicial. Sus expresiones se presentan a continuación:

$$C_g = 3,12 \times 10^{-3} u_{air}^{+1,018} k^{-0,045} \phi^{-0,167} S_{oi}^{-0,950} \quad (18)$$

$$C_f = 1,528 u_{air}^{+1,014} k^{-0,045} k_t^{-0,062} \phi^{+0,834} \quad (19)$$

Figura 36

Desempeño predictivo de la correlación (F_c) vs simulaciones de verificación



Para comprobar que la correlación no solo ajusta los datos con los que fue construida, sino que predice condiciones nuevas, se evaluó frente a ocho simulaciones numéricas de verificación independientes, ajenas al diseño pero dentro de los rangos explorados (Figura 36). Lo importante es que el error se mantuvo en el mismo orden que el del conjunto de ajuste; es decir, un MAPE de 10,91 % frente al 11,4 % interno, con la mayoría de los puntos dentro de ese margen. En otras palabras, predecir simulaciones nuevas no degradó el desempeño, lo cual constituye la evidencia más directa de que la correlación para el cálculo de (F_c) es generalizable dentro de su dominio de validez.

Los exponentes obtenidos para la correlación potencial son consistentes con la interpretación física del proceso y con antecedentes reportados para combustión in situ. El exponente asociado al flux de aire fue cercano a la unidad (+1,018), lo que indica una relación casi proporcional entre el suministro de oxidante y la fracción de crudo convertida en combustible.

Este comportamiento es coherente con la literatura clásica de tubos de combustión, donde el flux de aire controla la intensidad del frente y el requerimiento de combustible (Sarathi, 1999).

La saturación inicial de aceite presentó un exponente negativo significativo ($-0,95$), lo cual indica que, a mayor volumen inicial de crudo disponible, la fracción relativa convertida en combustible tiende a disminuir. Este resultado es compatible con correlaciones previas que reportan una dependencia inversa entre el combustible requerido y la saturación inicial de aceite (Mamora, 1993).

La permeabilidad mostró un exponente de baja magnitud ($-0,04$), consistente con un efecto secundario frente al control dominante del flux de aire y la saturación de aceite. Esta baja sensibilidad concuerda con la interpretación de que, una vez establecido el régimen autopropagante, la permeabilidad influye principalmente sobre el transporte y la distribución del flujo, pero no domina la cantidad de combustible generado (Belgrave et al., 1993).

Finalmente, la forma potencial obtenida en este trabajo permite representar de manera más flexible la no linealidad observada en la fracción de combustible, especialmente respecto al flux de aire y la saturación inicial de aceite. Por tanto, la correlación propuesta preserva una interpretación física coherente con el mecanismo de combustión in situ.

7. Evaluación de la correlación de combustible depositado y su aplicación en modelos de simulación a escala de laboratorio y campo

7.1 Introducción y lógica de escalamiento

Establecida la correlación para la fracción de crudo inicial convertida en combustible (F_c), y verificada su capacidad predictiva mediante el diseño de experimentos, el siguiente paso consiste en evaluar su aplicabilidad como criterio de inicialización en modelos numéricos de mayor escala. El propósito de este capítulo es analizar si la inicialización del coque equivalente permite conservar una representación más consistente de la disponibilidad de combustible al pasar del tubo de combustión a modelos con dimensiones a escala de campo, sin asumir que dicha estrategia elimina por completo los efectos asociados al escalamiento.

Para ello, se plantea una secuencia de evaluación progresiva. Primero, la estrategia se verifica en el modelo de tubo de combustión, que constituye la escala con referencia experimental directa. Posteriormente, se evalúa su comportamiento frente al cambio de tamaño de celda y, finalmente, se aplica en un modelo de campo, donde se contrasta con el esquema cinético convencional y con una referencia analítica de desempeño. En cada etapa se comparan dos estrategias: una simulación numérica con cinética convencional, en la cual el combustible se forma dinámicamente mediante las reacciones de oxidación y formación de coque, y una simulación con

inicialización del coque, en la cual el combustible equivalente se asigna celda a celda a partir de la correlación F_c .

La comparación se realiza manteniendo como criterio de similitud el flux de aire del tubo de combustión, en la medida en que esta variable controla el suministro de oxígeno por unidad de área expuesta al frente. No obstante, se reconoce que al escalar el problema intervienen otros factores, como la geometría del flujo, el tamaño de celda, las condiciones de frontera, la distribución de saturaciones, las pérdidas térmicas y la heterogeneidad petrofísica. Por esta razón, el análisis no busca atribuir la propagación del frente únicamente al flux y al combustible disponible, sino evaluar si la inicialización del coque reduce una limitación específica de las mallas gruesas que conlleva a la pérdida de resolución local en la formación dinámica del combustible y posterior avance del frente de combustión.

Bajo esta lógica, el capítulo incorpora un análisis de sensibilidad al tamaño de celda para la discretización espacial. De esta forma, la estrategia de inicialización del coque se evalúa no como una sustitución completa de la física de combustión, sino como una herramienta de escalamiento destinada a preservar el efecto agregado de la fracción de crudo que se transforma en combustible durante el avance del frente.

7.2 Prueba de concepto en el modelo de tubo de combustión

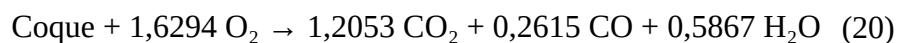
Antes de llevar la estrategia de inicialización del coque a las mallas gruesas de campo, es necesario demostrarla en el caso más simple y mejor caracterizado que es el tubo de combustión unidimensional.

El propósito de esta sección es verificar que sustituir la formación dinámica del combustible por una condición inicial de coque equivalente aplicando cinética no Arrhenius, con una única reacción de combustión, reproduce el comportamiento experimental del frente y conserva sus rasgos físicos (propagación, velocidad y perfiles térmicos) y químicos (estequiometría, relación CO_2/CO , relación H/C y formación de agua). Así, antes de evaluar la inicialización del coque al escalar, se comprueba su validez en la única escala con referencia experimental directa, que sirve como base del escalamiento a dos y tres dimensiones.

7.2.1 Modelo cinético equivalente

En el esquema cinético original (ver Tabla 8), el combustible sólido se genera mediante reacciones de oxidación de baja temperatura y de craqueo, y se consume luego mediante oxidación a alta temperatura (HTO). La estrategia de inicialización del coque elimina la etapa de formación, el coque se inicializa como condición inicial y su consumo se describe mediante una única reacción HTO equivalente, que debe conservar los productos y las relaciones químicas que gobiernan el frente.

La reacción equivalente se formuló adoptando como parámetros de diseño tres rasgos químicos medidos en el proceso real, de modo que la reacción respetara los datos experimentales en lugar de ajustarse libremente: la relación $\text{CO}_2/\text{CO} = 4,61$ del modelo calibrado, una relación $\text{H/C} = 0,80$ representativa del combustible oxidado y la producción de agua propia de la combustión. Con estos parámetros de diseño se obtuvo la reacción:



La relación CO_2/CO se verifica directamente ($1,2053 / 0,2615 \approx 4,61$), y la producción de agua devuelve al combustible equivalente un hidrógeno aparente físicamente representativo, evitando que se comporte como carbono seco. Esta reacción no reconstruye las distintas rutas de oxidación y craqueo del esquema original, sino que representa el consumo a alta temperatura del coque ya inicializado, conservando su firma química (ver Tabla 25).

La energía de activación, $E_a = 140 \text{ kJ/mol}$, se adoptó de Padilla (2016), conservando así un parámetro reportado para la combustión del caso de estudio. El factor pre-exponencial, $A = 6 \times 10^5$, fue el único parámetro ajustado, calibrado para reproducir la velocidad experimental del frente, mientras que la entalpía de reacción se mantuvo en $626\,921 \text{ J/gmol}$ de coque, coherente con el calor de combustión del modelo calibrado.

Tabla 25

Criterios conservados en la reacción equivalente

<i>Elemento</i>	<i>Valor / coeficiente</i>	<i>Criterio conservado</i>	<i>Uso en la validación</i>
CO2	1.2053	Relación CO2/CO	Calidad de oxidación.
CO	0.2615	Relación CO2/CO	Control de combustión incompleta.
H2O	0.5867	H/C aparente	Recupera agua de combustión.
O2	1.6294	Balance de oxígeno	Controla requerimiento de aire por combustible.
Coque/FuelEq	1.0000	Combustible equivalente	Representa el coque inicializado.

Nota. HTO = oxidación a alta temperatura; H/C = relación atómica hidrógeno/carbono.

7.2.2 Criterio de inicialización del combustible

Como se planteó en la sección metodológica, el coque inicializado en cada celda no se asigna de manera arbitraria, sino que se calcula a partir de la fracción de crudo inicial convertida en combustible (F_c) predicha por la correlación. Esta fracción se aplica sobre la masa de aceite inicialmente disponible en cada celda y, posteriormente, se transforma en la concentración molar de sólido requerida por el simulador. El procedimiento se expresa mediante las siguientes ecuaciones:

$$m_{oil,i} = V_{b,i} \phi_i S_{o,i} \rho_o \quad (21) \quad m_{fuel,i} = F_{c,i} m_{oil,i} \quad (22) \quad C_{fuel,i} = \frac{m_{fuel,i}}{M_{fuel} V_{b,i}} \quad (23)$$

donde $m_{oil,i}$ es la masa inicial de aceite en la celda i , $V_{b,i}$ es el volumen bulk de la celda, ϕ_i es la porosidad, $S_{o,i}$ es la saturación inicial de aceite, ρ_o es la densidad del crudo, $m_{fuel,i}$ es la

masa de combustible equivalente a inicializar, $F_{c,i}$ es la fracción de crudo convertida en combustible estimada por la correlación, M_{fuel} es la masa molar del pseudo-componente combustible y $C_{\text{fuel},i}$ es la concentración molar de sólido ingresada al simulador.

Cabe señalar que la formulación de las ecuaciones (21) a (23) incorpora explícitamente el volumen bulk de cada celda, $V_{b,i}$, tanto en el cálculo de la masa inicial de aceite como en la conversión de la masa de combustible a concentración molar de sólido. En consecuencia, la variabilidad del volumen entre celdas, propia de discretizaciones radiales en las que las celdas cercanas al pozo pueden presentar menor tamaño que las celdas más alejadas, queda considerada en el procedimiento de inicialización. Esto se debe a que la correlación estima una variable intensiva, correspondiente a la fracción de aceite inicial convertida en combustible, (F_c), mientras que la masa de coque asignada a cada celda se calcula posteriormente a partir de la masa de aceite disponible en esa celda, la cual depende de su volumen particular. De este modo, antes de expresarse como concentración molar, la cantidad de combustible inicializado queda escalada por el volumen bulk de la celda correspondiente. Por tanto, la inicialización celda a celda conserva la consistencia del balance de masa local y permite aplicar la correlación en celdas con diferentes volúmenes dentro del dominio de evaluación del modelo.

En el modelo de tubo de combustión al tratarse de un medio homogéneo, las propiedades V_b , ϕ , S_o , ρ_o y F_c son constantes dentro de la zona reactiva. Por tanto, el procedimiento anterior produce el mismo valor de combustible inicializado en todas las celdas seleccionadas, dando lugar a una carga uniforme. Esta carga uniforme no constituye un tratamiento especial del tubo, sino el caso particular de la formulación general que posteriormente se aplica celda a celda en modelos,

donde la heterogeneidad petrofísica y de saturación permite que la inicialización del coque varíe espacialmente.

7.2.3 Validación térmica y velocidad del frente

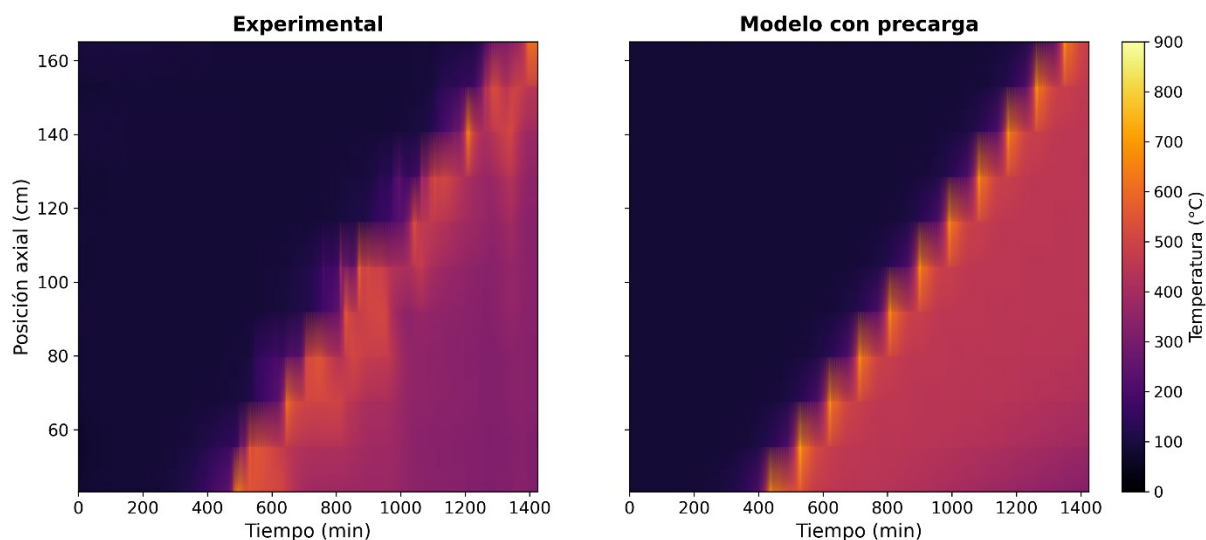
Para comparar los perfiles térmicos, fue necesario sincronizar la primera termocupla del periodo estable y determinar el desplazamiento temporal que la alinea con el perfil experimental. Las demás termocuplas se desplazaron exactamente con ese mismo desfase. Este detalle es esencial, pues garantiza que la sincronización no altera la dinámica del frente en cuanto a su velocidad y que la distancia entre los perfiles de temperatura simulados permanece intacta. Lo anterior, debido a que en el modelo de cinco reacciones una fase inicial de acumulación de combustible durante la ignición retrasa el arranque del frente, como se observa en la Figura 19. En contraste, el modelo con inicialización del coque utiliza la fracción de combustible definida para la zona estable del frente de combustión y no busca representar la fase de ignición. Por lo anterior, la validación se centra en el periodo estable y no en el transitorio inicial. En consecuencia, las curvas simuladas se desplazaron para alinear el pico de la segunda termocupla con el experimental y de esta manera realizar la evaluación correcta en cuanto a la velocidad y la forma del frente una vez establecido, sin sesgos asociados al periodo de ignición.

Los mapas espacio-temporales de temperatura de la Figura 37 representan la evolución del frente a lo largo del tubo para el caso experimental y para el modelo con inicialización del coque. En ambos, el frente de combustión aparece como una banda caliente que avanza de forma sostenida desde la zona de ignición hacia el extremo del tubo, dejando atrás una región caliente y por delante

una región aún fría, en el patrón físico esperado de un proceso autopropagante. El rasgo central es que la pendiente del frente, que corresponde a su velocidad de propagación, es prácticamente la misma en ambas figuras, lo que confirma de forma visual la coincidencia obtenida (7,98 cm/h experimental frente a 7,90 cm/h en simulación).

Figura 37

Evolución espacio-temporal del frente de combustión: comparación experimental y del modelo con inicialización del coque

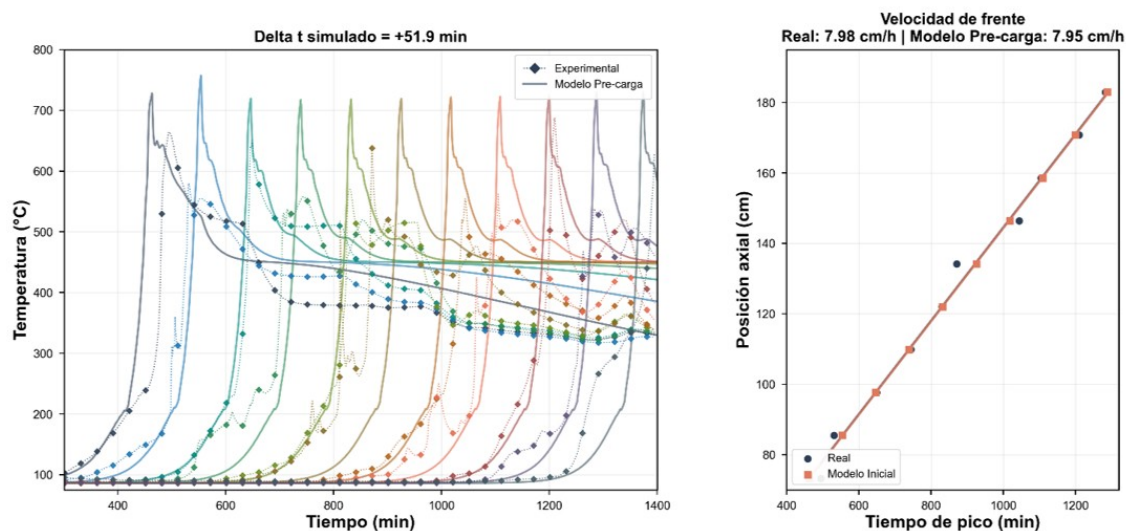


La Figura 38 muestra que el modelo con la estrategia de inicialización del coque inicializado y ajustado con una sola reacción equivalente HTO logra reproducir la propagación axial del frente de combustión con alta precisión. La velocidad simulada fue de 7.95 cm/h, prácticamente igual a la experimental de 7.98 cm/h, con un error relativo de -0.38% . Además, tras aplicar un desfase temporal de $+51.9$ min, los perfiles térmicos simulados presentan una correspondencia aceptable con las termocupas experimentales. Este resultado indica que la

inicialización de combustible equivalente permite conservar la dinámica térmica principal del tubo en el modelo 1D. Sin embargo, el resultado no implica que la cinética simplificada reemplace completamente al esquema detallado, sino que reproduce de forma efectiva la propagación del frente cuando el combustible requerido ya se encuentra inicializado. Por tanto, el modelo de inicialización del coque debe entenderse como una representación equivalente del frente en régimen propagante, no como una reproducción explícita de todas las etapas químicas de formación del combustible.

Figura 38

Validación de la velocidad del frente de combustión: comparación experimental y del modelo con inicialización del coque



7.2.4 Ajuste energético de la reacción equivalente

La comparación energética entre el modelo calibrado presentado en el capítulo 5 y el modelo con inicialización del coque conserva adecuadamente el orden de magnitud del calor de reacción. A nivel global, el Q_{rxn} pasó de 16.80 MJ a 15.80 MJ, con una diferencia relativa de -5.95 %. En la zona estable, el calor de reacción pasó de 11.36 MJ a 10.25 MJ, equivalente a una diferencia de -9.77 %. Estos resultados indican que la inicialización del coque reproduce de manera razonable la energía química asociada al combustible disponible para la propagación del frente. Las diferencias pueden asociarse a que no se presenta la acumulación de coque durante la fase de ignición en el modelo con inicialización del coque que si ocurren en el modelo calibrado y se evidenció en la Figura 19.

Las mayores diferencias se observan en la energía disipada equivalente, especialmente en el balance global, donde el modelo con inicialización del coque presenta una reducción de 39.48 % respecto al modelo convencional. Esta diferencia es esperable, debido a que la estrategia de inicialización del coque no busca representar explícitamente la etapa inicial de formación dinámica del combustible durante la ignición que es donde actuó en mayor medida el sistema térmico definido por las keywords de disipación de calor y acotado como se comentó en el capítulo 5. Por el contrario, al inicializar el combustible equivalente se modifica la historia termoquímica temprana del sistema y se reduce la contribución energética asociada a la deposición progresiva. Por tanto, la validación del modelo con inicialización del coque debe centrarse en el comportamiento durante la zona estable de propagación, donde el calor de reacción y la relación de disipación conservan valores comparables con el modelo calibrado. La comparación detallada se resume en la Tabla 26.

Tabla 26

Comparación del balance energético del modelo calibrado y del modelo con inicialización del coque

Parámetro	Modelo Calibrado Base	Modelo Inicialización del Coque	Descripción
Qrxn global	16.80 MJ	15.8 MJ	Calor de reacción
Qextracción	9.65 MJ	5.84 MJ	Energía disipada
Qcooler/Qrxn global	57.5 %	37 %	Relación disipación/ Q_{rxn} global
Qrxn zona estable	11.36 MJ	10.87 MJ	Calor de reacción en zona estable
Qextracción zona estable	7.70 MJ	6.24 MJ	Energía disipada equivalente en zona estable
Qextracción /Qrxn zona estable	67.8 %	57.4 %	Relación disipación/ Q_{rxn} zona estable
Error balance de energía %	0.508 %	0.122 %	Error de balance de energía global

Nota. Qrxn = calor liberado por las reacciones; Qextracción = energía térmica extraída; Qcooler = extracción térmica efectiva aplicada por el mecanismo de enfriamiento.

7.2.5 Validación composicional y parámetros de desempeño

La Figura 39 compara la composición de los gases efluentes (CO_2 , O_2 y CO) entre tres casos que son los datos experimentales, el modelo con inicialización del coque y el modelo base de cinco reacciones del Capítulo 5. Una vez establecido el frente, los dos modelos describen los mismos niveles estables de las tres especies, con una fracción de CO_2 en torno a 0,15, un CO bajo y un O_2 residual coherente con el consumo de oxígeno en el frente, ambos en buen acuerdo con los puntos experimentales. El aspecto más relevante es que el modelo con inicialización del coque,

pese a resolver la combustión con una única reacción equivalente, reproduce la composición del efluente con una fidelidad comparable a la del esquema completo de cinco reacciones.

El panel derecho confirma este comportamiento mediante la relación CO_2/CO . Tanto el modelo con inicialización del coque como el base se mantienen prácticamente constantes en torno a 4,6, valor alrededor del cual fluctúan los datos experimentales. Dado que esta relación constituyó uno de los parámetros de diseño de la reacción equivalente, su coincidencia tanto con el experimento como con el modelo detallado valida que la calidad de la oxidación se preservó correctamente. Las oscilaciones de alta frecuencia en las curvas simuladas corresponden a la respuesta numérica del frente y no alteran los niveles medios de composición.

Figura 39

Fracción molar de gases efluentes durante la combustión

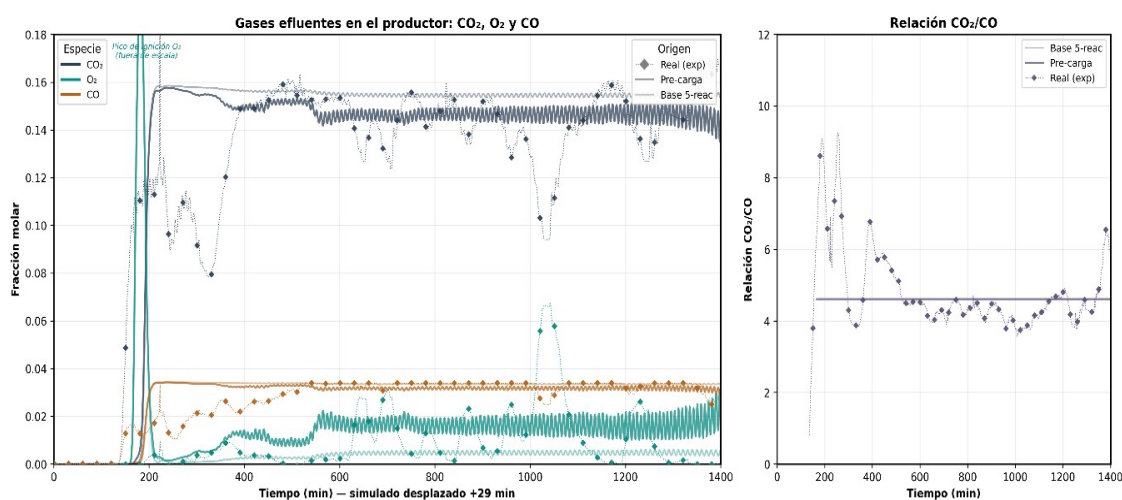
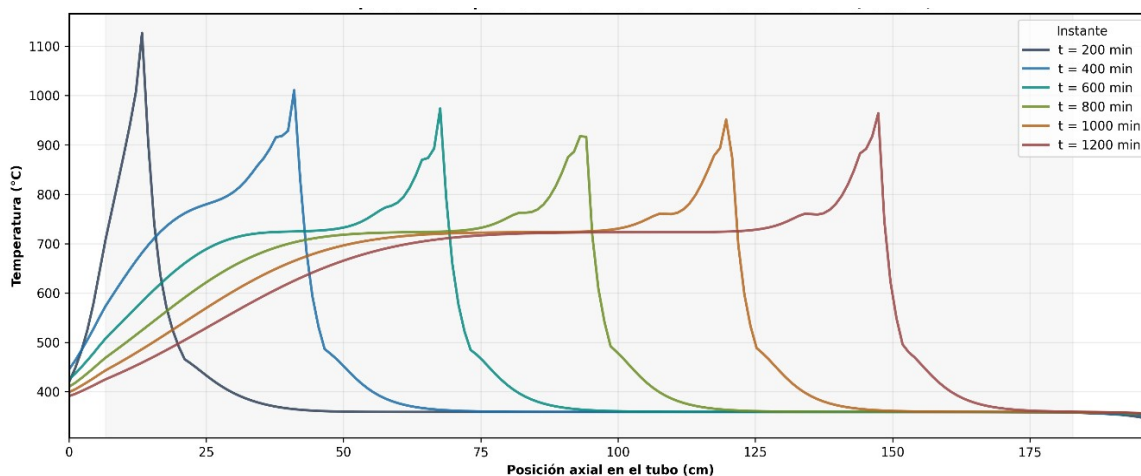


Figura 40

Perfil espacial de temperatura en el modelo con inicialización del coque



El perfil espacial de temperatura de la Figura 40 resume el comportamiento del modelo con inicialización del coque. Las curvas muestran un frente de combustión que avanza ordenadamente por el tubo sin perder su forma: un pico de alta temperatura, entre 950 y 1100 °C, seguido de una meseta cercana a 700 °C correspondiente a la zona ya quemada.

El rasgo principal es la regularidad del avance. La forma y amplitud del pico se conservan en el tiempo, lo que indica un régimen de propagación estacionario: el coque inicializado se consume a ritmo constante y libera energía de manera uniforme. Además, los parámetros de desempeño resultaron cercanos a los experimentales (Tabla 27), lo que confirma que el modelo reproduce tanto la dinámica del frente como las magnitudes globales de la prueba.

Para realizar el análisis correcto respecto a los parámetros de desempeño es necesario tener presente que el periodo estable evaluado en la prueba experimenta y en el modelo calibrado se encuentra desfasados en aproximadamente 51.9 min y los tiempos de evaluación de la zona estable del frente de combustión que se tenían para el modelo calibrado $t_1 = 421$ min y $t_2 = 1276$ min obteniendo los datos que se muestran a continuación:

Tabla 27

Parámetros de desempeño del modelo del tubo de combustión con inicialización del combustible

<i>Parámetro</i>	<i>Unidad</i>	<i>Experimental Afloramiento 1</i>	<i>Numérico (Inicialización coque)</i>	<i>Error relativo (%)</i>
Velocidad del frente de combustión	cm/h	7.98	7.95	-0.38
Requerimiento de aire	m ³ (S)/m ³	405.07	378.01	-6.68
Carbono consumido	kg	0.29	0.281	-3.24
Oxígeno consumido	%	93.46	93.47	+0.01
Hidrógeno consumido	kg	0.02	0.019	-5.80
Agua formada	kg	0.16	0.168	+5.22
Combustible consumido	kg	0.30	0.299	-0.18
Fracción de crudo inicial depositada como coque	fracción	0.08	0.08	0.00
Relación aire/combustible	m ³ (S)/kg	10.99	10.80	-1.71
Requerimiento de combustible	kg/m ³	36.86	35.00	-5.06
Relación H/C	fracción	0.75	0.80	+6.66

Nota. H/C = relación atómica hidrógeno/carbono; m³(S) = metros cúbicos en condiciones estándar.

Los parámetros de desempeño de la Tabla 27 complementan la validación del modelo 1D con inicialización del coque, porque permiten verificar que el buen ajuste de la velocidad del frente no se obtuvo a costa de distorsionar el balance del proceso. La velocidad simulada fue prácticamente igual a la experimental, con 7,95 cm/h frente a 7,98 cm/h, equivalente a un error relativo de apenas -0,38 %. Además, otros indicadores independientes del ajuste térmico también se mantuvieron dentro de rangos cercanos al experimento, como el requerimiento de aire, la

relación aire/combustible y el requerimiento de combustible, con errores de $-6,68\%$, $-1,71\%$ y $-5,06\%$, respectivamente.

Que la fracción de crudo inicial convertida en combustible coincida con el valor experimental de referencia es un resultado importante, pero debe leerse con cautela. Por sí sola, esta coincidencia no constituye una validación independiente, ya que esa misma fracción fue la base para definir la cantidad de coque equivalente inicializado. Aun así, sí muestra que la inicialización se implementó de forma coherente con el criterio de diseño. La validación más sólida es que el modelo reproduce de manera consistente variables que no fueron impuestas directamente, como la velocidad de propagación, el consumo de oxígeno, la relación aire/combustible y la forma general de los perfiles térmicos.

También resulta clave que la relación H/C y la relación CO_2/CO se mantengan dentro de los valores esperados para la reacción equivalente. Esto sugiere que la simplificación cinética conserva la química esencial del combustible durante la propagación, aunque no pretende describir de manera explícita todas las etapas de formación dinámica del coque. En otras palabras, el modelo con inicialización del coque no sustituye el esquema cinético detallado, pero sí logra representar de forma equivalente el comportamiento del frente cuando el combustible requerido ya está disponible.

7.3 Sensibilidad al tamaño de celda en el modelo homogéneo de evaluación

Como se explicó en secciones anteriores, la estrategia de inicialización del coque consiste en inicializar el modelo con una concentración de combustible calculada a partir de la correlación

para (Fc). Así, en lugar de representar de forma explícita la secuencia de reacciones que forman el coque, la cual es altamente sensible a la resolución espacial y a los gradientes térmicos locales, el coque se incorpora como una condición inicial físicamente justificada. Esta decisión se fundamenta en el régimen autopropagante de combustión descrito por Akkutlu y Yortsos (2003), en el cual, una vez establecido el frente, su avance se sostiene por la disponibilidad de combustible en la región inmediatamente aguas abajo del frente térmico. Bajo esta premisa, el modelo cinético puede reducirse a una reacción equivalente HTO, orientada a consumir el coque inicializado y reproducir los efectos globales del proceso de combustión.

La reacción equivalente conserva los elementos principales del balance global del frente como la relación aire/combustible, la relación CO_2/CO , la entalpía de reacción y la energía de activación. Así, se mantiene la consistencia estequiométrica y energética del proceso sin exigir la resolución explícita de las etapas previas de oxidación, craqueo y deposición de combustible. Como resultado, la combustión del coque se vuelve menos dependiente del tamaño de celda y más robusta frente al escalamiento espacial.

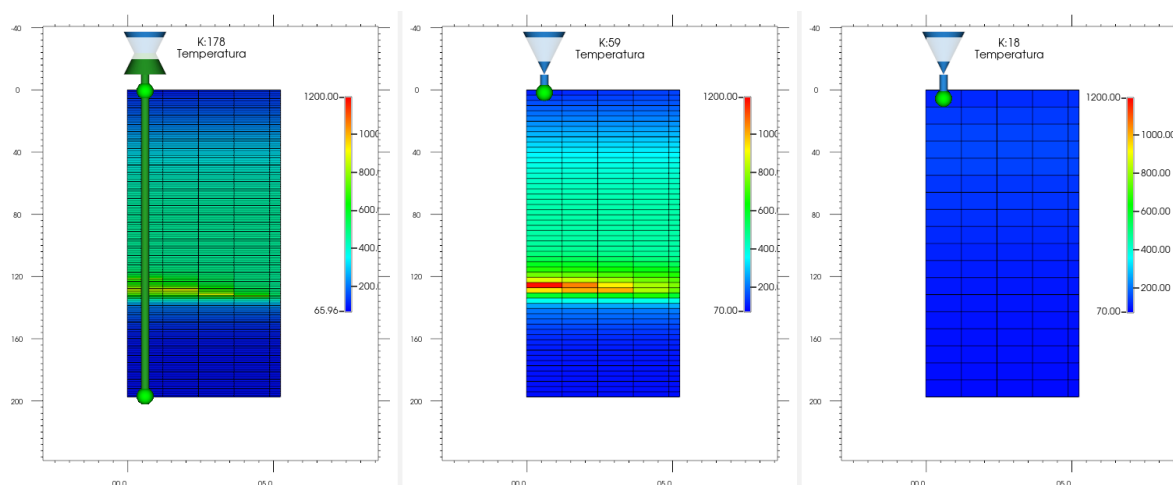
Para evaluar la independencia de malla, se reprodujo el ensayo de tubo de combustión utilizando tres discretizaciones axiales, manteniendo constante la longitud total del modelo, equivalente a 197,26 cm, y la masa total de combustible. Bajo esta misma secuencia de mallas se compararon dos formulaciones: el modelo calibrado de cinco reacciones y el modelo basado en la inicialización del coque con reacción equivalente.

Esta comparación permite aislar el efecto de la estrategia de representación del combustible sobre la estabilidad numérica y física del frente de combustión. En otras palabras, el objetivo no fue únicamente evaluar el efecto del refinamiento espacial, sino determinar si la formulación

propuesta conserva el comportamiento del frente cuando la malla se hace progresivamente más gruesa.

Figura 41

Perfil axial de temperatura en el modelo cinético completo de cinco reacciones



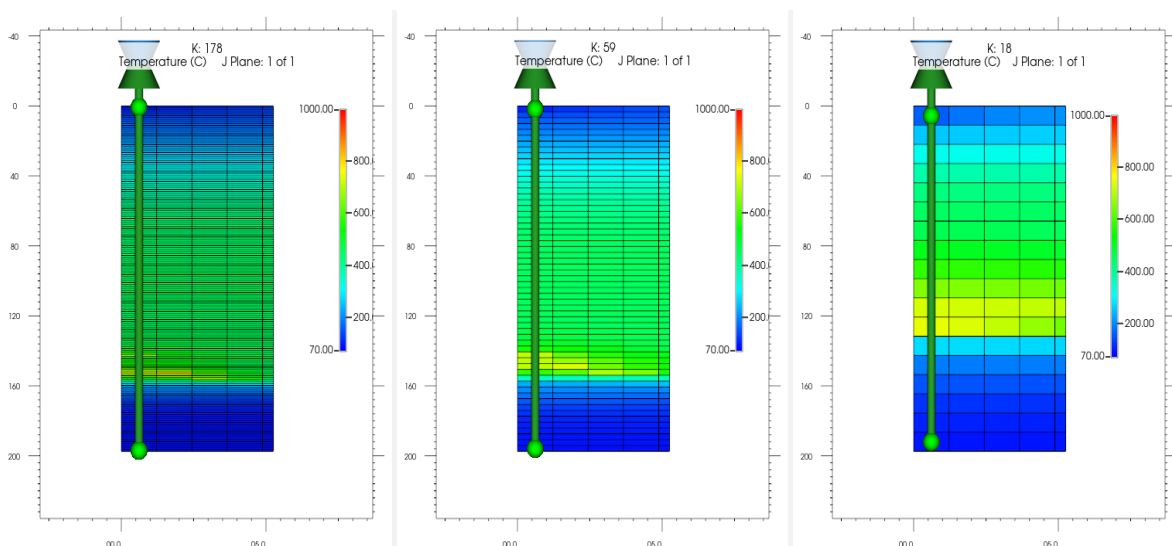
Los perfiles de temperatura de la Figura 41 evidencian un contraste claro entre ambas formulaciones. El modelo calibrado de cinco reacciones presenta una dependencia marcada del tamaño de celda. Aunque el frente se reproduce adecuadamente en la malla fina (K:178), pierde definición en la malla intermedia(K:59) y desaparece en la malla gruesa(K:18). En este último caso, la combustión no logra iniciarse y el tubo de combustión permanece cercano a la temperatura inicial. Este comportamiento sugiere que, en celdas de mayor tamaño, el promedio espacial de los gradientes térmicos y composicionales impide que la formación local de combustible alcance las condiciones necesarias para sostener la ignición.

En contraste, como se muestra en la Figura 42, en el modelo con inicialización del coque, el frente de combustión se mantiene prácticamente sin variaciones para los tres niveles de

discretización evaluados. Su posición, intensidad térmica y forma general se conservan al pasar de 178 a 59 y finalmente a 18 divisiones o celdas en la dirección Z, lo cual indica que la estrategia preserva la representación del fenómeno sin una pérdida apreciable de resolución física.

Figura 42

Perfil espacial de temperatura en el modelo con inicialización del coque



En conjunto, estos resultados muestran que la estrategia de inicialización del coque en los modelos numéricos junto con la reacción ajusta equivalente HTO conserva los rasgos esenciales del régimen propagante en el modelo 1D como la velocidad del frente, el consumo de oxígeno, la relación aire/combustible, el requerimiento de combustible y la respuesta térmica. Visto en conjunto, este comportamiento respalda el uso de la metodología como herramienta de escalamiento para preservar, en modelos de mayor dimensión, la disponibilidad efectiva de combustible y la propagación principal del frente. Su verdadero alcance, sin embargo, deberá

confirmarse en los modelos, donde el tamaño de celda, la geometría del flujo y la heterogeneidad pueden modificar la respuesta del frente.

7.4 Aplicación de la metodología en un modelo con dimensiones de celda a escala de campo

En esta sección se construye un modelo a escala de campo de un cuarto de patrón de cinco pozos invertido, con el fin de evaluar el proceso de combustión in situ a escala de campo bajo la metodología propuesta. Para abordar esta evaluación, se plantearon dos comparaciones, cada una orientada a un propósito distinto. La primera contrasta la estrategia de inicialización del coque frente a un modelo numérico de idénticas características geométricas y propiedades petrofísicas, pero que representa la ruta oxidativa del crudo mediante el esquema cinético de cinco reacciones, esto es, la simulación convencional descrita en el capítulo 5 para la calibración del modelo de tubo de combustión. Este análisis se realizó para dos tamaños de celda, uno fino y uno grueso. El propósito es verificar que la inicialización del coque conserva la estructura y la propagación del frente al aumentar el tamaño de celda, mientras que el esquema cinético convencional, sensible a las dimensiones del grid, subestima o sobrestima el desarrollo y el avance del frente de combustión, lo que conlleva una evaluación deficiente de este mecanismo de recuperación mejorada de petróleo (EOR) desde el punto de vista de la simulación numérica de yacimientos.

La segunda comparación busca confirmar que los resultados obtenidos son físicamente coherentes, una vez establecido que la metodología es poco sensible al tamaño de celda y representa adecuadamente el proceso. Para ello, los parámetros de desempeño del modelo numérico con inicialización de coque se contrastan con los estimados mediante el método de

Nelson y McNeil (1961) para el mismo patrón, un método analítico ampliamente empleado en el diseño de proyectos de combustión in situ. Con esto, la metodología se valida por dos vías independientes, una numérica que aísla el efecto del tamaño de malla y una analítica que confirma la consistencia de los indicadores integrales del proceso, lo que respalda la confiabilidad de la evaluación desde el punto de vista de la simulación numérica de yacimientos.

7.4.1 Comparación entre esquema cinético convencional e inicialización del coque

Las Figuras 43 y 44 presentan la vista areal del avance del frente de combustión, representado por el campo de temperatura, para las mallas fina (60 x 60) y gruesa (30 x 30) en dos instantes de simulación. Se observa que el frente se desarrolla y se sostiene en ambas discretizaciones, pues a partir de la ignición en la vecindad del inyector se establece una región de alta temperatura, característica del régimen de oxidación de alta temperatura (HTO), que avanza progresivamente hacia el interior del patrón.

Figura 43

Avance del frente de combustión en modelo a escala de campo con dimensiones de grid diferentes para un tiempo t_1

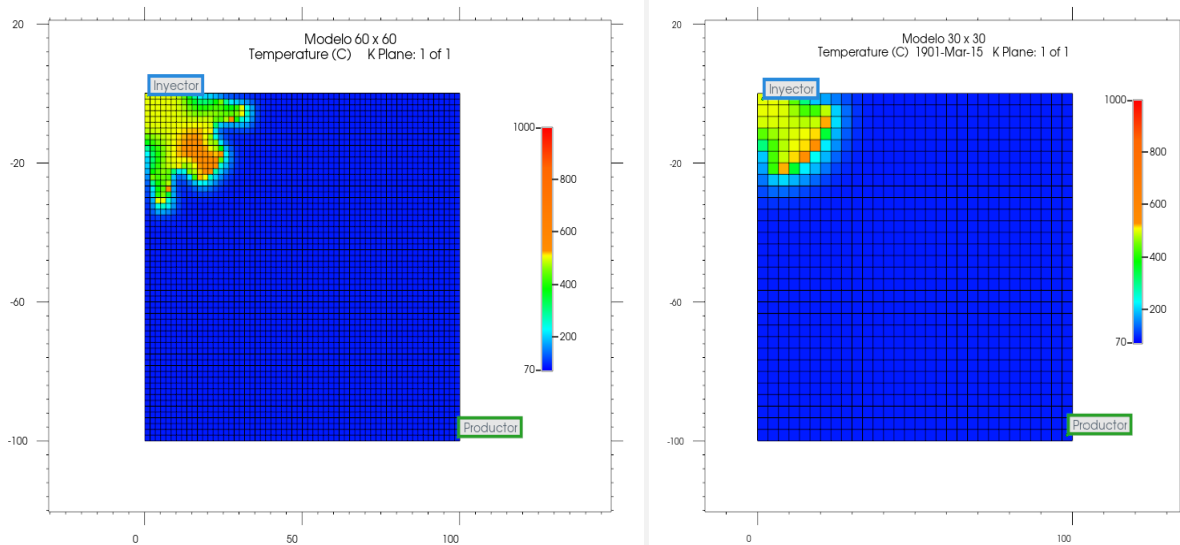
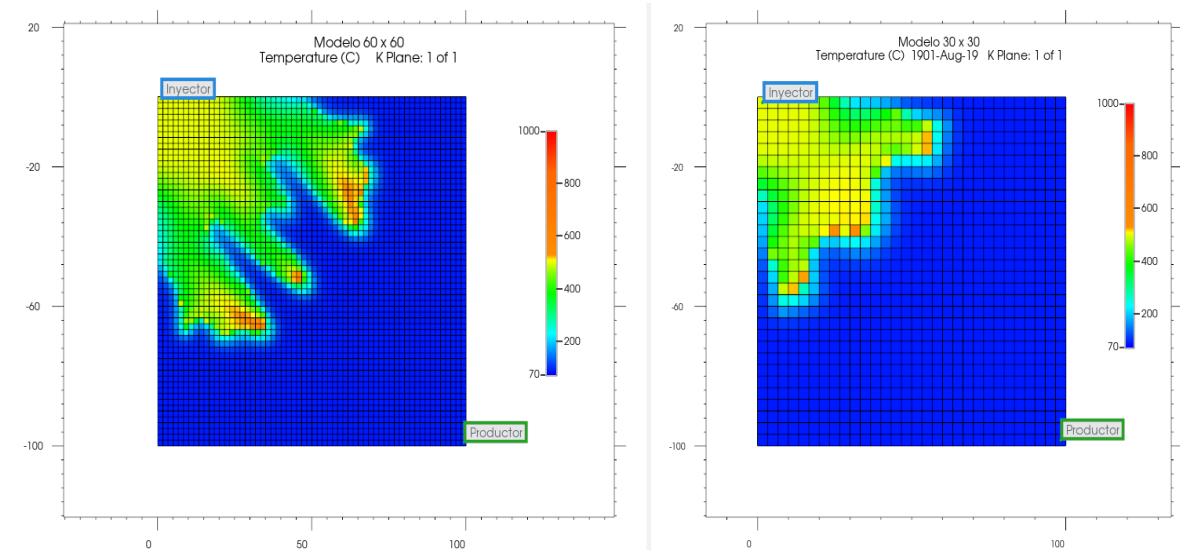


Figura 44

Avance del frente de combustión en modelo a escala de campo con dimensiones de grid diferentes para un tiempo t_2



Al comparar ambas mallas, el frente avanza a velocidades similares y describe una posición comparable para un mismo tiempo, lo que indica que el tamaño de celda no altera de forma apreciable la cinemática del frente bajo la estrategia propuesta. Este comportamiento es coherente con el fundamento del método, pues la cinética empleada es la misma que se calibró y validó en el modelo de tubo de combustión mediante la reacción equivalente de alta temperatura, de modo que el avance del frente se gobierna por el flux de oxígeno y por la concentración de combustible inicializado, y no por una velocidad de reacción dependiente de la malla. En otras palabras, al fijar el combustible mediante la fracción depositada como combustible (F_c) en lugar de generarlo de forma dinámica, la respuesta del frente deja de heredar la sensibilidad al tamaño de celda propia del esquema completo, lo que sostiene la independencia de malla buscada desde el punto de vista de la simulación numérica de yacimientos.

7.4.2 Sensibilidad al tamaño de celda

Las características geométricas y de discretización de ambos modelos se resumen en la Tabla 28, donde se evidencia que las dos mallas representan el mismo cuarto de patrón, con idéntica área, espesor, petrofísica y esquema de combustión, y difieren únicamente en el tamaño de celda.

Tabla 28

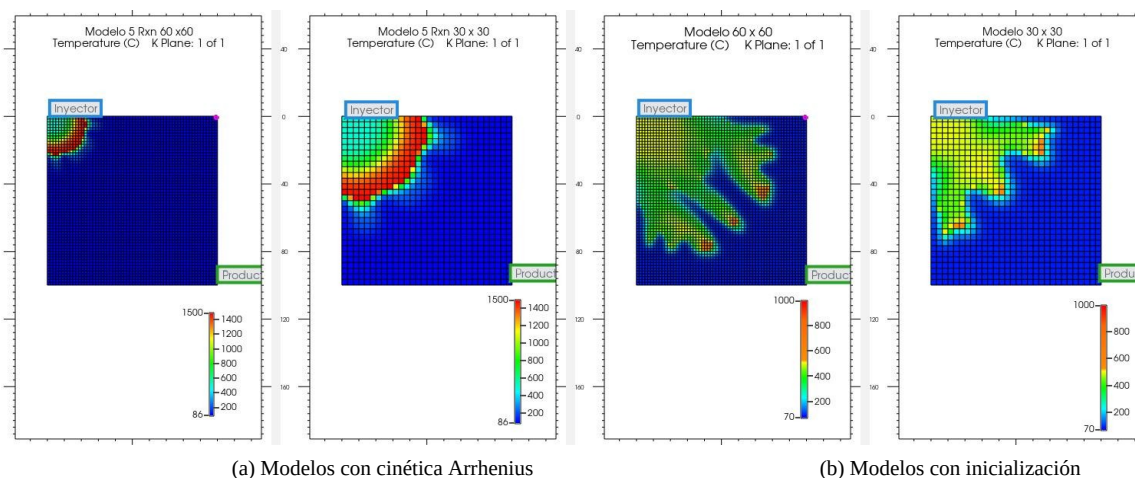
Configuración geométrica, petrofísica y de discretización de los modelos a escala de campo con malla fina y gruesa

Parámetro	Malla fina	Malla gruesa
Número de celdas	60 × 60	30 × 30
Tamaño de celda	≈1,67 m × 1,67 m	≈3,33 m × 3,33 m
Área del ¼ de patrón	2,47 acres (≈100 m × 100 m)	2,47 acres (≈100 m × 100 m)
Espesor neto	10,97 m (36 ft)	10,97 m (36 ft)
Patrón	¼ de cinco pozos invertido	¼ de cinco pozos invertido
Esquema de combustión	Reacción equivalente HTO (inicialización del coque)	Reacción equivalente HTO (inicialización del coque)
Cinética	Calibrada en tubo de combustión	Calibrada en tubo de combustión
Porosidad / S _{oi}	[φ = 0,41 / S _{oi} = 0,7141]	[φ = 0,41 / S _{oi} = 0,7141]

No obstante, el campo de temperatura evidencia que el frente no avanza como una superficie radial uniforme, sino con digitación, es decir, la región caliente se adelanta en lóbulos irregulares. Este comportamiento responde tanto a una inestabilidad física del desplazamiento, propia de la combustión in situ de crudos pesados, como a idealizaciones del modelo, en particular la ignición cercana al inyector, la homogeneidad del medio y la malla cartesiana, que favorece el avance a lo largo de los ejes de la cuadrícula. Reconocer este comportamiento permite delimitar el alcance del trabajo.

Figura 45

Comparación del avance del frente de combustión, representado por el campo de temperatura, en los modelos con cinética de cinco reacciones (a) y con inicialización del coque (b), para mallas de 60×60 y 30×30 celdas en el modelo a escala de campo



La Figura 45 compara el avance del frente, representado por el campo de temperatura, entre los modelos con el esquema de cinco reacciones y los modelos con inicialización del coque, para las mallas de 60×60 y 30×30 celdas. En los modelos con el esquema de cinco reacciones, el frente cambia de forma apreciable con el tamaño de celda, pues la malla fina de 60×60 desarrolla una región caliente reducida y localizada en la vecindad del inyector, mientras que la malla con celdas de mayor tamaño de 30×30 muestra un frente de mayor extensión areal. Esta diferencia no constituye una contradicción del refinamiento espacial, sino la manifestación directa de la dependencia de malla que caracteriza a la cinética convencional.

Más allá de la extensión del frente, la temperatura alcanzada constituye un criterio relevante de validación. En los modelos con el esquema de cinco reacciones, el frente alcanza temperaturas cercanas a los $1400\text{ }^{\circ}\text{C}$, valor muy superior al registrado en la prueba experimental de tubo de combustión, lo que evidencia que la cinética convencional sobrestima la energía

liberada en la zona de combustión. En cambio, los modelos con inicialización del coque desarrollan una temperatura promedio de la frente cercana a la experimental, lo que indica que la reacción equivalente reproduce no solo la capacidad de sostener el frente, sino también el nivel térmico real del proceso, en coherencia con el comportamiento físico y químico observado en el laboratorio.

Con la verificación de que la inicialización del coque conserva la forma del frente entre mallas y reproduce el nivel térmico real del proceso, se procede a evaluar si los indicadores de desempeño del modelo son coherentes con los esperados para un proyecto a escala de campo. Para ello, los parámetros obtenidos del modelo numérico se comparan con los estimados mediante el método de Nelson y McNeil para el mismo patrón, según se resume en la Tabla 29. Esta comparación permite contrastar el desempeño del modelo con una referencia analítica reconocida en el diseño de proyectos de combustión in situ, y examinar hasta qué punto la metodología propuesta reproduce el comportamiento integral del proceso.

7.4.3 Comparación con el método de Nelson y McNeil

Tabla 29

Comparación de indicadores entre Nelson y McNeil y el caso CMG ajustado

<i>Indicador comparable</i>	<i>Nelson y McNeil</i>	<i>Modelo Numérico (Iniciación del coque)</i>	<i>Error relativo (%)</i>
Tiempo total del proyecto	927.6 días	928 días	N.A
Tasa máxima de aire	1.386 MMscf/d	~1.11 MMscf/d	N.A
Aire total inyectado	956.8 MMscf	~1,030 MMscf	+7.6%
Aceite acumulado	49,453 bbl	~54,200 bbl	+9.6%
Factor de recobro	49.94%	~54.7%	+9.5%
AOR (Relación aire inyectado/aceite producido)	24.02 Mscf/bbl	~19.0 Mscf/bbl	-20.9%
Requerimiento de combustible	37.95 kg/m ³	37.70 kg/m ³	N.A
Aire/Fuel basado en O ₂ reaccionado	10.16 m ³ /kg	~9.9 m ³ /kg	N.A
Relación CO ₂ /CO	~4.5–4.6	~4.61	N.A

Nota. AOR = relación aire/aceite; MMscf/d = millones de pies cúbicos estándar por día; MMscf = millones de pies cúbicos estándar; Mscf/bbl = miles de pies cúbicos estándar por barril.

El propósito de esta comparación es contrastar el desempeño del modelo numérico con el estimado mediante el método de Nelson y McNeil (1961), una metodología ingenieril que emplea los datos de la prueba de tubo de combustión como base para estimar los factores de diseño de un proyecto de combustión in situ a escala de campo, entre ellos el requerimiento de aire, el combustible consumido, la recuperación total de aceite y el programa de inyección (Fassihi, 1981; Navarro García, 2017). Conviene precisar desde el inicio el alcance de esta validación, pues tanto el método analítico como el modelo numérico parten de la misma caracterización experimental del sistema roca-fluido, de modo que la concordancia en los indicadores ligados directamente a esa caracterización debe interpretarse como una verificación de consistencia, mientras que el valor de

verificación de consistencia recae sobre los indicadores que cada enfoque obtiene por una vía de cálculo distinta.

Bajo esta distinción, el requerimiento de combustible, que en el método de Nelson y McNeil alcanza $37,95 \text{ kg/m}^3$ y en el caso numérico $37,70 \text{ kg/m}^3$, con un error de $0,67\%$, constituye una verificación de consistencia más que una predicción independiente. Su relevancia no es menor por ello, pues el combustible del modelo no se generó de forma dinámica, sino que se impuso como condición inicial mediante la fracción depositada combustible (F_c), de manera que esta coincidencia confirma que la correlación reproduce la carga de combustible característica del sistema de laboratorio y que la inicialización del coque queda correctamente planteada. Adicionalmente, la relación aire-combustible difiere en $2,6\%$ y la relación CO_2/CO en 1% , lo que evidencia que la reacción equivalente conserva la estequiometría calibrada en el laboratorio, esto es, el consumo de oxígeno y la relación hidrógeno-carbono del proceso que se corroboraron secuencialmente en cada etapa de la metodología desde la validación del modelo de tubo de combustión con los datos experimentales hasta el modelo con dimensiones a escala de campo.

Los resultados con mayor peso como validación se encuentran en los indicadores integrales que ambos enfoques obtienen por caminos distintos. El método de Nelson y McNeil estima el recobro a partir de la eficiencia de barrido areal y vertical del patrón, esto es, por una vía geométrica que pondera el volumen barrido (Mikkelsen y Ramey, 1990; Williams et al., 1980), mientras que el modelo numérico lo obtiene resolviendo el desplazamiento multifásico no isotérmico en la malla, sin imponer dicha eficiencia. Que el factor de recobro numérico de $54,7\%$ se sitúe en torno al valor analítico de $49,94\%$, y que el aceite acumulado y el aire inyectado presenten diferencias del mismo orden, con un error relativo inferior al 10% , indica que el barrido calculado por el modelo numérico a partir de la física del flujo se aproxima al supuesto por el

método analítico. Diferencias de esta magnitud son coherentes con las reportadas en validaciones previas del método frente a simulación numérica, como la documentada por Navarro García (2017), donde el factor de recobro analítico de 51,74% se contrasta con un valor numérico de 47%, lo que respalda la coherencia volumétrica del proceso por una vía que no comparte el mecanismo de cálculo con la referencia.

El único indicador que se aparta del comportamiento general es la relación aire-aceite (AOR), con un error de 20,9% que refleja una eficiencia aparente mayor en el modelo numérico. Esta diferencia no constituye una inconsistencia, sino una consecuencia del carácter idealizado del modelo numérico. El medio es homogéneo y no incluye pérdidas por canalización del gas ni por heterogeneidad, de modo que el aire inyectado se aprovecha de forma más completa que la supuesta por el método analítico, que sí considera las ineficiencias propias de un proyecto de campo. En otras palabras, el modelo no sobrestima su desempeño de manera artificial, sino que entrega la eficiencia esperable de un sistema sin las pérdidas que no se buscó representar, lo que mantiene la interpretación del resultado dentro del alcance del trabajo.

Más allá de la concordancia numérica, la implicación de fondo de esta comparación radica en que llegar a realizarla constituye en sí mismo un resultado. El esquema convencional de cinco reacciones, según se evidenció en el análisis anterior, no logra sostener el frente bajo la discretización de un grid de mayor tamaño propio de un patrón de dimensiones reales, por lo que no permite obtener un conjunto de indicadores de desempeño comparable con el método de Nelson y McNeil a escala de campo. La inicialización del coque, en cambio, produce un modelo de dimensiones a escala de campo estable, cuyos indicadores integrales resultan consistentes con la referencia analítica, de modo que el aporte no consiste únicamente en reproducir los valores de Nelson y McNeil, sino en hacer viable una evaluación de campo que el enfoque convencional no

puede entregar para el caso de estudio, conservando al mismo tiempo la coherencia con la caracterización experimental que sustenta ambos métodos.

En conjunto, los resultados de este capítulo articulan una cadena de validación anclada en datos experimentales en sus dos extremos: en la escala de laboratorio, el modelo se calibró contra el ensayo de tubo de combustión del sistema roca-fluido de estudio, reproduciendo su velocidad de frente, requerimiento de aire y relación atómica H/C; en la escala de campo, el desempeño se contrastó contra el método analítico de Nelson y McNeil. Entre ambos extremos, la estrategia de inicialización del coque con la reacción equivalente demostró ser independiente de la malla, resolviendo el principal obstáculo para transferir el modelo cinético desde el laboratorio hacia dimensiones de campo. La metodología propuesta no elimina los fenómenos hidrodinámicos y de heterogeneidad propios de la escala de campo, que permanecen como objeto de investigación futura, pero sí provee la base cinética robusta y físicamente fundamentada sobre la cual esos estudios pueden construirse.

8. Conclusiones

- La investigación demostró que la inicialización celda a celda del coque constituye una estrategia efectiva para reducir la dependencia numérica asociada al tamaño de celda en simulaciones de combustión in situ. Al representar explícitamente la disponibilidad local de combustible, el frente de combustión pudo sostenerse en el modelo con celdas de dimensiones de campo con una estabilidad que el esquema cinético convencional de cinco reacciones no logró reproducir con la misma consistencia para el caso evaluado. Este resultado confirma la hipótesis de investigación dentro del dominio de variables analizado.
- El modelo numérico de tubo de combustión calibrado con los datos experimentales permitió construir una base física y computacional confiable para el desarrollo posterior de la metodología. La incorporación de una reacción adicional de oxidación temprana a baja temperatura y el ajuste energético mediante una disipación térmica efectiva corrigieron las principales limitaciones del modelo base, asociadas a la sobreestimación térmica y a la representación incompleta de la activación inicial del crudo. Con esto, el modelo reprodujo la propagación del frente, la respuesta térmica, el consumo de oxígeno, la composición de los gases efluentes y los parámetros de desempeño del proceso.
- La correlación empírico-numérica de la fracción de combustible depositada como coque en la zona estable (F_c) representa una contribución propia de esta investigación, al expresar la fracción de aceite inicial convertida en combustible como función de variables petrofísicas y operacionales. Su importancia no radica únicamente en el ajuste estadístico obtenido, sino en que convierte el combustible depositado en una variable local, programable y transferible hacia modelos de

simulación. De esta manera, la correlación funciona como un puente entre la caracterización experimental del tubo de combustión y la evaluación numérica del proceso en condiciones de campo.

- La prueba de concepto en el modelo de tubo de combustión confirmó que la formación dinámica del combustible puede sustituirse, para el análisis del régimen propagante, por una condición inicial de coque equivalente consumida mediante una reacción de alta temperatura. Esta simplificación no reemplaza toda la complejidad química del esquema cinético detallado, pero sí reproduce los rasgos dominantes del frente una vez establecido, incluyendo su velocidad de propagación, el perfil térmico, la relación CO_2/CO , la relación H/C y la coherencia general de los gases efluentes.
- El análisis de sensibilidad al tamaño de celda evidenció el mecanismo que diferencia la estrategia propuesta del esquema convencional. En el modelo cinético de cinco reacciones, el aumento del tamaño de celda afecta la formación dinámica del combustible, modifica la temperatura efectiva de reacción y distorsiona la propagación del frente. En contraste, la inicialización del coque conserva la disponibilidad de combustible antes de la activación de la reacción equivalente, lo que permite mantener la forma, extensión y continuidad del frente al modificar la discretización espacial.
- La evaluación en el modelo discretizado a escala de campo mostró que la inicialización del coque condujo a una respuesta térmica, espacial y volumétrica más representativa que la del esquema cinético convencional. El frente se sostuvo, conservó una geometría comparable entre tamaños de celda y desarrolló niveles térmicos más cercanos a los observados experimentalmente. Además, los indicadores integrales resultaron consistentes con los estimados mediante el método de Nelson y McNeil. La concordancia en requerimiento de combustible, relación aire-combustible y relación

CO₂/CO debe entenderse como una verificación cruzada, mientras que el aceite producido y el factor de recobro aportan mayor valor comparativo al obtenerse por vías de cálculo distintas.

- El alcance de la metodología queda delimitado por el sistema roca-fluido, los rangos petrofísicos y las condiciones operacionales empleados para construir la correlación. No debe interpretarse como una formulación universal para cualquier proceso de combustión in situ, ni como una sustitución completa de la física de campo. Fenómenos como la canalización de gas, la segregación gravitacional, la variabilidad petrofísica, las pérdidas térmicas a gran escala y la operación dinámica de pozos requieren estudios posteriores. Sin embargo, aporta una base cinética y energética más estable para representar el combustible disponible y mejorar la transferencia entre el laboratorio y el campo.

9. Recomendaciones

1. Se recomienda aplicar la metodología propuesta a crudos pesados con diferente composición, contenido de asfaltenos y resinas, propiedades petrofísicas y condiciones iniciales de saturación. Esto permitiría establecer si la forma funcional de la correlación se conserva o si debe recalibrarse para cada sistema roca-fluido.
2. Se recomienda evaluar la inicialización del coque en modelos con variaciones espaciales de permeabilidad, porosidad, saturación inicial de aceite y propiedades térmicas de la roca. Esto permitiría analizar el comportamiento del frente en condiciones más cercanas a un yacimiento real, donde la canalización de gas, la anisotropía y los contrastes de propiedades pueden modificar la eficiencia de barrido, como se ha evidenciado en estudios experimentales y numéricos de combustión in situ en medios fracturados (Fadaei et al., 2011).
3. Futuros estudios deberían aplicar la estrategia en geometrías de flujo distintas al patrón evaluado, incluyendo separaciones variables entre pozos, arreglos irregulares, condiciones de frontera diferentes y esquemas de inyección alternativos, incluida la inyección de aire de talón a punta (Greaves et al., 2012). Esto permitiría determinar la robustez de la metodología frente a configuraciones operacionales más diversas.
4. Se recomienda contrastar la metodología propuesta con enfoques basados en modificación del factor pre-exponencial, ajuste de energía de activación, modelos sub-grid o criterios de activación térmica. Esta comparación permitiría identificar en qué condiciones la inicialización del coque ofrece ventajas frente a estrategias puramente cinéticas.
5. Aunque esta investigación utilizó información experimental disponible, futuros trabajos deberían incorporar pruebas de tubo diseñadas específicamente para evaluar la correlación bajo

variaciones controladas de flux de aire, permeabilidad, porosidad y saturación inicial de aceite.

Esto fortalecería la validación experimental de la metodología.

6. Una vez verificada en modelos con mayor complejidad geológica y operacional, la estrategia podría integrarse con herramientas de optimización para evaluar tasas de inyección de aire, tamaño de patrón, ubicación de pozos, criterios de ignición y estrategias de control del frente. Esto permitiría avanzar desde la evaluación numérica del proceso hacia su uso en análisis de diseño y toma de decisiones.

Referencias Bibliográficas

- Adegbesan, K. O., Donnelly, J. K., Moore, R. G., y Bennion, D. W. (1987). Low-temperature-oxidation kinetic parameters for in-situ combustion: Numerical simulation. *SPE Reservoir Engineering*, 2(4), 573–582. <https://doi.org/10.2118/12004-PA>
- Akkutlu, I. Y., y Yortsos, Y. C. (2003). The dynamics of in-situ combustion fronts in porous media. *Combustion and Flame*, 134(3), 229–247. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(03\)00095-6](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(03)00095-6)
- Alexander, J. D., Martin, W. L., y Dew, J. N. (1962). Factors affecting fuel availability and composition during in situ combustion. *Journal of Petroleum Technology*, 14(10), 1154–1164. <https://doi.org/10.2118/296-PA>
- Ambalae, A., Mahinpey, N., y Freitag, N. (2006). Thermogravimetric studies on pyrolysis and combustion behavior of a heavy oil and its asphaltenes. *Energy & Fuels*, 20(2), 560–565.
- Antolinez, J. D., Miri, R., y Nouri, A. (2023). In situ combustion: A comprehensive review of the current state of knowledge. *Energies*, 16(17), 6306. <https://doi.org/10.3390/en16176306>
- Belgrave, J. D. M., Moore, R. G., Ursenbach, M. G., y Bennion, D. W. (1993). A comprehensive approach to in-situ combustion modeling. *SPE Advanced Technology Series*, 1(1), 98–107. <https://doi.org/10.2118/20250-PA>
- Burger, J. G., y Sahuquet, B. C. (1972). Chemical aspects of in-situ combustion: Heat of combustion and kinetics. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 12(5), 410–422. <https://doi.org/10.2118/3599-PA>

Chen, B. (2012). *Investigation of in-situ combustion kinetics using the isoconversional principle* [Tesis doctoral, Stanford University]. Stanford Digital Repository.

<http://purl.stanford.edu/mf038wz2108>

Christensen, J. R., Darche, G., Déchelette, B., Ma, H., y Sammon, P. H. (2004). Applications of dynamic gridding to thermal simulations (SPE-86969-MS). *SPE International Thermal Operations and Heavy Oil Symposium and Western Regional Meeting*.

<https://doi.org/10.2118/86969-MS>

Cinar, M. (2011). *Kinetics of crude-oil combustion in porous media interpreted using isoconversional methods* [Tesis doctoral, Stanford University].

Cinar, M., Hascakir, B., Castanier, L. M., y Kovscek, A. R. (2011). Predictability of crude oil in-situ combustion by the isoconversional kinetic approach. *SPE Journal*, 16(3), 537–547.

Coats, K. H. (1983). *Some observations on field-scale simulation of the in-situ combustion process* (SPE-12247-MS). Society of Petroleum Engineers.

<https://doi.org/10.2118/12247-MS>

Crookston, R. B., Culham, W. E., y Chen, W. H. (1979). A numerical simulation model for thermal recovery processes. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 19(1), 37–58.

<https://doi.org/10.2118/6724-PA>

Dabbous, M. K., y Fulton, P. F. (1974). Low-temperature-oxidation reaction kinetics and effects on the in-situ combustion process. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 14(3), 253–262.

Dechelette, B., Heugas, O., Quenault, G., Bothua, J., y Christensen, J. R. (2006). Air injection: Improved determination of the reaction scheme with ramped temperature experiment and

- numerical simulation. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 45(1), 41–47.
<https://doi.org/10.2118/06-01-03>
- Eguono, A. (2010). *Numerical simulation of chemical reaction of in situ combustion using SARA fraction* [Tesis de maestría, Delft University of Technology].
- Eriksson, L., Byrne, T., Johansson, E., Trygg, J., y Vikström, C. (2013). *Multi- and megavariable data analysis: Basic principles and applications* (3.^a ed. rev.). Umetrics Academy.
- Fadaei, H., Castanier, L., Kamp, A. M. M., Debenest, G., Quintard, M., y Renard, G. (2011). Experimental and numerical analysis of in-situ combustion in a fractured core. *SPE Journal*, 16(2), 358–373.
- Fassihi, M. R. (1981). *Analysis of fuel oxidation in in-situ combustion oil recovery* [Tesis doctoral, Stanford University].
- Fassihi, M. R., Brigham, W. E., y Ramey, H. J., Jr. (1984). Reaction kinetics of in-situ combustion: Part 1 – Observations. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 24(4), 399–407. <https://doi.org/10.2118/8907-PA>
- Freitag, N. P., y Exelby, D. R. (2006). A SARA-based model for simulating the pyrolysis reactions that occur in high-temperature EOR processes. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 45(3), 38–44. <https://doi.org/10.2118/06-03-02>
- Gates, C. F., y Ramey, H. J., Jr. (1980). A method for engineering in-situ combustion oil recovery projects. *Journal of Petroleum Technology*, 32(2), 285–294. <https://doi.org/10.2118/7149-PA>
- Glatz, G. (2012). *Towards field scale in-situ combustion simulation* [Tesis de maestría, Stanford University]. Stanford Digital Repository. <https://purl.stanford.edu/xr031jq5952>

- Grabowski, J. W., Vinsome, P. K., Lin, R. C., Behie, A., y Rubin, B. (1979). *A fully implicit general purpose finite-difference thermal model for in situ combustion and steam* (SPE-8396). 54th SPE Annual Fall Technical Conference and Exhibition, Las Vegas.
- Greaves, M., Dong, L. L., y Rigby, S. P. (2012). Simulation study of the toe-to-heel air injection three-dimensional combustion cell experiment and effects in the mobile oil zone. *Energy & Fuels*, 26(3), 1656–1669.
- Gutiérrez, D., Moore, R. G., Ursenbach, M. G., y Mehta, S. A. (2012). The ABCs of in-situ combustion simulations: From laboratory experiments to the field scale. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 51(4), 256–267.
- Harrell, F. E., Jr. (2015). *Regression modeling strategies: With applications to linear models, logistic and ordinal regression, and survival analysis* (2.^a ed.). Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-3-319-19425-7>
- Hascakir, B., Ross, C. M., Castanier, L. M., y Kovscek, A. R. (2013). Fuel formation and conversion during in-situ combustion of crude oil. *SPE Journal*, 18(6), 1217–1228.
- Hayashitani, M., Bennion, D. W., Donnelly, J. K., y Moore, R. G. (1978). Thermal cracking models for Athabasca oil sands oil (SPE-7549-MS). 53rd Annual Fall Technical Conference and Exhibition of the Society of Petroleum Engineers of AIME.
<https://doi.org/10.2118/7549-MS>
- Hwang, M. K., Jines, W. R., y Odeh, A. S. (1982). An in-situ combustion process simulator with a moving-front representation. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 22(2), 271–279.
<https://doi.org/10.2118/9450-PA>
- Khansari, Z. (2014). *Low temperature oxidation of heavy crude oil: Experimental study and reaction modeling* [Tesis doctoral, University of Calgary].

- Kovscek, A. R., Castanier, L. M., y Gerritsen, M. G. (2013). Improved predictability of in-situ-combustion enhanced oil recovery. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 16(2), 172–182. <https://doi.org/10.2118/165577-PA>
- Le Thiez, P. A., y Lemonnier, P. A. (1990). An in-situ combustion reservoir simulator with a new representation of chemical reactions. *SPE Reservoir Engineering*, 5(3), 285–294. <https://doi.org/10.2118/17416-PA>
- Lin, L. C., Deo, M. D., Hanson, F. V., y Oblad, A. G. (1991). Nonisothermal analysis of the kinetics of the combustion of coked sand. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 30(8), 1795–1801.
- Lu, C., y Yortsos, Y. C. (2001). *A pore-network model of in-situ combustion in porous media* [Informe]. University of Southern California / U.S. Department of Energy.
- Mamora, D. D. (1993). *Kinetics of in-situ combustion* [Tesis doctoral, Stanford University].
- Marjerrison, D. M., y Fassihi, M. R. (1992). *A procedure for scaling heavy-oil combustion tube results to a field model* (SPE-24175-MS). SPE/DOE Enhanced Oil Recovery Symposium, Tulsa. <https://doi.org/10.2118/24175-MS>
- Mendez-Kuppe, G. J., Mehta, S. A., Moore, R. G., Ursenbach, M. G., y Zalewski, E. (2008). Heats of combustion of selected crude oils and their SARA fractions. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 47(1), 38–42.
- Mercado Sierra, D., y Trevisan, O. V. (2014). *Numerical simulation of a dry combustion tube test for a Brazilian heavy oil* (SPE-169335-MS). Latin American and Caribbean Petroleum Engineering Conference.

- Mikkelsen, P. L., y Ramey, H. J., Jr. (1990). *A method for computing the vertical coverage for an in-situ combustion process* (SPE-20726-MS). 65th SPE Annual Technical Conference and Exhibition.
- Millour, J. P., Moore, R. G., Bennion, D. W., Ursenbach, M. G., y Gie, D. N. (1987). An expanded compositional model for low temperature oxidation of Athabasca bitumen. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 26(3), 24–32.
- Moore, R. G., Laureshen, C. J., Mehta, S. A., y Ursenbach, M. G. (1999). Observations and design considerations for in situ combustion projects. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 38(13), 1–9.
- Navarro García, W. (2017). *Perfiles de inyección de aire para mantener un frente de combustión estable en régimen HTO a escala conceptual para crudos pesados* [Tesis de maestría, Universidad Industrial de Santander].
- Nelson, T. W., y McNeil, J. S. (1961). How to engineer an in-situ combustion project. *Oil and Gas Journal*, 59(23), 58–65.
- Nissen, A., Zhu, Z., Kovysek, A. R., Castanier, L. M., y Gerritsen, M. G. (2015). Upscaling kinetics for field-scale in-situ-combustion simulation. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 18(2), 158–170. <https://doi.org/10.2118/174093-PA>
- Padilla Reyes, J. M. (2016). *Desarrollo de un modelo cinético a partir de análisis isoconversional para describir un proceso de combustión in situ* [Tesis de maestría, Universidad Industrial de Santander].
- Penberthy, W. L., Jr., y Ramey, H. J., Jr. (1966). Design and operation of laboratory combustion tubes. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 6(2), 183–198.
<https://doi.org/10.2118/1290-PA>

- Pinzón, A. R., Padilla, J. M., Pabón, Y. H., y Muñoz, S. F. (2017). *Alternativa simplificada para modelar la cinética de un proceso de combustión in situ*. Congreso Colombiano del Petróleo – ACIPET, Bogotá.
- Pinzón Díaz, A. R. (2018). *Efecto del flux de aire y las propiedades del medio poroso sobre la cantidad de combustible depositado en un proceso de combustión in situ* [Tesis de maestría, Universidad Industrial de Santander].
- Ranjbar, M. (1993). Influence of reservoir rock composition on crude oil pyrolysis and combustion. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 27, 87–95.
- Ren, Y., Freitag, N. P., y Mahinpey, N. (2007). A simple kinetic model for coke combustion during an in situ combustion (ISC) process. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 46(4), 47–53. <https://doi.org/10.2118/07-04-05>
- Ruiz, J., Naccache, P., Priestley, A., Glatz, G., y Crecana, V. (2013). Modeling in-situ combustion in a heavy oil field in Romania (SPE-165490-MS). *SPE Heavy Oil Conference Canada*. <https://doi.org/10.2118/165490-MS>
- Sadeghi, M., Abedi, J., y Pooladi-Darvish, M. (2007). *Upscaling of kinetic parameters for simulation of reactive in situ bitumen recovery* (PETSOC-2007-056-EA). Canadian International Petroleum Conference, Calgary. <https://doi.org/10.2118/2007-056-EA>
- Sarathi, P. S. (1999). *In situ combustion handbook: Principles and practices* (Reporte DOE/PC91008-0374). U.S. Department of Energy.
- Showalter, W. E. (1963). Combustion-drive tests. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 3(1), 53–58. <https://doi.org/10.2118/456-PA>

- Taber, J. J., Martin, F. D., y Seright, R. S. (1997). EOR screening criteria revisited — Part 1: Introduction to screening criteria and enhanced recovery field projects. *SPE Reservoir Engineering*, 12(3), 189–198. <https://doi.org/10.2118/35385-PA>
- Vossoughi, S., y El-Shoubary, Y. (1989). Kinetics of crude-oil coke combustion. *SPE Reservoir Engineering*, 4(2), 201–206. <https://doi.org/10.2118/16268-PA>
- Williams, R. L., Ramey, H. J., Jr., Brown, S. C., Sanyal, S. K., y Raghavan, R. (1980). An engineering economic model for thermal recovery methods (SPE-8906-MS). *50th Annual California Regional Meeting of the Society of Petroleum Engineers of AIME*.
- Wilson, L. A., Wygal, R. J., Reed, D. W., Gergins, R. L., y Henderson, J. H. (1958). Fluid dynamics during an underground combustion process. *Transactions of the AIME*, 213, 146–154.
- Wu, C. H., y Fulton, P. F. (1971). Experimental simulation of the zones preceding the combustion front of an in-situ combustion process. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 11(1), 38–46. <https://doi.org/10.2118/2816-PA>
- Yatte Garzón, F. C. (2011). *Estudio analítico para determinar la influencia de la tasa de inyección de aire sobre los perfiles de temperatura y los gases de combustión mediante la simulación numérica de una prueba de tubo* [Tesis de maestría, Universidad Industrial de Santander].
- Zhu, Z. (2011). *Efficient simulation of thermal enhanced oil recovery processes* [Tesis doctoral, Stanford University].