



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

Programa de Maestría y Doctorado en
Ingeniería

Facultad de Ingeniería
División de Estudios de Posgrado

*Efectos de Dispersión en la Dinámica del Frente de
Combustión In Situ en un Medio Poroso. Estudio
Analítico y Numérico*

T E S I S

Que para obtener el grado académico de:

**Doctor en Ingeniería
(Mecánica)**

P r e s e n t a

Enrique Serrano Saldaña

Director de Tesis: Dr. Federico Méndez Lavielle

México D.F.

Noviembre de 2007



JURADO ASIGNADO

Presidente:	Dr. Jaime Cervantes De Gortari
Secretario:	Dr. Erick E. Luna Rojero
Vocal:	Dr. Federico Méndez Lavielle
Suplente:	Dr. Francisco J. Solorio Ordaz
Suplente:	Dr. Abraham Medina Ovando

Lugar donde se realizó la tesis:

**Facultad de Ingeniería de la
Universidad Nacional Autónoma de México**

Director de Tesis:

Dr. Federico Méndez Lavielle

Firma

DEDICATORIA

Con infinito respeto y admiración a mis Padres **Juan Serrano** y **María Jesús Saldaña**. Lejos de olvidar la formación, emerge la imperiosa necesidad de rendir tributo a la enseñanza.

A mi esposa **Claudia Espinosa**, por quien merece amor. Porque aún en las etapas más difíciles, me diste el aliento para seguir adelante y principalmente porque nunca dejaste de creer en mi. Gracias por sufrir conmigo.

A mis hijas **Aimée** y **Mariel Stephanie**, el motivo y la razón de mi ser y mis acciones. En agradecimiento por todo el tiempo que les pertenecía y que les robe para hacer este trabajo.

A mis hermanas y hermanos, por el simple hecho de ser.

En tributo a todas las personas que durante generaciones han dejado parte de su vida en la labor de sembrar la semilla del cambio que por fin empieza a darse.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por mi raza hablará el espíritu.

AGRADECIMIENTOS

A mi asesor Dr. Federico Méndez Lavielle, al comité de evaluación: Dr. Jaime Cervantes, Dr. Erick Luna, Dr. Francisco Solorio y al Dr. Abraham Medina, por sus valiosas aportaciones.

Al grupo de Recuperación de Hidrocarburos del Instituto Mexicano del Petróleo: Andrés Moctezuma, Manuel Serrano, Erick Luna, Armando Pineda, Raymundo Martínez, Jorge Chimal, Luis Hernández, Ricardo Islas, Arturo Medina, Emmanuel Márquez, Anita y especialmente al Físico Candelario Pérez Rosales.

A la Dirección de Exploración y Producción a cargo de la Dra. Alma América Porres Luna, del Instituto Mexicano del Petróleo.

Se agradecen los acertados comentarios de los Doctores Yucel Akkutlu de la Universidad de Alberta, Canadá, Daniel Schult de la Universidad Colgate, Hamilton, NY, y Andrés Moctezuma Berthier del Instituto Mexicano del Petróleo.

***Todos somos muy ignorantes,
lo que ocurre,
es que no todos ignoramos las mismas cosas
en el mismo espacio y al mismo tiempo.***

Albert Einstein

INDICE

Abstract	i
Resumen	ii
Nomenclatura	iii
1 Preliminares	1
1.1 Introducción	1
1.2 Antecedentes	4
1.3 Definición del problema	8
1.4 Metodología	9
2 Teoría	11
2.1 Dinámica del frente de combustión	11
2.2 Efectos de dispersión	16
3 Modelo matemático	17
3.1 Formulación matemática	17
3.1.1 Definición de escalas y parámetros adimensionales	21
3.2 Análisis asintótico	25
3.2.1 Zona de reacción	26
3.2.2 Zona externa	33
3.2.3 Región de transferencia de calor	41
3.2.4 Región de combustión	45
3.2.5 Solución global	50
3.2.6 Temperatura del frente	51
3.2.7 Fracción de oxígeno no quemada	52
3.2.8 Velocidad del frente	53
4 Resultados y discusión	55
4.1 Velocidad del frente de combustión	57
4.1.1 Efectos de dispersión en la velocidad del frente de combustión	59
4.2 Fracción de oxígeno no quemada	72
4.2.1 Efectos de dispersión en la fracción de oxígeno no quemada	72
4.3 Temperatura del frente	85
4.3.1 Efectos de dispersión en la temperatura del frente	85
4.4 Perfil de temperatura	96
4.5 Perfil de concentración de oxígeno	99

5 Conclusiones	110
Apéndice	113
A Aproximaciones asintóticas	113
A.1 Expansión de Taylor	113
A.2 Símbolo de Orden (símbolos de Bachmann-Landau)	113
A.3 Aproximación asintótica	114
A.4 Expansión asintótica	114
B Combustión In Situ	115
C Dispersión	122
C.1 Dispersión de masa	123
C.2 Dispersión térmica	124
D Condiciones de acoplamiento	125
Referencias	129

Abstract

In this work we developed an analytical and numerical study of the dynamics of forward in situ combustion front under heterogeneity of the porous medium effects because of the hydrodynamic dispersion, by applying analytical methodology of perturbation methods commonly used in the study of boundary layers. Following the philosophy of the study of dynamics of the front in smolder combustion (SC) and in situ combustion (ISC) in porous medium, we modify the total gas, energy and oxygen balance in order to have dispersion terms in these conservative equations, by a Péclet number, conveniently defined to have thermal and mass dispersion. From this work, we obtain analytical solutions for temperature, oxygen, mass flux and extent of conversion depth, for one dimensional, adiabatic and state case. At the end, the analytical solutions were rewrite to build a system of three algebraic equations which was solved numerically in order to know the behavior of the front velocity, front temperature and oxygen concentration, under several dispersion conditions.

We find that thermal dispersion increases the front velocity while mass dispersion decreases the unburned oxygen concentration. As observed in non dispersive cases, the front temperature was lightly affected by thermal dispersion and was independent of front velocity. Additionally, we take advantage of the FORTRAN program developed for the numerical solution, in order to know the effects of some critical variables of ISC process under dispersive ambient. In general, the effects of each individual variable were enhanced by dispersion effects.

Resumen

En este trabajo se presentan resultados del análisis de la dinámica del frente de combustión in situ en un medio poroso bajo los efectos de dispersión hidrodinámica debido a la heterogeneidad del medio, utilizando la metodología analítica de los métodos de perturbación regularmente utilizados en el estudio de capa límite. Siguiendo la filosofía de la línea de investigación de la dinámica del frente en fenómenos de filtración-combustión, combustión lenta sin llama, y en la propia combustión in situ, se modificaron las ecuaciones de continuidad, energía y balance de masa para tener los efectos dispersivos por medio del número de Péclet convenientemente definido para dispersión térmica y de masa.

De este estudio se obtuvieron soluciones analíticas de las ecuaciones diferenciales en una dimensión para la temperatura, concentración de oxígeno, gas total y grado de conversión de combustible, para un caso adiabático estacionario. Al final, las soluciones analíticas dieron origen a un sistema de tres ecuaciones algebraicas que se resolvió numéricamente para determinar el comportamiento de la velocidad del frente, temperatura del frente y concentración de oxígeno no quemado bajo diferentes condiciones de efectos dispersivos.

Se determinó que la dispersión térmica incrementa la velocidad del frente, y la dispersión de masa disminuye la concentración de oxígeno no quemado. La temperatura del frente es ligeramente afectada por los efectos dispersivos a los que fue sometida y es independiente de la velocidad del frente. Adicionalmente, se aprovechó el modelo numérico programado en ambiente FORTRAN, para determinar el efecto, en ambientes dispersivos, de cuatro variables que afectan decisivamente el proceso de combustión: porosidad del medio, temperatura inicial del medio, cantidad de oxígeno inyectado y concentración de combustible inicial. En general, se observó que los efectos individuales de cada variable se ven mejorados en ambientes dispersivos.

Nomenclatura

Símbolo	Significado
a	razón de capacidades caloríficas entre el gas y el sólido
\tilde{a}_s	área específica por unidad de volumen
c	capacidad calorífica
d_p	diámetro promedio de poro
D	coeficiente de difusión
E	energía de activación
f	posición del frente
f_t	velocidad de propagación del frente
$k(\bar{T})$	dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura
$K(\eta)$	permeabilidad del medio
k_0	factor pre exponencial
Le	número adimensional de Lewis
l_c	longitud característica
M	masa molecular del combustible
\dot{m}	flujo másico de gas
n	orden de velocidad de reacción
\bar{p}	presión dimensional
p	presión adimensional
Pe_T	número adimensional de Péclet térmico definido en el texto
Pe_D	número adimensional de Péclet difusivo definido en el texto
q	razón adimensional de calor de reacción
\dot{Q}	calor dimensional generado por la reacción
R_u	constante universal de los gases
\tilde{R}	R_u/M constante del gas inyectado
S_{us}	saturación de agua irreducible
S_{oi}	saturación inicial de aceite
\tilde{t}	coordenada temporal dimensional
\hat{t}	coordenada temporal adimensional
\tilde{T}	temperatura dimensional
V_p	volumen de poros
W	velocidad de reacción dimensional
u	velocidad de propagación del frente
\tilde{x}	coordenada espacial dimensional
\hat{x}	coordenada espacial adimensional
X	coordenada espacial de la zona de reacción
Y	fracción másica de oxígeno
Z	número de Zeldovich $Z = \frac{E\tilde{t}_f}{RT_f^2}$

Letras griegas	
α_s	difusividad térmica efectiva
γ	razón de energía de reacción y temperatura del frente
ε	razón de distancias
ζ	coordenada espacial de la zona externa
η	$= 1 - \frac{\rho_f(\bar{\alpha}_f)}{\rho_f^0}$ grado de conversión de combustible
η_i	viscosidad del fluido
θ	temperatura adimensional
κ	razón de fuerzas viscosas y mecánicas
λ	conductividad térmica efectiva
μ	coeficiente estequiométrico del oxígeno
ξ	coordenada espacial adimensional
$\tilde{\rho}_i$	densidad volumétrica del fluido dimensional
ρ	densidad adimensional
τ	coordenada temporal adimensional
v	velocidad del gas (velocidad de Darcy)
ϕ	porosidad del medio
ψ	coordenada espacial de la zona de transferencia de calor
$\psi(\eta)$	dependencia de la velocidad de reacción con el grado de conversión
Θ	temperatura adimensional en la zona de reacción
Π	diferencial de presión
Ξ	parámetro adimensional en la velocidad del frente de combustión
Φ	velocidad de reacción adimensional

Indices, subíndices y superíndices

0	orden principal
1	corrección de primer orden
2	corrección de segundo orden
<i>b</i>	valor en el frente de reacción
<i>c</i>	valor de referencia o característico
<i>f</i>	fluido
<i>f</i>	frente
<i>f</i>	combustible (fuel por su inicial en inglés) (el contexto define el uso de éste subíndice)
<i>g</i>	gas
<i>gp</i>	productos de gas
<i>gi</i>	gas inicial
<i>i</i>	inicial (cuando no se especifique otra)
<i>iny</i>	inyección
<i>o</i>	aceite (oil)
<i>s</i>	sólido
<i>t</i>	e.g., $f_t = df/dt$ derivada con respecto al tiempo
\hat{x}	variables dimensionales
$\hat{\hat{x}}$	variables adimensionales

Capítulo I

PRELIMINARES

1.1. Introducción

En México actualmente el escenario de recuperación de hidrocarburos se ve determinado por importantes factores tales como : i) los yacimientos más importantes en términos de recuperación de hidrocarburos, son de tipo fracturado y carbonatado, consecuentemente las tecnologías convencionales no son totalmente adecuadas para explotarlos. ii) Agotamiento de las reservas de los principales yacimientos. iii) Las reservas en algunos yacimientos maduros son de aceite pesado. iv) Fuertes problemas de transferencia de calor en los campos localizados en aguas profundas. Por lo tanto, una de las tareas cruciales en la industria petrolera nacional es el desarrollo de estudios de factibilidad para la aplicación de procesos de recuperación mejorada en los yacimientos productores, para mejorar las condiciones de flujo del aceite tanto en los yacimientos maduros como en los nuevos yacimientos, modificando alguna de las variables físicas y químicas del sistema roca-agua-aceite.

En este contexto, los procesos térmicos de recuperación mejorada de hidrocarburos, pueden ofrecer resultados alentadores ya que invariablemente modifican el factor de movilidad de manera favorable, mediante varios mecanismos [1], siendo la reducción de la viscosidad y la expansión térmica, algunos de los principales.

En este trabajo particularmente nos referimos al proceso térmico de inyección inmisible de aire que deriva en un proceso de combustión in situ (CIS). Cuando el aire es inyectado en un yacimiento de aceite, ocurren simultáneamente dos fenómenos: el desplazamiento del aceite y la oxidación del aceite. Con base en la intensidad del desplazamiento y la severidad de las reacciones de oxidación, es posible distinguir diferentes procesos que se nombran por la miscibilidad y por el tipo de oxidación que lo acompaña. Cuando las reacciones que dominan en régimen inmisible son principalmente de oxidación a alta temperatura, (HTO por sus iniciales en inglés), se obtiene el proceso CIS [2].

La dinámica del proceso de combustión es influenciada por un gran número de factores, entre los que se incluyen el flujo de fluidos de gases inyectados y producidos, la transferencia de calor entre el medio poroso y los alrededores, la velocidad de reacción, la heterogeneidad del medio y la evolución morfológica del medio poroso [3], a consecuencia de las reacciones químicas. Este trabajo se centró en la determinación de los efectos por heterogeneidades del medio.

Por otra parte, los simuladores existentes para el proceso de combustión in situ, los cuales indudablemente han contribuido al entendimiento del fenómeno, pueden no ser adecuados para resolver la estructura del frente en donde se requiere una mayor descripción [4].

A pesar de las enormes contribuciones de prestigiados investigadores [5]-[23], el problema de la combustión in situ es un problema abierto ya que aún no se cubren todos los escenarios que afectan las condiciones de estabilidad del frente de combustión in situ en medios porosos. Particularmente, un factor que no se ha considerado a detalle es el efecto que tiene la dispersión hidrodinámica del medio en el comportamiento del proceso.

La motivación de este trabajo fue la de incursionar en el estudio de los efectos de las heterogeneidades del medio a través de la dispersión térmica y de masa. La complejidad inherente al fenómeno de la dispersión, sumada a las propias del fenómeno de combustión in situ en medios porosos constituye un caso interesante de estudio.

Este trabajo tuvo como objetivo central, determinar de manera analítica y numérica, los efectos de dispersión térmica y de masa en la dinámica del frente de combustión, causados por heterogeneidades del medio poroso. Se retoma la metodología desarrollada por Schult et al. [10] en combustión lenta sin flama, y su extensión a la combustión in situ hecha por Akkutlu et al. [4]. Se incorpora explícitamente un término de dispersión térmica y de masa a través del número adimensional Péclet convenientemente definido, en un modelo unidimensional adiabático, en donde el frente de combustión se propaga en la misma dirección que el aire inyectado. Se utilizó el método de expansiones asintóticas acopladas, MEAA, método de perturbación comúnmente utilizado en el tratamiento de problemas de capa límite. Una vez definidas las ecuaciones diferenciales que describen el problema, en su forma adimensional, y aprovechando la teoría asintótica para altas energías

de activación [24], el problema completo se dividió en tres zonas: zona quemada, zona de combustión y zona no quemada. Relacionando a cada zona existen regiones de rápida variación de las variables, i.e., zonas, denominadas por el mecanismo de transferencia de masa y de calor dominante en esa zona. Bajo la metodología MEAA se resolvió el problema para cada zona y al final se hizo el acoplamiento entre ellas para formar la solución analítica completa. Una de las bondades de esta metodología fue que redujo las ecuaciones no lineales a ecuaciones lineales con solución analítica. A partir de éstas, al final fue posible formar un sistema de ecuaciones algebraicas que fue resuelto numéricamente utilizando valores típicos de las variables en un proceso de combustión in situ en un medio poroso. En este proceso se determinó la velocidad del frente, temperatura de frente, concentración de oxígeno no quemado y los perfiles completos de temperatura y oxígeno. Adicionalmente, se determinó el efecto individual de variables críticas como la porosidad del medio, temperatura inicial del medio, concentración inicial de oxígeno inyectado y cantidad de combustible depositado en el medio, así como su efecto bajo diferentes condiciones de dispersión térmica y de masa.

El trabajo se estructura de la siguiente manera, primero se describen brevemente los resultados de la revisión bibliográfica referente a estudios previos que se han desarrollado en el tema. En el siguiente apartado se describe la metodología utilizada. Después, viene un apartado de teoría, en donde se resume la base teórico-analítica de la estructura del frente y los tipos de soluciones que se han encontrado en estudios similares. Posteriormente se presenta el modelo matemático basado en ecuaciones diferenciales en una dimensión, para la energía, continuidad, flujo de fluidos en un medio poroso y una ecuación de estado; se definen los parámetros adimensionales con los que se construyen las ecuaciones no dimensionales del problema, y se desarrolla el método asintótico resolviendo analíticamente las ecuaciones diferenciales en cada zona. Después se presentan los resultados obtenidos y su discusión así como las principales conclusiones a las que se llegó. Al final de los capítulos, en una sección de apéndices, se detalla la información omitida para dar continuidad a la explicación del trabajo.

1.2. *Antecedentes*

El estudio de la dinámica de propagación del frente de combustión en medios porosos es de gran interés para una variedad de aplicaciones las cuales incluyen la combustión in situ para la recuperación de hidrocarburos. Al respecto se han desarrollado numerosos estudios teóricos y experimentales con el fin de esclarecer el comportamiento de diferentes variables que afectan directamente el éxito del proceso de combustión.

En una revisión de la literatura especializada en el tema, se localizaron varios artículos referentes al trabajo que se ha hecho en los últimos años sobre los mecanismos básicos que rigen la combustión in situ en medios porosos. Las fuentes de información utilizadas fueron las bases de datos del Centro de Información Petrolera CIP, del Instituto Mexicano del Petróleo, el centro de información de la Facultad de Ingeniería de la UNAM, y la base de datos Energy Technology Data Exchange, ETDEWEB. A continuación se describen brevemente las principales líneas de investigación el respecto.

El problema de la combustión en un medio poroso se ha idealizado de la siguiente manera. Se tiene un medio poroso inerte el cual esta saturado por un combustible. Se inyecta un agente oxidante y se origina el frente de combustión al cual puede viajar en la misma dirección en la que se inyecta el agente oxidante o en dirección opuesta. La estructura de este frente de combustión depende de diferentes factores; sin embargo, puede idealizarse como una zona en la que ocurren reacciones químicas (zona de reacción), rodeada por regiones en las que el transporte de calor es crucial (zona de quemado, detrás del frente, y zona no quemada, delante del frente), observándose discontinuidades en la temperatura y en el flujo másico de oxígeno inyectado. La estabilidad de este frente es determinante para el proceso [5]. A esta idea de la estructura del frente se le conoce como modelo de las discontinuidades de la flama.

Dentro del modelo de las discontinuidades de la flama, a las regiones que conectan las tres zonas identificadas (i.e., a la zona quemada o de productos con la zona de reacción y la zona de reacción con la zona no quemada), y dado que es ahí en donde ocurren cambios drásticos en las variables, Matalon et al. [6], las consideraron como capas límite y utilizaron la teoría de la expansiones asintóticas acopladas (MEAA), para determinar la evolución de

la flama y la localización del frente, encontrando condiciones de salto a través del frente de reacción. Estas ideas reflejan los trabajos pioneros de Shvashinsky y junto con la teoría de las altas energías de activación, constituyen la base analítica en la que se sustentan trabajos posteriores.

Los trabajos sobre fenómenos de combustión en medios porosos en donde utilizan esta metodología analítica, se han enfocado a problemas de combustión por filtración, quemado lento sin flama (“smolder combustion”) y combustión in situ en un medio poroso. A pesar de que estos fenómenos parten de los mismos principios físicos, es importante mencionar que en la mayoría de los estudios de combustión lenta sin flama, el combustible se tiene en el medio previo a la combustión y en algunos casos es el medio poroso el combustible que se consume para generar un producto deseado. Estos estudios se han hecho para la síntesis de componentes químicos por combustión. Por su parte, en el fenómeno de la combustión in situ, el medio poroso es inerte y se genera in situ, el combustible a quemar en el proceso. Este último es el que es importante para la industria petrolera.

Para el caso de la combustión lenta sin flama, Britten et al. [7]- [8], han estudiado el frente de combustión para casos adiabático, no adiabático, directo y a contra flujo. Han utilizado el método asintótico de alta energía de activación para analizar la dinámica de ondas viajeras, usando un número de Lewis efectivo muy grande y una cinética de Arrhenius de primer orden. En este trabajo la temperatura estacionaria y adiabática, es el valor característico para el problema estacionario básico y lo relacionan con la velocidad del frente de combustión por el balance integral de la temperatura. En esta misma línea de investigación analítica de la combustión lenta sin flama, las aportaciones de Schult et al. [9]-[12], son determinantes, ya que utilizando el mismo método de las expansiones asintóticas acopladas, logran describir analíticamente la estructura del frente móvil de combustión. En la adimensionalización de las variables, toman la temperatura del frente como temperatura característica, que inicialmente no se conoce. Por la forma de adimensionalizar, aparece explícitamente en las ecuaciones, el término de la velocidad del frente, que en la evolución del análisis, al final queda como el auto valor en las ecuaciones de energía y de transporte. Utilizan un número de Zeldovich muy alto (teoría de las altas energías de activación), lo

que permite considerar la onda viajera de combustión como un frente plano con una región de alta temperatura, asociado a la zona de reacción, rodeado por dos regiones de baja temperatura asociadas a zonas de transferencia de calor. En éstas zonas de transferencia de calor, hay cambios drásticos en las propiedades del sistema por lo son consideradas como capas límites. Mediante la aplicación del método MEAA, resolvieron inicialmente la zona de reacción (considerándola como una zona interna), en la cual encontraron las condiciones de salto de las variables externas al pasar por la zona de reacción (condiciones de salto en el modelo de las discontinuidades), y definen una ecuación para la velocidad del frente en términos de las variables externas evaluadas en la zona de reacción. Posteriormente resuelven el problema externo para cada región y al final acoplan las soluciones. Dentro de los principales resultados de estos estudios, destacan las soluciones para la velocidad de propagación del frente, la temperatura del frente, y el grado de conversión del combustible. Encontraron soluciones para cuatro casos específicos: cuando la estructura del frente es estándar (la onda es guiada por la reacción), para la estructura inversa (la onda es arrastrada por la reacción), para un caso estequiométrico (en el cual los reactantes están en cantidades estequiométricas) y para un caso en el cual la solución tiene control cinético (dependiente de la velocidad de consumo de los reactantes). El método MEAA funciona bien par el caso en transitorio; sin embargo, cuando se trata de aplicar a un caso no estacionario, se llega al problema de cerradura [12]. Este problema fue resuelto al considerar la dependencia de las variables con el parámetro de expansión (número de Zeldovich) en lo que se denominó generalización del método MEAA, llamándolo Método Generalizado de las Expansiones Asintóticas Acopladas. Para completar el estudio, hicieron análisis de estabilidad de las soluciones y determinaron inestabilidades de tipo pulso y celular, estableciendo límites de extinción. Dentro de los estudios de estabilidad, Decker et al. [13], determinó que la extinción de la flama ocurre cuando el flujo de masa de gas inyectado es suficientemente alto y encontró valores de velocidad de propagación del frente en los que la onda es estable en los umbrales de la extinción.

El método MEAA, también ha sido utilizado por Aldushin et al. [14]-[15], en problemas de combustión por filtración.

En estudios del comportamiento de la propagación de ondas de combustión por la filtración de un gas que contiene un agente oxidante que reacciona con el medio poroso. Estas ondas son inestables con respecto a las perturbaciones hidrodinámicas. Lograron determinar que la reducción de la resistencia al flujo en la región de productos debido a un incremento en la porosidad, es una de las principales causas que generan la inestabilidad. Estos estudios los extendieron para el caso de reactantes con diferentes difusividades.

Con el desarrollo de las técnicas analíticas aplicadas a los problemas propagación de frente de combustión [16], Gubernov et al. [17], ha investigado las propiedades de una onda viajera de frente de combustión y resolvió el problema de la estabilidad lineal de la onda, aplicando funciones de Evans.

Por otra parte, en lo que respecta al fenómeno de la combustión in situ en medio poroso, Agca et al. [18], hizo un estudio de aplicación del método MEAA, a la recuperación mejorada de hidrocarburos, en el cual relaciona las características de la combustión con algunas propiedades del yacimiento. Por otra parte, Da Mota, et al. [19], acoplaron todas las ecuaciones diferenciales en un sistema de tres ecuaciones. En la solución de éstas, se desprecian los efectos de pérdidas de calor y cambios volumétricos. Sin embargo, los estudios de Akkutlu et al. [4],[20]-[22], son los que tienen una implicación directa del fenómeno de la combustión in situ en la recuperación de hidrocarburos. Estos estudios iniciaron con la migración del método MEAA al fenómeno de la combustión in situ considerando características propias de un sistema roca-aceite del yacimiento. Basado en los estudios de Schult et al., Akkutlu et. al., analizaron la dinámica del frente de combustión in situ en un medio poroso retomando la teoría de las altas energías de activación y aplicando el método MEAA, determinaron soluciones para la onda de combustión para un caso adiabático estacionario y para un caso no adiabático (considerando dos modelos de pérdida de calor: difusivo y convectivo). Mediante métodos espectrales, también determinaron soluciones para el caso no estacionario. Dentro de los alcances de estos trabajos, determinaron la magnitud de los efectos que tienen algunas propiedades del yacimiento (como las heterogeneidades del medio, modeladas a través de capas de diferentes permeabilidades y efectos de la micro estructura del medio [23]), en la dinámica del frente. Las soluciones que se encontraron en

estos estudios son trascendentales cuando se modela el proceso de combustión un situ, ya que tradicionalmente los modelos existentes no resuelven con suficiente detalle la estructura del frente, perdiendo con ello información vital en el entendimiento de la física del proceso.

A manera de síntesis, la estructura del frente se idealiza como una capa límite móvil en donde ocurren las reacciones, inmersa en otra capa límite en donde dominan el transporte convectivo y difusivo, que a su vez se encuentra inmersa en un sistema externo con condiciones de frontera definidas. Aplicando el método de las expansiones asintóticas acopladas, que se basa en el análisis para altas energías de activación [24], es posible resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, para obtener la posición del frente, su evolución dinámica y el grado final de conversión, parámetros que definen el proceso de combustión.

1.3. Definición del problema

Uno de los grandes problemas a los que se enfrenta México en el ámbito de la industria petrolera es la marcada tendencia a la declinación de las reservas de hidrocarburos. Quizás el caso más conocido sea el de Cantarell. Por ello, en los últimos años se han hecho grandes esfuerzos en la búsqueda de nuevas reservas; sin embargo, solo se ha tenido éxito en aguas profundas. El problema de estos nuevos bancos de aceite pesado, es que se localizan a profundidades que van desde los 400 *m* a los 600 *m* de tirante, es aceite pesado y tienen que sortearse problemas de transferencia de calor dado que el lecho marino se encuentra alrededor de 10°C.

En México aproximadamente el 94.5 % de la producción nacional y el 67 % de las reservas de hidrocarburos, se encuentran en yacimientos fracturados y carbonatados [25]. Ello implica que las técnicas de recuperación convencionales para yacimientos homogéneos no sean del todo adecuadas y que la saturación de aceite residual en algunos yacimientos que han sido invadidos con agua, aún sea considerable (49.83 % del volumen original de aceite probado [25]). El problema es ¿cómo sacar el aceite que queda?. Bajo este escenario, es inminente la aplicación de alguno de los métodos de recuperación mejorada o una combinación de ellos y necesariamente se requiere de estudios teóricos y experimentales para establecer nuevas estrategias de explotación y producción. En lo que respecta a los nuevos bancos de aceite y

a los casos de reservas de aceite pesado, los métodos térmicos ofrecen grandes expectativas.

Los métodos térmicos incrementan la producción de crudo principalmente por reducción de la viscosidad del aceite y por expansión térmica. Quizás el más efectivo (y al mismo tiempo el más riesgoso) en la reducción de la viscosidad es el método de combustión in situ. Al respecto se han desarrollado numerosos estudios tanto teóricos como experimentales. En el terreno experimental, los trabajos a escala de laboratorio han permitido determinar algunas condiciones experimentales adecuadas para llevar cabo pruebas con éxito para diferentes tipos de aceite. Mientras que a nivel teórico, se han logrado definir condiciones de estabilidad del frente sujeto a diferentes escenarios y otros criterios que han permitido el desarrollo de simuladores comerciales. Sin embargo, el efecto de la heterogeneidad del medio poroso a través de un modelo simple de dispersión hidrodinámica, en la dinámica del frente de combustión aún no ha sido completamente explorado.

Por tal motivo, el objetivo principal de este trabajo fue el determinar el efecto que tiene la dispersión térmica y de masa en la velocidad de propagación del frente, temperatura del frente, fracción de oxígeno no quemado, en los perfiles de temperatura y concentración de oxígeno, durante un proceso de combustión in situ en un medio poroso.

1.4. Metodología

El problema de los efectos de dispersión en la dinámica del frente de combustión se abordó analíticamente aplicando el método de las expansiones asintóticas acopladas MEAA. En el entendimiento de la aplicación de este método, en el Apéndice A se citan algunas definiciones de los términos utilizados en la teoría de las aproximaciones asintóticas. La filosofía de este método es la de reducir las ecuaciones diferenciales no lineales a ecuaciones de menor orden. Para hacer esto, se hace un análisis de escalas y se determinan parámetros característicos. Un punto particular fue que la temperatura del sistema se hizo no dimensional con la temperatura del frente la cual inicialmente no se conocía. La explicación de la estructura del frente, basada en principios de la teoría de altas energías de activación, es en términos de tres regiones de temperatura básicamente constante rodeadas por dos regiones donde ocurren cambios rápidos en las propiedades. Una vez identificadas, en estas zonas

se desarrolló un análisis asintótico introduciendo nuevas coordenadas espaciales para las capas límites produciendo una transformación de alargamiento. Resolviendo las ecuaciones en la escala de la zona de reacción, se obtuvieron condiciones de salto para las variables externas y se definió un auto valor para la velocidad de propagación del frente. Después se resolvieron las ecuaciones en las zonas aguas arriba y abajo del frente de combustión (en este caso se trabajó para un frente plano), donde se transformó el problema externo a un problema de perturbación relacionando todos los parámetros con un parámetro pequeño ε . En ello se vio involucrada la definición de una nueva escala de tiempo para visualizar los cambios en las posiciones de las zonas con respecto al frente de combustión. Finalmente se acoplaron las soluciones para tener la visión completa tanto de los perfiles de los flujos como de la velocidad de propagación del frente, su posición, la temperatura del frente, y la fracción de oxígeno no quemado. Esta metodología descansa en la teoría de perturbación para problemas singulares [26],[28].

Capítulo II

TEORÍA

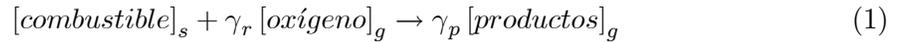
La combustión in situ es un método térmico de recuperación de hidrocarburos donde se inyecta un gas oxidante como el oxígeno, o el aire, para generar calor por la ignición de los hidrocarburos ligeros del yacimiento. En este proceso se origina un frente de combustión por medios naturales o artificiales, el cual es mantenido y propagado hacia el pozo productor mediante la inyección continua del agente oxidante (en el Apéndice B se puede consultar el detalle del proceso). La eficiencia de este mecanismo y/o su éxito dependen fuertemente de la estabilidad del frente de combustión, de ahí que sea importante conocer con detalle su estructura.

Por otra parte, las ecuaciones que gobiernan la propagación de una flama son en extremo complicadas. Involucran las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo viscoso compresible, expresando la conservación de masa y de momento, acopladas con las ecuaciones de transporte que gobiernan el flujo de calor y la difusión de las especies químicas participantes en las reacciones exotérmicas, expresando la conservación de energía y de especies. Adicional a las no-linealidades usuales en la dinámica de los fluidos, en las ecuaciones aparece términos no lineales por la descripción de la naturaleza exponencial de la cinética de la reacción de Arrhenius. Ante esto, no es de sorprenderse que comúnmente se usen aproximaciones introduciendo modelos fenomenológicos o considerando casos límites, para el análisis de resultados. En este contexto, a continuación se describen algunas características de la estructura del frente de flama al que se ha llegado como resultado de la aplicación de los análisis asintóticos [10],[6].

2.1. Dinámica del frente de combustión

Las reacciones en el régimen HTO ocurren con una energía de activación muy alta y son heterogéneas ya que participa el combustible semisólido, producto de de la etapa LTO

y el gas inyectado. Típicamente se representa la cinética de la reacción como una reacción concertada i.e., en un solo paso; sin embargo, por simplicidad se utiliza una aproximación adecuada para procesos reactivos [10]:



Donde γ_r y γ_p son los valores promedio de los coeficientes estequiométricos de reactivos y productos, respectivamente y en donde se han utilizado pseudo componentes para el combustible y los productos de reacción. En esta ecuación se supone que hay una cantidad fija y conocida del combustible semisólido y se modela el consumo del combustible semisólido para generar calor. La dinámica de este proceso esta estrechamente relacionada con el frente de combustión, del cual es imprescindible determinar su estructura.

En el límite de energía de activación infinita, la zona de reacción converge a una superficie llamada frente de reacción. En esta situación, visto desde la zona externa, el frente de combustión puede observarse como una discontinuidad, y puede describirse en términos de ecuaciones de conservación sin los términos de reacción en ambos lados del frente de combustión, mientras que para la zona de reacción se desarrollan condiciones de salto que retienen los efectos de la reacción. Dado que la zona de reacción es muy estrecha y puede verse como una capa límite interna, es posible utilizar el Método de Expansiones Asintóticas Acopladas (MEAA). De acuerdo con este método en el límite de altas energías de activación se expanden las variables independientes en cada una de las tres zonas en series de Z^{-1} , se alarga la coordenada espacial para el problema interno (zona de reacción) y se acoplan las expansiones de la zona interna con aquellas de la zona externa en la zona de precalentamiento y en la zona de productos en cada frontera. En principio es posible obtener soluciones para todos los ordenes de corrección en las tres zonas, pero en la práctica las soluciones importantes se quedan en el orden principal y en algunos casos en correcciones de primer orden en las regiones externas. El análisis en la zona de reacción frecuentemente se limita a la formulación de las condiciones de salto para la solución del problema externo a través del estrecho frente de flama.

Mediante análisis asintóticos como el mencionado en el párrafo anterior, es posible

encontrar soluciones de la onda plana con dos tipos de estructura. Cada estructura tiene dos zonas internas, i.e. dos regiones de rápida variación de la temperatura, separadas por regiones en la que la temperatura es esencialmente constante. Una región es debido a la liberación de calor por la reacción de combustión, mientras que la otra es producto de la transferencia de calor entre el sólido y el gas. La naturaleza de esta estructura es precisamente debida a la dependencia de la velocidad de la reacción con la temperatura. Esto hace que de manera natural la estructura del frente móvil de combustión se divida en tres regiones: i) Una zona delante de la onda de reacción denominada zona de pre-calentamiento donde la temperatura es baja y prácticamente no hay reacción. ii) Una zona de reacción donde la temperatura es alta, la velocidad de reacción tiene comportamiento exponencial y el combustible es convertido en calor rápidamente. iii) Una zona denominada zona de productos, donde todo el combustible ha sido consumido, ya no hay reacción y la temperatura es constante. Adicional al hecho de que esas zonas físicamente están dominadas por diferentes procesos, las tres tienen diferentes escalas de longitud [10]. En la Figura 1 se esquematiza la estructura de un frente de combustión para una onda plana.

La reacción termina cuando uno de los reactivos se consume completamente. La estructura de la solución y la dinámica dependen del reactivo limitante. Al respecto se pueden presentar los siguientes casos:

1. *Estructura estándar (leading structure)*. Se da cuando hay un exceso de gas después de que todo el combustible se ha consumido, se dice que la combustión es combustible deficiente y la estructura se conoce como onda guiada por la reacción ("leading wave structure"). En la comunidad de combustión se le conoce como estructura estándar. Este caso la velocidad de la zona de combustión es mayor que la de transferencia de calor. En este caso la temperatura desciende en la interface de transferencia de calor la cual es movida por el gas frío inyectado [10]. Cuando ocurre la onda guiada por la reacción, la muestra esta fría delante de la zona de reacción, caliente inmediatamente detrás de la zona de reacción y fría nuevamente atrás de la zona de reacción (enfriada por el gas inyectado).

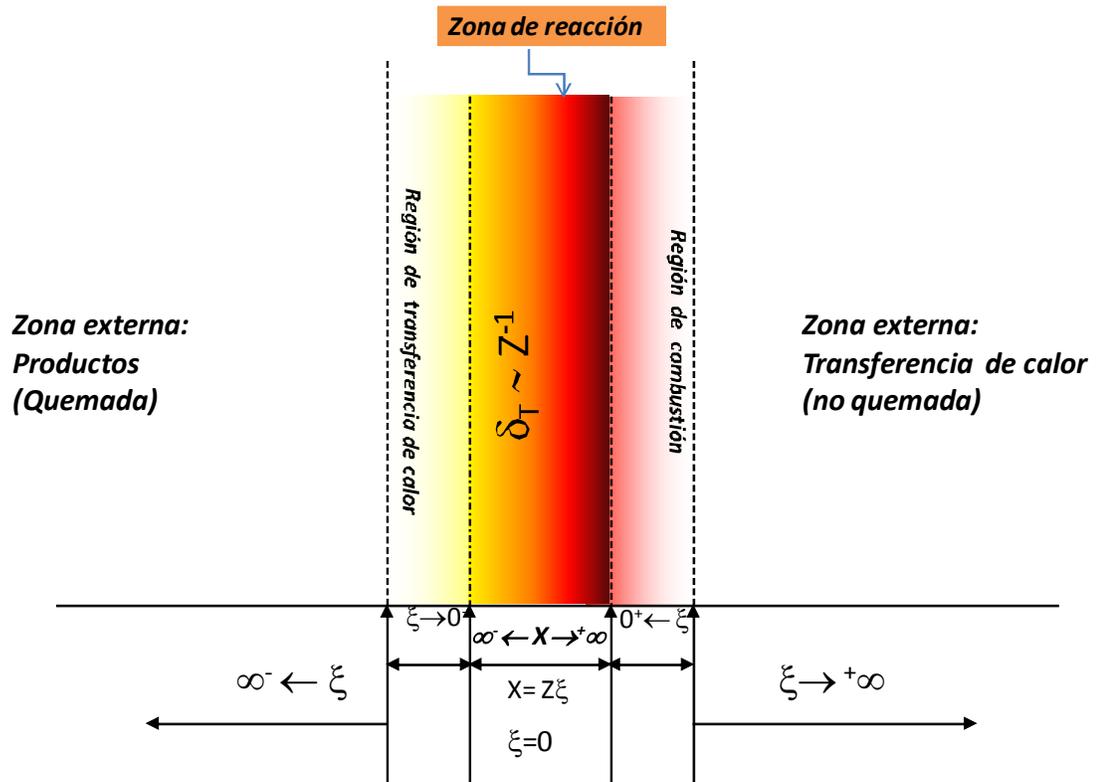


Figura 1: Estructura del frente de combustión in situ en el que la onda (caso: onda plana) viaja en la misma dirección en la que se inyecta el aire. Esta estructura corresponde al caso estándar, donde el reactivo limitante es el combustible y la velocidad de la interfaz de transferencia de calor es menor a la de la interfaz de combustión. La zona de reacción esta localizada en $\xi \sim 0$. Al hacer la transformación de alargamiento $X = Z\xi$ se abre esta zona y su dominio queda delimitado por el intervalo $-\infty < X < \infty$.

2. *Estructura inversa (trailing structure)*. Cuando hay insuficiencia de gas para consumir todo el combustible presente, se dice que la combustión es del tipo gas deficiente y se conoce como estructura de la onda arrastrada por la reacción ("trailing wave structure"). Como la posición relativa de las zonas es invertida con respecto a la estándar, se le conoce como estructura invertida en la literatura de combustión. En este caso la velocidad de la zona de transferencia de calor es mayor que la velocidad de la región de combustión y la región de alta temperatura actúa como pre calentador del sólido no quemado.

Para ambos tipos de estructura, existen soluciones controladas cinéticamente, que son determinadas por la velocidad de inyección y consumo de oxígeno y soluciones estequiométricas, que son determinadas por la cantidad de oxígeno inyectado. A continuación se enlistan algunas características especiales de la estructura del frente [10]:

- La propagación de las zonas es a velocidad constante, no necesariamente la misma, y son separadas por una región de alta temperatura la cual es constante.
- A un gasto alto de inyección de gas, puede darse una combustión incompleta, ya que el gas sobrepasa la zona de reacción y hay enfriamiento.
- Las soluciones estequiométricas ocurren cuando el flujo de aire es bajo. Mientras que las soluciones cinéticas ocurren cuando el flujo de aire es alto.
- Para obtener un grado razonable de conversión se supone que la velocidad del gas que entra (v) es mucho mayor que la velocidad del frente (u).
- La velocidad de cada interface es menor que la del gas.
- La energía de activación es muy alta, de modo que la reacción ocurre en una zona muy delgada.
- La temperatura inicial y final no necesariamente deben ser iguales si el gas es inyectado a una temperatura diferente a la del combustible.

- El acoplamiento de esas regiones de temperatura constante, es a través de dos zonas donde la temperatura cambia rápidamente.
- La diferencia entre las velocidades de ambas zonas es tan pequeña que la región de alta temperatura, medida con la escala de longitud de la muestra, crece lentamente en la escala de tiempo de la cinética de la reacción.
- Para tener un esquema completo del fenómeno, se deben determinar soluciones analíticas para la velocidad de propagación de las dos capas de calor (combustión y transferencia), temperatura de flama adiabática (Temperatura de combustión), grado final de conversión del sólido, perfil espacial de T, flujo de gas y concentración de oxígeno.

2.2. Efectos de dispersión

De la literatura especializada se sabe que la dispersión térmica en un medio poroso puede incluirse considerando la conductividad térmica efectiva λ_{eff} , como la suma de una conductividad térmica estándar λ_m , y una conductividad térmica dispersiva. Esta puede ser de la siguiente forma:

$$\lambda_{eff} = \lambda_m + c\lambda_f \text{Pr} \left(\frac{\rho_f u_f d_p}{\eta_f} \right) . \quad (2)$$

Por otro lado, una forma simple de considerar efectos de dispersión de masa, en la ecuación de conservación y de transporte de especies, es a través de las fluctuaciones en la velocidad promedio debidas a los efectos de las heterogeneidades del medio, i.e., dispersión hidrodinámica, la cual puede ser de la siguiente forma:

$$k_l = \frac{D_0}{F\phi} + 0,5(\sigma d_p) |U| \cong \alpha_t |U| . \quad (3)$$

Para más detalle acerca de estos modelos de dispersión, se puede consultar el Apéndice C.

En las ecuaciones conservativas y de transporte fueron introducidos estos modelos simples de dispersión, que posteriormente se engloban en una definición del número de Péclet, a través del cual se crea el ambiente dispersivo.

Capítulo III

MODELO MATEMÁTICO

3.1. *Formulación matemática*

El proceso inicia con la inyección de aire seco en un medio poroso con propiedades petrofísicas conocidas $(\rho_s, c_s, \lambda_s, \phi, d_p, K, V_p)$, el cual se considera que cuenta con una saturación inicial de fluidos $(S_{oi}@S_{wi})$ a condiciones de yacimiento (alta presión y temperatura) y en donde se conocen las propiedades del aceite $(\eta_o, \rho_o, c_o, \lambda_o)$ a partir de estudios previos tipo PVT, y las del aire a inyectarse $(\eta_g, \rho_g, c_g, \lambda_g)$. El aire cuenta con una concentración másica de oxígeno Y , y se inyecta a una velocidad constante v . En su recorrido por el medio poroso, se supone que el aire frío entra en equilibrio termodinámico con el medio poroso y los fluidos residentes, por lo que se usa una sola temperatura T . Cuando el aire inyectado entra en contacto con el aceite, ocurren una serie de reacciones locales las cuales se engloban en el término de oxidación o adición de oxígeno y dado que ocurren a baja temperatura pertenecen al régimen LTO. En ellas, las propiedades del aceite involucrado se ven modificadas, hay un ligero incremento en la densidad y viscosidad y en las relaciones de componentes saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos. Físicamente se genera un combustible semisólido in situ, que posteriormente será consumido en las reacciones de pirolisis propias de la combustión, las cuales se dan a temperaturas más altas. Una vez que se genera el frente de combustión en pulsos térmicos de más de $600^\circ C$, se propaga por el medio poroso a través de la inyección continua del gas. Cuando se da la combustión completa, se obtienen como productos de la reacción CO_2 , agua y una gran cantidad de calor Q , el cual reduce significativamente la viscosidad del aceite no quemado. El grado de conversión $\eta(x, t) = 1 - \rho_f(x, t) / \rho_f^0$, donde ρ_f^0 es la densidad inicial del combustible sólido, es un indicativo de la evolución del proceso.

La descripción matemática de este evento se hizo mediante el empleo de las ecuaciones de Navier Stokes para flujo viscoso compresible expresando la conservación de masa y de momento, de ecuaciones de transporte, expresando la conservación de energía y de especie,

y de una ecuación que expresa la cinética de la reacción. Para el flujo del gas en el medio poroso se utilizó la ecuación de Darcy y la ecuación del gas ideal como ecuación de estado. Basado en los trabajos de Schult [10] y Akkutlu et al.[4], se consideraron las siguientes hipótesis:

i) Todas las propiedades termodinámicas se mantienen constantes
 ii) En la mayoría de los problemas de combustión, los términos que usualmente pueden despreciarse son [24]:

- fuerzas de cuerpo (\mathbf{f}_i)
- transferencia de calor por radiación (q_R)
- fuentes de energía por incrementos de presión. $\left[(Y_i - X_i) \frac{1}{p} \nabla p \right]$

iii) Los cambios en la densidad del fluido se dan únicamente por las reacciones y no por compresión.

iv) La densidad de la roca no cambia con la reacción, i.e., se considera un medio poroso inerte.

v) Se considera un modelo unidimensional.

Las ecuaciones conservativas en su forma diferencial, en coordenadas cartesianas y para un caso adiabático son las siguientes:

continuidad:

$$\phi \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g \tilde{v}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{\mu}_g \rho_f^0 W = 0 , \quad (4)$$

especie:

$$\phi \frac{\partial (\tilde{Y} \rho_g)}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial (\tilde{Y} \rho_g \tilde{v})}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[\rho_g \left(\frac{D_0}{\phi \tau} + C' d_p \tilde{u} \right) \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial \tilde{x}} \right] - \tilde{\mu} \rho_f^0 W , \quad (5)$$

energía:

$$(1 - \phi) \rho_s c_s \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tilde{t}} + \rho_g c_g \tilde{v} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[\left(\lambda + C \lambda_g \text{Pr} \frac{(\rho_g d_p) \tilde{v}}{\eta_g} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tilde{x}} \right] + \tilde{Q} \rho_f^0 W , \quad (6)$$

velocidad de la reacción:

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tilde{t}} = W , \quad (7)$$

donde W representa la velocidad de la reacción y está dada por la ley de acción de masas:

$$W = \tilde{a}_s \left(\frac{\tilde{Y}\tilde{p}}{R\tilde{T}} \right)^n \psi(\eta) k_0 \exp \left\{ -\frac{E}{R\tilde{T}} \right\} ; \quad (8)$$

ley de Darcy:

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{x}} = -\frac{\eta_g}{K(\eta)} \tilde{v} , \quad (9)$$

y la ecuación del gas ideal:

$$\tilde{p} = \rho_g \tilde{R}\tilde{T} . \quad (10)$$

La mayoría de los símbolos y notaciones están descritas en la sección de nomenclatura anterior; sin embargo, es conveniente referir algunas para mayor entendimiento de la explicación.

En las ecuaciones de energía y continuidad, C y C' son propiedades del medio permeable, $\tilde{\mu} = \bar{\gamma}M_o/M_f$ es el coeficiente estequiométrico para el oxígeno (donde M_o es la masa molecular del oxígeno y M_f la del combustible semisólido) y $\tilde{\mu}_g = \tilde{\mu}_{gp} - \tilde{\mu}$, $\tilde{\mu}_{gp} = \bar{\gamma}_{gp}M_{gp}/M_f$ (donde M_{gp} es la masa molecular de los productos gaseosos) son respectivamente, los coeficientes estequiométricos de productos gaseosos y del total de los productos.

En la ecuación de la velocidad de la reacción, el término $\left(\tilde{Y}\tilde{p}/R\tilde{T} \right)$ es la dependencia de la velocidad de reacción con la concentración de oxígeno y la presión, n es el orden de la reacción y $\psi(\eta)$ es la dependencia en el factor de conversión η (en $\eta = 1, \psi = 0$).

La dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura, es a través de la ley de Arrhenius: $k_0 \exp \left\{ -\frac{E}{R\tilde{T}} \right\}$. Al término $\frac{E}{R\tilde{T}}$, algunos autores lo denominan número de Arrhenius. Generalmente las reacciones de combustión ocurren a energías de activación muy altas, una medida de ello es a través del número adimensional de Zeldovich $Z \equiv \frac{E(\tilde{T}_f - \tilde{T}_0)}{R\tilde{T}_f^2}$, donde \tilde{T}_f es la temperatura del frente. Como $Z \gg 1$, la velocidad de reacción es fuertemente dependiente de la temperatura.

Dado que nos estamos limitando al caso donde el frente se propaga en una sola dirección, las condiciones de frontera son para dos posiciones: entrada y salida del medio y corresponden a un momento en el tiempo $\tilde{t} \geq 0$ mayor al tiempo de ignición, i.e., en el presente trabajo no considera los efectos de la ignición y aplica cuando ya se ha originado el frente de combustión, de modo que el modelo es válido para el tiempo en el que ya se formó el combustible sólido,

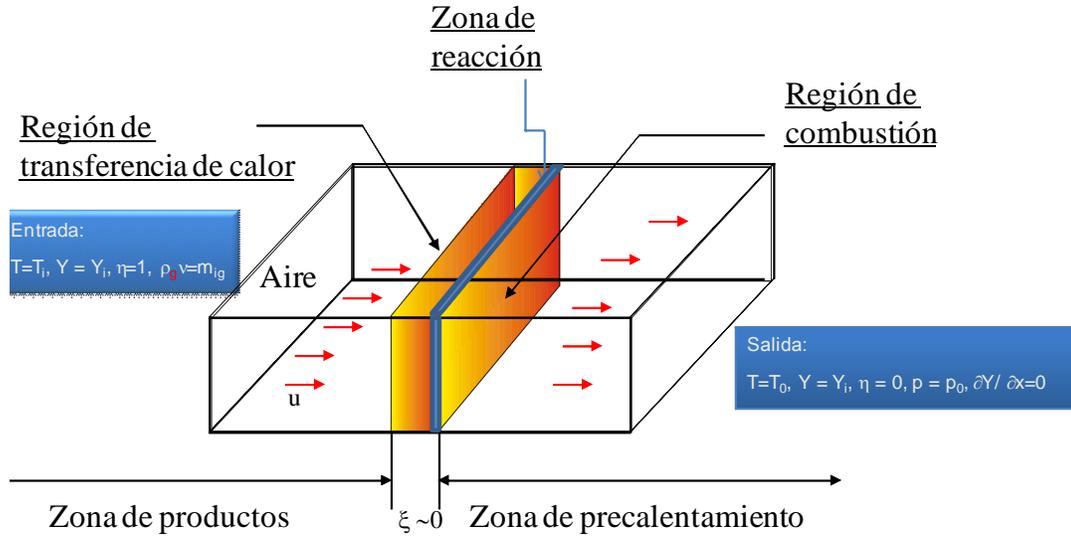


Figura 2: Representación esquemática de las escalas que participan en el problema.

i.e., en la etapa siguiente a las reacciones LTO. Una segunda suposición, es que localmente el combustible se consume totalmente y que hay exceso de oxígeno; consecuentemente la estructura del frente que se espera es onda guiada por la reacción o estructura estándar.

En la entrada (denotada por el subíndice i de inlet), \hat{m}_{i_g} es el flujo másico ($\hat{m}_{i_g} = \rho_g \tilde{v}$), \tilde{T}_i es la temperatura, y \tilde{Y}_i es la fracción de oxígeno inyectado, mientras que a la salida (denotada por o , outlet) \tilde{T}_o , \tilde{p}_o , son la temperatura y presión. Las condiciones de frontera son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 \tilde{x} \rightarrow -\infty : \tilde{T} &= \tilde{T}_i, \tilde{Y} = \tilde{Y}_i, \eta = 1, \rho_g \tilde{v} = \hat{m}_{i_g} \\
 \tilde{x} \rightarrow \infty : \tilde{T} &= \tilde{T}_o, \eta = 0, \tilde{p} = \tilde{p}_o, \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial \tilde{x}} = 0
 \end{aligned}
 \tag{11}$$

Agua arriba, la temperatura es la del medio permeable, la concentración de oxígeno

es alta debido a que en esa zona el O_2 no ha contactado al combustible sólido. Cuando $\tilde{\rho}_f(x, t) \rightarrow \rho_f^0 : \eta = 0$, corresponde al estado inicial y en $\tilde{\rho}_f(x, t) \rightarrow 0 : \eta = 1$ corresponde al consumo completo.

Dado que se están modelando ondas de combustión (aún cuando esta primera aproximación sea para una configuración plana), se debe utilizar un sistema de referencia donde $\tilde{x} = 0$ cuando $\eta = 1/2$. En la estructura estándar, esto denota la posición del frente de combustión, y se puede usar como coordenada de movimiento sujeta al frente, i.e., $\tilde{x} = f(\tilde{t})$. La velocidad de propagación es la derivada de la posición del frente: $f_t(\tilde{t}) = df/d\tilde{t}$.

3.1.1. Definición de escalas y parámetros adimensionales

Existen por lo menos dos métodos en la literatura de combustión para escalar el espacio y el tiempo en la construcción de las variables adimensionales. En uno de ellos, las escalas de espacio y tiempo se relacionan con la velocidad de propagación la cual no se conoce, esto hace que aparezca un parámetro adimensional (igualmente no determinado), llamada número de Damköhler, también conocido como eigenvalor o auto valor de la velocidad de la flama, que aparece multiplicando a la velocidad de reacción. La velocidad de propagación no aparece en las ecuaciones y la determinación del número de Damköhler permite el cálculo de la velocidad de propagación. En el segundo método, la velocidad de propagación se incluye en las ecuaciones escalando el tiempo y el espacio en base a un balance reacción/difusión [12]. El método utilizado en nuestro caso fue el segundo.

Las variaciones de temperatura ocurren en regiones muy estrechas por lo que se refieren como zonas. Una es la *zona de transferencia de calor* y la otra es la *zona de combustión* (ver Fig 2). La *zona de transferencia de calor* es controlada por la transferencia de calor entre el gas y el sólido y la convección por el movimiento del gas, mientras que la *zona de combustión*, es la zona donde los reactantes son llevados a la temperatura de ignición, reaccionan y producen calor. Esta zona puede dividirse en dos zonas: *zona de reacción* y *zona de difusión térmica*.

Las escalas del problema incluyen:

Escala de la zona de reacción (reactivo-difusiva), l_R

$$l_R \equiv \frac{R\tilde{T}_f^2}{E\tilde{T}_0} l_T, Z = \frac{E\tilde{T}_0}{R\tilde{T}_f^2} \Rightarrow l_R = \frac{l_T}{Z} .$$

Escala de la zona de combustión (convectivo-difusiva), l_T

$$l_T \equiv \frac{\alpha_s}{v_c} .$$

Escala de la zona de transferencia de calor (convectivo-difusiva), l_H

$$l_H \equiv \sqrt{\frac{l_P \lambda}{v_c (1-\phi) c_s \rho_s}} .$$

Escala de región de productos, l_p

$$l_p \equiv f(\tilde{t}) .$$

Escala del tamaño de la muestra l_S

$$l_S = L .$$

En el modelo matemático se utilizó como tiempo característico el tiempo de la reacción: $t_c = t_R$ y como longitud característica, la escala de difusión térmica: $l_c = l_T$.

Es conveniente resaltar las siguientes observaciones:

- La escala de la zona de productos l_p , y la escala de la zona de transferencia de calor l_H , se expanden con el tiempo, mientras que las otras permanecen constantes.
- Se supone la siguiente relación de orden en el tamaño de las escalas: $l_R \ll l_T \ll l_H \ll l_p \ll l_S$.
- La razón de escalas de la zona de difusión térmica entre la zona de reacción, es medida a través del número de Zeldovich $\left(Z = \frac{E\tilde{T}_0}{R\tilde{T}_f^2} \right)$. En el límite de número de Zeldovich infinito, la zona de reacción se vuelve tan estrecha que es válido hablar de un frente de reacción.
- En la suposición $l_T \ll l_H \ll l_p$, esta implícito que la solución tienen validez después de un tiempo $t = t_0$, en el que el proceso de ignición no es tan importante y en donde las zonas de temperatura están separadas en el espacio.
- El espesor de la zona de combustión es de orden $O(l_T)$, y el de la zona de transferencia de calor es de orden $O(l_H)$. A pesar de que ambas describen flujo de calor en el proceso, el espesor de la zona de transferencia de calor es mayor que en la zona de combustión,

dado que l_H describe el flujo de calor en una región de productos que se expande con el tiempo; mientras que l_T describe el flujo de calor en la zona de reacción la cual es constante en el tiempo.

- Cada una de las zonas se mueve a diferentes velocidades. Cuando la zona de combustión esta al lado derecho de la región de alta temperatura la estructura de la onda es: estándar o "leading structure". Esta ocurre cuando el gas oxidante esta presente en cantidades suficientes o en exceso, como para consumir todo el combustible presente.

En lo que respecta al espacio y tiempo adimensional, estos están dados por: $\hat{x} = \frac{\tilde{x}}{x_c}$, donde : $x_c \equiv l_c = \frac{\lambda}{(1-\phi)c_s\rho_s v_c}$ y $\hat{t} = \frac{\tilde{t}}{t_c}$, $t_c = t_R = Z \left(\tilde{a}_s^m k_0 \left(\frac{p_i Y_i}{RT} \right)^n \exp\left(-\frac{E}{RT_f}\right) \right)^{-1}$. Por simplicidad se supone que la cinética de reacción es de primer orden, por lo que $m = n = 1$. La relación entre la longitud característica y el tiempo esta dada por $t_c = \frac{l_c}{v_c} = \frac{\alpha_s}{v_c^2}$ = tiempo de reacción y $l_c = \frac{\alpha_s}{v_c}$ = longitud de la escala de combustión. La velocidad adimensional v , esta dada por $v = \frac{\tilde{v}}{u_c}$, donde u_c es la velocidad de inyección del gas, dada por $u_c = \sqrt{\frac{\lambda}{(1-\phi)c_s\rho_s t_c}}$. La temperatura adimensional θ , esta dada por $\theta = \frac{\tilde{T}}{T_0}$, $\theta_f = \frac{\tilde{T}_f}{T_0}$ donde T_c es la temperatura de la onda de combustión (T_f), la cual se desconoce y es parte del problema. La presión adimensional p , esta dada por $p = \frac{\tilde{p}-\tilde{p}_c}{\tilde{p}_{iny}-\tilde{p}_c}$, donde p_c es la presión en la entrada (p_i). Finalmente la densidad característica ρ_c , es la densidad inicial del gas (ρ_{gi}).

Adicionalmente se definen los siguientes parámetros adimensionales:

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{\tilde{m}_{ig}}{\rho_c u_c} & Y &= \frac{\tilde{Y}}{Y_c}, \text{ donde : } Y_c = Y_i & \rho &= \frac{\rho_g}{\rho_c} = \frac{\rho_{gi} \tilde{R} T_0}{p_i} \\
 \mu &= \frac{\tilde{\mu} \rho_f^0}{\rho_c Y_c} & \mu_g &= \frac{\tilde{\mu}_g \rho_f^0}{\rho_c} & \mu_{pg} &= \frac{\tilde{\mu}_{pg} \rho_f^0}{\rho_{gi} Y_c} \\
 D &= \frac{D_0}{\phi \tau} & \kappa &= \frac{\eta_g \alpha_s}{K(\eta)(\tilde{p}_{iny}-\tilde{p}_c)} & \Pi &= \frac{\tilde{p}_{iny}-\tilde{p}_c}{\tilde{p}_c} \\
 a &= \frac{c_g \rho_c}{(1-\phi)c_s \rho_s} & q &= \frac{\tilde{Q} \rho_f^0}{(1-\phi)c_s \rho_s \tilde{T}_0} & \alpha_s &= \frac{\lambda}{(1-\phi)c_s \rho_s} \\
 Le &= \frac{\alpha_s}{D_M} & \Phi &= W t_c & a_s &= \frac{\tilde{a}_s}{a_{s_c}} \\
 a_{s_c} &= \frac{Z \tilde{R} \tilde{T}_0}{t_c k_0 Y_i \tilde{p}_i \exp^{-E/R \tilde{T}_f}} & Pe_T &= C \frac{v_c d_p}{\alpha_s} & Pe_D &= C' Pe_T \\
 Z &= \frac{E T_0}{R T_c^2} & \varepsilon &\equiv \frac{l_T}{l_p} = \frac{u_c t_c}{f(t)}
 \end{aligned}$$

Utilizando las escalas características y los parámetros definidos, las ecuaciones conservativas en su forma adimensional son las siguientes:

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial \rho v}{\partial \hat{x}} = \mu_g \Phi , \quad (12)$$

$$\phi \frac{\partial \rho Y}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial Y \rho v}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[\rho \left(\frac{1}{Le} + Pe_{Dv} \right) \frac{\partial Y}{\partial \hat{x}} \right] - \mu \Phi , \quad (13)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \hat{t}} + a \rho v \frac{\partial \theta}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[(1 + a Pe_T \rho v) \frac{\partial \theta}{\partial \hat{x}} \right] + q \Phi , \quad (14)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \hat{t}} = \Phi , \quad (15)$$

$$\Phi \equiv Z \frac{Y(1 + \Pi p)}{\theta} \exp \left\{ Z \theta_f^2 \left(\frac{1}{\theta_f} - \frac{1}{\theta} \right) \right\} a_s \psi(\eta) , \quad (16)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \hat{x}} = -\kappa v , \quad (17)$$

y

$$\rho \theta = 1 + \Pi p ; \quad (18)$$

con las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} \hat{x} \rightarrow -\infty : \frac{\partial \theta}{\partial \hat{x}} = 0, Y = Y_i, \eta = 1, \rho v = m_i , \\ \hat{x} \rightarrow \infty : \theta = 1, \frac{\partial \hat{Y}}{\partial \hat{x}} = 0, \eta = 0, p = p_o . \end{aligned} \quad (19)$$

Esto implica que para el caso adiabático en la zona de productos $\theta \rightarrow \theta_f$ y en la zona no quemada, $Y \rightarrow Y_b$, siendo θ_f la temperatura de flama adiabática y Y_b , la concentración de oxígeno no quemado, que tienen que determinarse como parte del problema. En el límite cuando la energía de activación tiende al infinito, y para el caso de la estructura estándar, la coordenada espacial adimensional $\hat{x} = f(\hat{t})$, es el punto donde $\eta = 1/2$ i.e., ésta es la posición del frente. Dado que aún no se utiliza éste límite, debe utilizarse una coordenada para congelar el frente de flama. Por ello se define la coordenada ξ en función de la posición del frente $f(\hat{t})$, como:

$$\xi = \hat{x} - f(\hat{t}) , \quad t = \hat{t} \quad (20)$$

y las ecs. (12 – 18) se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho(v - \phi f_t)) = \mu_g \Phi , \quad (21)$$

$$\phi \frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (Y \rho(v - \phi f_t)) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v \right) \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right] - \mu \Phi , \quad (22)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (a \rho v - f_t) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 + a Pe_T \rho v) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right] + q \Phi , \quad (23)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - f_t \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = \Phi , \quad (24)$$

$$v = -\frac{1}{\kappa} \frac{\partial p}{\partial \xi} , \quad (25)$$

$$1 + \Pi p = \rho(1 + \delta \theta) , \quad (26)$$

mientras que las modificaciones correspondientes en las condiciones de frontera fueron las siguientes:

$$\begin{aligned} \xi \rightarrow -\infty : \theta = 1, Y = 1, \eta = 1, \rho_g v = m , \\ \xi \rightarrow \infty : \frac{\partial Y}{\partial \xi} = 0, \theta = 1, \eta = 0 . \end{aligned} \quad (27)$$

Dado que $f(\dot{t})$ es la posición del frente, su derivada, i.e., $\frac{df(\dot{t})}{dt} = f_t$, representa la velocidad de propagación del frente, que a su vez es el auto valor del sistema de ecuaciones.

3.2. *Análisis asintótico*

Visto desde la escala de la zona de combustión, el problema puede verse como si estuviera compuesto por una zona de reacción (interna), inmersa en una zona de combustión (externa). Cuando se aplica el método de las expansiones asintóticas en la zona interna; se obtienen, en el orden principal, condiciones de salto para las variables de la zona de combustión. En este análisis, en la escala completa de la muestra hay una región externa en donde aplican las condiciones de frontera y dos zonas móviles de rápida variación de las propiedades: la zona de combustión, la cual contiene a la zona de reacción, y la zona de transferencia de calor. Estas zonas constituyen el problema interno y lo que está fuera de ellas constituyen el problema externo. La temperatura y la presión son continuas en la zona de reacción, la cual actúa como una fuente de energía y un sumidero de la concentración de oxígeno causando saltos en los flujos de calor y de masa, que deben determinarse. Aprovechando que cada

zona es determinada por diferentes mecanismos, se resolvieron las ecuaciones en el orden principal de cada zona.

En los espacios entre las zonas, se deben aplicar condiciones de pegado que pueden obtenerse expandiendo asintóticamente los coeficientes de las soluciones externas en series de Taylor alrededor de $\xi = 0$ expresado en términos de X y tomando el límite cuando $X \rightarrow \infty$, tal como se muestra en Apéndice D. Una vez obtenidas las condiciones de pegado, se consideró el problema interno en las cercanías de $\xi \sim 0$, lo cual se describe en la siguiente sección.

3.2.1. Zona de Reacción

Cuando Z es muy grande, la reacción actúa como una fuente concentrada de calor y un sumidero de la concentración de oxígeno causando saltos en el flujo de calor y de oxígeno. En la coordenada espacial esta región se localiza en las cercanías de $\xi \sim 0$, de tal modo que para determinar la magnitud de esos saltos, es necesario aplicar una transformación de alargamiento a la coordenada espacial.

Utilizando $X = Z\xi$, en el dominio acotado por el intervalo $-\infty < \xi < \infty$ y la siguiente notación $\Theta, \mathbf{Y}, \mathbf{p}, \rho, \mathbf{v}, \eta$, y \mathbf{f}_t para las variables, en la zona de reacción las ecs. (21-26) se transforman en:

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + Z \frac{\partial}{\partial X} (\rho (\mathbf{v} - \phi \mathbf{f}_t)) = \mu_g \Phi, \quad (28)$$

$$\phi \frac{\partial \rho \mathbf{Y}}{\partial t} + Z \frac{\partial}{\partial X} (\mathbf{Y} \rho (\mathbf{v} - \phi \mathbf{f}_t)) = Z^2 \frac{\partial}{\partial X} \left[\rho \left(\frac{1}{Le} + Pe_D \mathbf{v} \right) \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial X} \right] - \mu \Phi, \quad (29)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + (a \rho \mathbf{v} - f_t) Z \frac{\partial \Theta}{\partial X} = Z^2 \frac{\partial}{\partial X} \left[(1 + a Pe_T \rho \mathbf{v}) \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \right] + q \Phi, \quad (30)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - Z \mathbf{f}_t \frac{\partial \eta}{\partial X} = \Phi, \quad (31)$$

$$\mathbf{v} = -\frac{Z}{\kappa} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial X}, \quad (32)$$

$$\rho \theta = 1 + \mathbf{p} \Pi. \quad (33)$$

La expansión asintótica de las variables $\Theta, \mathbf{Y}, \mathbf{p}, \rho, \mathbf{v}, \eta$, y \mathbf{f}_t en series de Z^{-1} se hizo de

la siguiente manera:

$$\Theta \sim \Theta(X, t) + Z^{-1}\Theta_1(X, t) + \dots, \quad (34)$$

$$\mathbf{Y} \sim \mathbf{Y}_0(X, t) + Z^{-1}\mathbf{Y}_1(X, t) + \dots, \quad (35)$$

$$\mathbf{p} \sim \mathbf{p}_0(X, t) + Z^{-1}\mathbf{p}_1(X, t) + \dots, \quad (36)$$

$$\rho \sim \rho_0(X, t) + Z^{-1}\rho_1(X, t) + \dots, \quad (37)$$

$$\boldsymbol{\eta} \sim \boldsymbol{\eta}_0(X, t) + Z^{-1}\boldsymbol{\eta}_1(X, t) + \dots, \quad (38)$$

$$\mathbf{v} \sim \mathbf{v}_0(X, t) + Z^{-1}\mathbf{v}_1(X, t) + \dots, \quad (39)$$

$$\mathbf{f}_t \sim \mathbf{f}_{t_0}, \quad (40)$$

donde $\Theta(X, t)$ representa la función solución de orden cero o principal de la ec. (30), $Z^{-1}\Theta_1(X, t)$ representa la corrección de primer orden a la solución de la misma ecuación y así sucesivamente para las demás variables y para las demás ecuaciones. El primer paso en el tratamiento analítico, fue sustituir estas expansiones en las ecs. (28-33) y ordenar en términos de potencias de Z^{-1} . El procedimiento se explica para la ec. de continuidad (28).

Continuidad:

Sustituyendo la ec.(31) en (28):

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + Z \frac{\partial}{\partial X} (\rho (\mathbf{v} - \phi \mathbf{f}_t)) = \mu_g \left(\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial t} - Z \mathbf{f}_t \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial X} \right), \quad (41)$$

sustituyendo las expansiones de las soluciones (37)-(40) en (41):

$$\begin{aligned} & \phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_0 + Z^{-1}\rho_1) + Z \frac{\partial}{\partial X} ((\rho_0 + Z^{-1}\rho_1) ((\mathbf{v}_0 + Z^{-1}\mathbf{v}_1) - \phi \mathbf{f}_{t_0})) \\ &= \mu_g \left(\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\eta}_0 + Z^{-1}\boldsymbol{\eta}_1) - Z \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial}{\partial X} (\boldsymbol{\eta}_0 + Z^{-1}\boldsymbol{\eta}_1) \right). \end{aligned} \quad (42)$$

Desarrollando los términos entre paréntesis de la ec. (42) y agrupando en series de potencias de Z , se tiene que el orden principal, que en este caso agrupa a los coeficientes de Z , es de la siguiente forma:

$$\frac{\partial (\rho_0 \mathbf{v}_0)}{\partial X} - \phi \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial (\rho_0)}{\partial X} = -\mu_g \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \boldsymbol{\eta}_0}{\partial X}, \quad (43)$$

mientras que la corrección de primer orden agrupa a los coeficientes de Z^{-1} :

$$\phi \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_1 \mathbf{v}_1)}{\partial X} = \mu_g \frac{\partial \boldsymbol{\eta}_1}{\partial t}. \quad (44)$$

La ec. (43) es no lineal y puede reducirse si se elimina la dependencia de ρ_0 en X , que se traduce en demostrar que ρ_0 es constante en la zona de reacción. Para ello, se hizo el siguiente procedimiento: sustituyendo la expansión a las soluciones de la velocidad y la presión, en la ec. (32) y despejando v_0 :

$$v_0 = -\frac{Z}{\kappa} \frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial X} - \frac{1}{\kappa} \frac{\partial \mathbf{p}_1}{\partial X} - Z^{-1} v_1 , \quad (45)$$

sustituyendo la ec. (45) en (43):

$$-\frac{1}{\kappa} \left(Z \frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \left(\frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial X} \right) \right] - \frac{\partial^2 \mathbf{p}_1}{\partial X^2} \right) - Z^{-1} \frac{\partial v_1}{\partial X} - \phi \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial (\rho_0)}{\partial X} = -\mu_g \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} , \quad (46)$$

multiplicando por Z :

$$-\frac{1}{\kappa} \left(Z^2 \frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \left(\frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial X} \right) \right] - Z \frac{\partial^2 \mathbf{p}_1}{\partial X^2} - \frac{\partial v_1}{\partial X} \right) - Z \phi \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial (\rho_0)}{\partial X} = -Z \mu_g \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} , \quad (47)$$

en el orden $O(Z^2)$ se obtiene:

$$-\frac{1}{\kappa} \frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial X} \right] = 0 . \quad (48)$$

Integrando (48):

$$\frac{1}{\kappa} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial X} = c_1(t) . \quad (49)$$

En esta ecuación se observa que en la zona de reacción y en el orden principal, $\rho_0 \neq \rho_0(X)$, i.e., la densidad es *espacialmente* constante. Ahora, reescribiendo la ec. (49) en términos de (33) e integrando se obtiene:

$$\frac{d\mathbf{p}_0}{dX} = c_1(t) \kappa \frac{\Theta_0}{1 + \Pi \mathbf{p}_0} , \text{ haciendo } g_1(t) = \frac{\Theta_0}{1 + \Pi \mathbf{p}_0} c_1(t) \kappa , \quad (50)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_0}{dX} = g(t) , \Rightarrow \mathbf{p}_0 = g_1(t) X + g_2(t) , \quad (51)$$

que demuestra que en la zona de reacción y en el orden principal, la presión es independiente de la coordenada espacial, i.e., $\mathbf{p}_0 \neq \mathbf{p}_0(X)$.

Regresando a la ec. (43), ahora ya se sabe que $\rho_0 \neq \rho_0(X)$, por lo tanto, esta ecuación se reduce a:

$$\rho_0 \frac{\partial v_0}{\partial X} = -\mu_g \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} . \quad (52)$$

que es de donde se obtendrá la condición de salto para el flujo másico del gas.

Para la ecuación de *Especie*, sustituyendo la expansión de las soluciones (ecs. 35-40) en la ec. (29), desarrollando términos y agrupando los coeficientes en potencias de Z , se tienen que en el orden principal, $O(Z^2)$, esta ecuación se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_0}{\partial X} \right] = 0 . \quad (53)$$

Integrando una vez:

$$\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_0}{\partial X} = G(t) . \quad (54)$$

En la ec. (54), cuando $X \rightarrow \pm\infty$, la concentración de la especie tiende a Y_b , por lo cual $\frac{\partial Y_0}{\partial X} = 0$. De ahí que $G(t) = 0$, entonces:

$$\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_0}{\partial X} = 0 , \quad (55)$$

en consecuencia, la concentración de especie es constante en la zona de reacción, i.e., $\mathbf{Y}_0 \neq \mathbf{Y}_0(X)$.

Continuando con el análisis asintótico de la ec.(29), el orden $O(Z)$, es de la siguiente forma:

$$\mathbf{Y}_0 \left(\rho_0 \frac{\partial v_0}{\partial X} \right) - \frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \right] = \mu \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} . \quad (56)$$

En esta ecuación, se observa que el primer término de la izquierda de la igualdad, es el que se obtuvo del análisis de la ecuación de continuidad, por lo que sustituyendo (52) en (56) se obtiene:

$$-\frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \right] = \mathbf{f}_{t_0} (\mu + \mu_g \mathbf{Y}_0) \frac{\partial \eta_0}{\partial X} , \quad (57)$$

multiplicando (57) por el número de Le , se obtiene:

$$-\frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 (1 + Le Pe_D v_0) \frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \right] = Le \mathbf{f}_{t_0} (\mu + \mu_g \mathbf{Y}_0) \frac{\partial \eta_0}{\partial X} , \quad (58)$$

que relaciona la corrección de primer orden de la concentración de la especie, con la velocidad de propagación del frente y el grado de conversión del combustible.

Para la ecuación de *balance de energía*, aplicando el mismo procedimiento, se observa que en el orden $O(Z^2)$, la ec. (30) es de la forma:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[(1 + aPe_T \rho_0 v_0) \frac{\partial \Theta_0}{\partial X} \right] = 0 , \quad (59)$$

Integrando esta ecuación una vez se obtiene:

$$(1 + aPe_T \rho_0 v_0) \frac{\partial \Theta_0}{\partial X} = F(t) . \quad (60)$$

En (60), cuando $X \rightarrow -\infty : \Theta_0 \rightarrow \theta_f$, por lo que $\frac{\partial \Theta_0}{\partial X} \rightarrow 0$, y en consecuencia $F(t) = 0$. Esto implica que en la zona de reacción y en el orden principal la temperatura es independiente de la coordenada espacial, i.e., $\Theta_0 \neq \Theta_0(X)$.

Continuando con el análisis asintótico, el orden $O(Z)$ de la ec.(30), es de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[(1 + aPe_T \rho_0 v_0) \frac{\partial \Theta_1}{\partial X} \right] = qf_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} , \quad (61)$$

que relaciona la corrección de primer orden en la temperatura con la velocidad de propagación del frente y el grado de conversión del combustible.

El análisis para la *ecuación de conversión del combustible* es el siguiente. Después de sustituir (38 y 40) en (31), en el orden principal, $O(Z)$, se tiene lo siguiente:

$$-f_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} = \Phi , \quad (62)$$

el término Φ , definido en la ec. (16), es el que tiene la dependencia exponencial. Haciendo el mismo análisis asintótico a éste termino, se llega a lo siguiente, en el orden principal, $O(Z)$:

$$\Phi = a_s \frac{\mathbf{Y}_0 (1 + \Pi p_0) \psi(\eta_0)}{\Theta_o} \exp \Theta_1 , \quad (63)$$

de esta manera, la ecuación de conversión de combustible en el orden principal es:

$$\mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} = -a_s \frac{\mathbf{Y}_0 (1 + \Pi p_0) \psi(\eta_0)}{\Theta_o} \exp \Theta_1, \quad (64)$$

que relaciona la velocidad de propagación del frente con las características de medio, como la presión y temperatura, y la cantidad de oxígeno inyectado.

Como puede notarse, en la zona de reacción y en el orden principal, las variables Θ , \mathbf{Y} , \mathbf{p} y ρ , no dependen de la coordenada espacial, i.e., son constantes. Resumiendo, las ecuaciones en la zona de reacción, en el orden principal son:

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial X^2} = -\mu_g \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X}, \quad (65)$$

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D \mathbf{v}_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \right] = -Le \left(\mu \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} - \rho_0 \mathbf{Y}_0 \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial X} \right), \quad (66)$$

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[(1 + aPe_T \rho_0 \mathbf{v}_0) \frac{\partial \Theta_1}{\partial X} \right] = q \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X}, \quad (67)$$

$$y \quad \mathbf{f}_{t_0} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} = -a_s \frac{\mathbf{Y}_0 (1 + \Pi p_0) \psi(\eta_0)}{\Theta_o} \exp \Theta_1. \quad (68)$$

Integrando las ecs. (65-67) en el dominio de la zona de reacción se obtiene:

$$\rho_0 \mathbf{v}_0 = -\mu_g \mathbf{f}_{t_0} \eta_0 \Big|_{-\infty}^{\infty}, \quad (69)$$

$$\rho_0 \left(\frac{1}{Le} + Pe_D \mathbf{v}_0 \right) \frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \Big|_{-\infty}^{\infty} = -Le (\mu + \mathbf{Y}_0 \mu_g) \mathbf{f}_{t_0} \eta_0 \Big|_{-\infty}^{\infty}, \quad (70)$$

$$y \quad (1 + aPe_T \rho_0 \mathbf{v}_0) \frac{\partial \Theta_1}{\partial X} \Big|_{-\infty}^{\infty} = q \mathbf{f}_{t_0} \eta_0 \Big|_{-\infty}^{\infty}. \quad (71)$$

Utilizando las condiciones de frontera, ecs. (27), las condiciones de pegado de las variables externas derivadas en el Apéndice D, y bajo la definición de salto para una variable cualquiera $\omega(x)$: $[\omega]_{-}^{+} = \omega(x=0^{+}) - \omega(x=0^{-})$, en la zona de reacción se obtuvieron las siguientes condiciones de salto:

$$[\theta^0]_{-}^{+} = [Y^0]_{-}^{+} = [P^0]_{-}^{+} = 0, [\eta^0]_{-}^{+} = -1, \quad (72)$$

$$\rho_0 \mathbf{v}_0 \Big|_{X \rightarrow \pm \infty} = [\rho_0 v_0]_{\xi \rightarrow 0^{\pm}} = [m]_{-}^{+} = m_i - m_o = \mu_g f_t, \quad (73)$$

$$\frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \Big|_{X \rightarrow \pm \infty} = \frac{\partial Y^0}{\partial \xi} \Big|_{\xi \rightarrow 0^{\pm}} = \frac{(\mu + Y_b \mu_g)}{(1 + Le Pe_D m)} Le f_t, \quad (74)$$

$$y \quad \frac{\partial \Theta_1}{\partial X} \Big|_{X \rightarrow \pm \infty} = \frac{\partial \theta^0}{\partial \xi} \Big|_{\xi \rightarrow 0^{\pm}} = -\frac{q f_t}{(1 + aPe_T m)}. \quad (75)$$

Con respecto a la ecuación de conversión del combustible (68), también es posible integrarla sin entrar a lo que se conoce como el problema de cerradura [12], que resulta al aplicar el método MEAA al análisis de un problema no estacionario. En el caso particular de la temperatura, que queda como corrección de primer orden, al pretender integrar directamente, se requiere información de la corrección de segundo orden, para la de segundo orden se requiere información de la corrección de tercer orden y así sucesivamente, de manera que se debe resolver el n-ésimo orden para tener información de la corrección de primer orden. Dado que nuestro caso pertenece al de temperatura controlada en $X \rightarrow \infty$ cuando $Y_b > 0$, no se llega a éste problema. La integral de la ec. (68) se obtuvo de la siguiente manera. Aplicando las condiciones de frontera $\frac{\partial \Theta_1}{\partial X} \Big|_{X \rightarrow -\infty} = 0$, $\eta_0|_{X \rightarrow -\infty} = 1$ a la ecuación (71) se obtiene:

$$(1 + aPe_T \rho_0 \nu_0) \frac{\partial \Theta_1}{\partial X} \Big|_{X \rightarrow \infty} = -q\mathbf{f}_{t0} (1 - \eta_0|_{X \rightarrow \infty}) , \quad (76)$$

multiplicando la ec. (76) por (68) se obtiene que:

$$q\mathbf{f}_{t0}^2 \frac{(1 - \eta_0|_{X \rightarrow \infty})}{\psi(\eta_0)} \frac{\partial \eta_0}{\partial X} = (1 + aPe_T m^+) \left\{ \frac{a_s \mathbf{Y}_0 (1 + \Pi p_0)}{\Theta_o} \right\} \exp \Theta_1 \frac{\partial \Theta_1}{\partial X} , \quad (77)$$

la cual permite integrar para η_0 y para Θ_1 :

$$q\mathbf{f}_{t0}^2 \frac{(1 - \eta_0|_{X \rightarrow \infty})}{\psi(\eta_0)} \int_1^0 \frac{\partial \eta_0}{\partial X} dX = (1 + aPe_T m^+) \left\{ \frac{a_s \mathbf{Y}_0 (1 + \Pi p_0)}{\Theta_o} \right\} \int_0^{-\infty} \exp \Theta_1 d\Theta_1 . \quad (78)$$

En la ec. (78), los límites en η , dependen del grado de consumo del combustible, (0, 1), mientras que para Θ_1 , dado que todo lo que multiplica al término exponencial es constante en la zona de reacción, éste termino puede reescribirse como $\int \exp \Theta_1 d\Theta_1$, en donde los límites de integración conforme X avanza en la zona de reacción, son: $\Theta_1(Z \rightarrow -\infty) = 0$, porque detrás del frente ($Z < 0$) no hay reacción y además en esta zona se escaló la temperatura a 1, y $\Theta_1(Z \rightarrow \infty) = -\infty$, porque $\Theta = \Theta_0 + \frac{1}{Z} \Theta_1$, la temperatura decrece delante del frente ($Z > 0$), entonces Θ_1 crece negativamente. De este modo, la integral del término exponencial es $\int_{-\infty}^0 \exp \Theta_1 d\Theta_1 = 1$. Entonces el resultado de integrar la ec. (78) es:

$$\mathbf{f}_{t0}^2 = (1 + aPe_T m^+) \left\{ \frac{a_s \mathbf{Y}_0 (1 + \Pi p_0)}{\int_1^0 \frac{(1 - \eta_0|_{X \rightarrow \infty})}{\psi(\eta_0)} d\eta_0 q \Theta_o} \right\} . \quad (79)$$

Esta ecuación relaciona la velocidad de propagación del frente f_t con los efectos de dispersión y demás cantidades asociadas al problema externo evaluadas en la zona de reacción. Por cuestiones de simplicidad, la integral de η_0 se consideró de orden unidad $O(1)$. Después de hacer el acoplamiento con las variables externas, la condición de salto adicional que corresponde a la velocidad de propagación del frente de la onda de combustión cuya estructura es la estándar, cinéticamente controlada, es:

$$f_{t0}^2 = (1 + aPe_T m^+) \left\{ \frac{a_s Y_b (1 + \Pi p_o)}{q\theta} \right\}, \quad (80)$$

donde:

$$m^+ = m_o = \mu_g f_{t0} + 1, \quad (81)$$

por lo que la ec. (80) queda finalmente como:

$$f_{t0}^2 = [1 + aPe_T (\mu_g f_{t0} + 1)] \left\{ \frac{a_s Y_b (1 + \Pi p_o)}{q\theta_0} \right\}. \quad (82)$$

3.2.2. Zona Externa

La zona de reacción está confinada en una zona muy estrecha, fuera de ella, el término reactivo de las ecuaciones se vuelve despreciable. Como se ha venido mencionando, en la estructura de la onda de propagación existen dos zonas de rápido cambio en las propiedades i.e., ITC (zona de transferencia de calor) e IC (zona de combustión), alrededor de una zona de alta temperatura las cuales se mueven a diferentes velocidades. Se tiene la estructura estándar (leading structure) cuando la velocidad de la zona de combustión es mayor a la de transferencia de calor. En la zona quemada o zona de productos i.e., detrás del frente, la temperatura es alta justo detrás de la zona de reacción y va enfriándose conforme se aleja a la izquierda debido al flujo del aire a menor temperatura y la reacción termina debido al consumo completo del combustible. Del otro lado del frente, en la zona no quemada, la temperatura disminuye debido a que el frente se propaga en un medio de menor temperatura y la velocidad de reacción es exponencialmente pequeña. A través de la zona de reacción aplican las condiciones derivadas anteriormente. El sistema de ecuaciones para la zona externa (problema externo) es:

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho(v - \phi f_t)) = 0, \quad (83)$$

$$\phi \frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (Y \rho(v - \phi f_t)) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v \right) \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right] = 0, \quad (84)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (a \rho v - f_t) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 + a Pe_T \rho v) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right] = 0, \quad (85)$$

y

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - f_t \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = 0. \quad (86)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones es conveniente convertirlo a un problema de perturbación, relacionando todos los parámetros con un único parámetro pequeño ε , que a su vez es una relación de escalas que se define como:

$$\varepsilon = \frac{l_T}{l_p} = \frac{u_c t_c}{f_{t0}} \ll 1, \quad (87)$$

que determina la velocidad de variación de las soluciones. Para ello se definió una escala de tiempo lenta como $\tau = \varepsilon t$, $\tau = O(1)$ y se buscaron soluciones que varíen en esta escala de tiempo. La distancia entre las zonas es larga, mientras que la diferencia en velocidades es de orden $O(1)$. De este modo, el tiempo t representa la escala a la cual la onda se propaga y τ representa la escala a la cual las zonas se separan. La razón $\frac{\tau}{t} = \varepsilon = 1/f(t)$ es muy pequeña [10].

Adicionalmente se definió a $f_1 = \varepsilon f(t)$, como una medida de orden $O(1)$ de la distancia que el gas debe atravesar para llegar al frente y $L_1 = \varepsilon L - f_1$, como una medida de la distancia entre el frente y la salida. Se buscaron soluciones con velocidad de propagación constante en el tiempo (esto significa que la nueva velocidad se moverá en la nueva escala de tiempo lento), la cual fue denotada como $u \equiv f_{1\tau} = f_t$, $f_1 = f_1(\tau)$. En la Figura 3 se esquematiza un perfil de temperatura en donde se muestran los dominios de f_1 y L_1 y la relación de escalas que definen a ε .

La relación entre el parámetro de perturbación y las variables, para más detalle de este procedimiento puede consultarse la referencia [10], fue de la siguiente manera:

$$a = \varepsilon a_1, \quad v = \varepsilon^{-1} v_1, \quad m^i = \varepsilon^{-1} m_{i1}, \quad \kappa = \varepsilon \kappa_1. \quad (88)$$

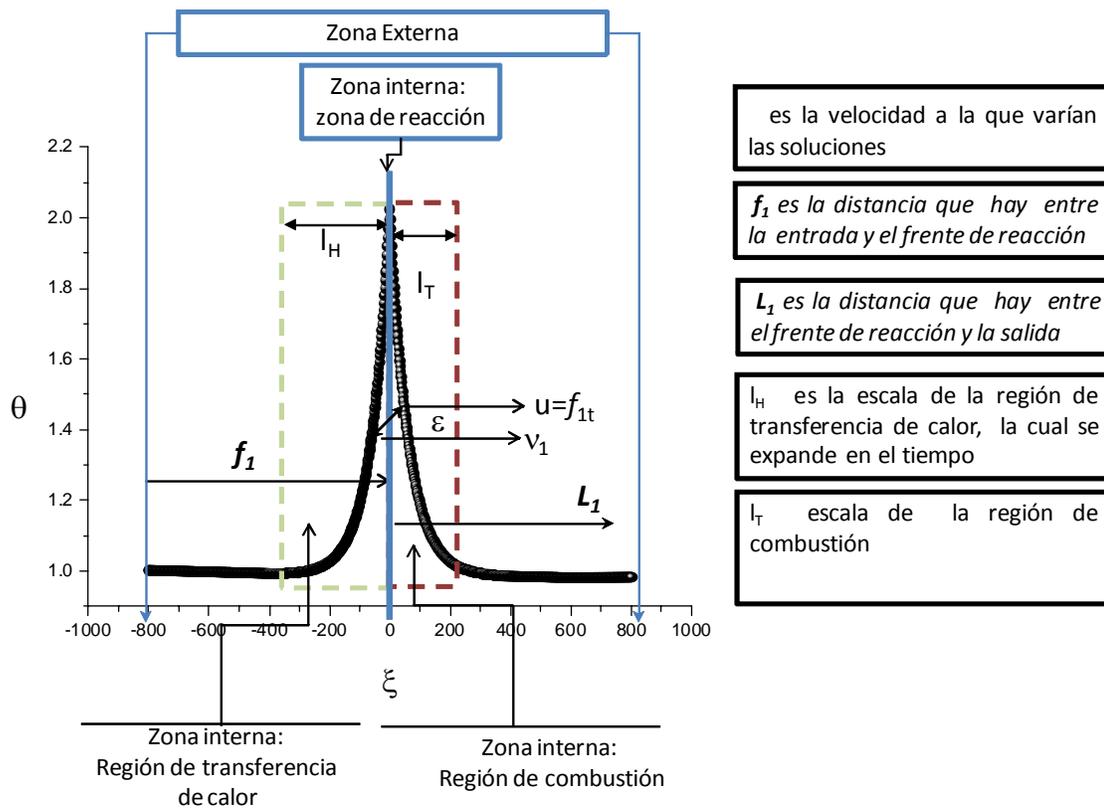


Figura 3: Relación de las escalas con un límite distinguible el cual determina la velocidad a la que varían las soluciones.

De este modo el sistema de ecuaciones del problema de perturbación externo, quedó como sigue:

$$\varepsilon\phi \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{\partial [\rho (\varepsilon^{-1}v_1 - \phi u)]}{\partial \xi} = 0, \quad (89)$$

$$\varepsilon\phi \frac{\partial (Y\rho)}{\partial \tau} + \frac{\partial [Y\rho (\varepsilon^{-1}v_1 - \phi u)]}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho \left(\frac{1}{Le} + \varepsilon^{-1}Pe_D v_1 \right) \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right] = 0, \quad (90)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + (a_1 \rho v_1 - u) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 + a_1 Pe_T \rho v_1) \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right] = 0, \quad (91)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \eta}{\partial \tau} - u \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = 0, \quad (92)$$

$$y \quad \frac{\partial p}{\partial \xi} = -\varepsilon^2 \kappa_1 v_1; \quad (93)$$

con las condiciones de frontera

$$\xi \rightarrow -\infty : \theta = 1, Y = 1, \eta = 1,$$

$$\xi \rightarrow \infty : \theta = 1, Y = Y_b; \eta = 0, \quad (94)$$

y las condiciones de salto:

$$[\theta]_{-}^{+} = [Y]_{-}^{+} = [P]_{-}^{+} = 0, [\eta]_{-}^{+} = -1, \theta_0(0^+) = 1, \quad (95)$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right|_{-}^{+} = -\frac{qu}{(1 + aPe_T m_1)}, \quad (96)$$

$$[m]_{-}^{+} = [\rho v_1]_{-}^{+} = \mu_g u, \quad (97)$$

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial \xi} \right|_{-}^{+} = \frac{(\mu + Y_b \mu_g)}{(1 + Le Pe_D m_1)} Le u, \quad (98)$$

$$u = \sqrt{(1 + aPe_T m) \frac{a_s Y_b (1 + \Pi p_o)}{q\theta}}. \quad (99)$$

Este sistema de ecuaciones se resolvió por separado para el orden principal de las tres regiones. Primero se ubicó y resolvió en lo que podría considerarse como el problema externo-externo i.e., en las fronteras $\xi \rightarrow -\infty$ y $\xi \rightarrow \infty$. Posteriormente se resolvió lo que se consideró como problema interno en la región de transferencia de calor y en el problema interno en la región de combustión. Conviene mencionar que con esta forma de llamar a las diferentes regiones, la zona de reacción sería considerada como el problema interno-interno.

La conveniencia de manejar así a las regiones es por el tratamiento matemático que se puede aplicar haciendo una similitud entre este caso, y un problema de dos capas límites móviles internas, las cuales no son definidas en la frontera con su respectiva zona externa. Una vez que se resolvieron las ecuaciones en cada región, se hizo el acoplamiento entre ellas aplicando condiciones de acoplamiento y las condiciones de salto deducidas en la zona de reacción. Esto se describe en las siguientes secciones.

3.2.2.1. Solución de la Zona Externa

Para la zona externa se escaló la coordenada espacial con el parámetro de perturbación definiendo a la nueva coordenada para esta zona como $\zeta = \varepsilon\xi$ cuyo dominio esta delimitado por el intervalo $f_1 < \zeta < 0, 0 < \zeta < L_1$. Para aplicar el análisis asintótico fue necesario hacer la expansión de las variables $\theta, Y, p, \rho, \eta, v$ y f_t en series asintóticas de ε . La expansión de las variables fue de la siguiente manera:

$$\theta = \theta^0(\zeta, \tau) + \varepsilon\theta^1(\zeta, \tau) + \dots O(\varepsilon^2) , \quad (100)$$

$$Y = Y^0(\zeta, \tau) + \varepsilon Y^1(\zeta, \tau) + \dots O(\varepsilon^2) , \quad (101)$$

$$p = p^0(\zeta, \tau) + \varepsilon p^1(\zeta, \tau) + \dots O(\varepsilon^2) , \quad (102)$$

$$\rho = \rho^0(\zeta, \tau) + \varepsilon \rho^1(\zeta, \tau) + \dots O(\varepsilon^2) , \quad (103)$$

$$\eta = \eta^0(\zeta, \tau) + \varepsilon \eta^1(\zeta, \tau) + \dots O(\varepsilon^2) , \quad (104)$$

$$v = \varepsilon^{-1} v_1(\zeta, \tau) + O(1) , \quad (105)$$

$$\text{y } f_t = \varepsilon^{-1} f_1(\tau) + O(1) . \quad (106)$$

Haciendo el cambio de variable de la coordenada espacial en las ecs. (89-93), y después de sustituir las expansiones (100-106), en el orden principal se llegó a lo siguiente:

$$\frac{d(\rho^0 v_1)}{d\zeta} = 0 , \quad (107)$$

$$\frac{d[Y^0 \rho^0 v_1]}{d\zeta} = 0 , \quad (108)$$

$$\frac{\partial \theta^0}{\partial \tau} + (a_1 \rho^0 v_1 - u) \frac{\partial \theta^0}{\partial \zeta} = 0 , \quad (109)$$

$$\frac{d\eta^0}{d\zeta} = 0 , \quad (110)$$

$$\frac{\partial p^0}{\partial \zeta} = 0 , \quad (111)$$

donde se aprecia que desaparecen los términos de las segundas derivadas, lo que las reduce a ecuaciones homogéneas de primer orden, que permiten una integración directa.

Para la ecuación de *continuidad* la solución es una constante $\rho^0 v_1 = c_5$. Analizando esta solución en el dominio de la región:

$$\lim_{\zeta \rightarrow -\infty} \rho^0 v_1 = m_{i1}; \text{ por lo que } c_5 = m_{i1} , \quad (112)$$

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \rho^0 v_1 = m_{o1}; \text{ por lo que } c_5 = m_{o1} , \quad (113)$$

Para la ecuación *de especies*, la solución es una constante:

$$(\rho^0 v_1) \frac{dY^0}{d\zeta} = 0 \Rightarrow (\rho^0 v_1) Y^0 = c_4 ; \quad (114)$$

en el $\lim_{\zeta \rightarrow -\infty} Y = Y_i$, por lo que utilizando (112) se obtiene que $c_4 = m_{i1} Y^0 = Y_i$. En el otro extremo, i.e., en $\lim_{\zeta \rightarrow \infty} Y = Y_b$, por lo que usando (113), en este intervalo: $c_4 = m_{o1} Y_b$. Entonces se tiene que:

$$\begin{aligned} \lim_{\zeta \rightarrow -\infty} (\rho^0 v_1) Y^0 &= m_{i1} Y_i , \\ \lim_{\zeta \rightarrow \infty} (\rho^0 v_1) Y^0 &= m_{o1} Y_b ; \end{aligned}$$

de la condición de salto del flujo másico, ec. (97), en $\zeta = 0^+ : [\rho^0 v_1]^+ = m_{o1} = \mu_g u + m_{i1}$, por lo que delante del frente de reacción:

$$(\rho^0 v_1) Y^0 (\zeta \rightarrow \infty) = (m_{i1} + \mu_g u) Y_b , \quad (115)$$

Con respecto a la ecuación de la *temperatura*, en el orden principal se infiltró la dependencia de θ con el tiempo por lo que ésta ecuación se trató de diferente manera, aplicando el método de las características. Primero es necesario obtener la forma de $\frac{d\theta}{d\tau}$, para lo cual uso la derivada total de θ :

$$d\theta = \frac{\partial\theta}{\partial\tau}d\tau + \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}d\zeta \Rightarrow \frac{d\theta}{d\tau} = \frac{\partial\theta}{\partial\tau} + \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} \frac{d\zeta}{d\tau} ; \quad (116)$$

comparando la ec. (116) con la ec. (109) se tiene que:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = 0 , \quad (117)$$

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = (a_1\rho^0v_1 - u) . \quad (118)$$

Integrando la ec. (118) se obtiene que:

$$\zeta = \zeta_0 + (a_1\rho^0v_1 - u) \tau , \quad (119)$$

que es una familia de líneas rectas características sobre las cuales la temperatura es constante y se propaga a una velocidad $(a_1\rho^0v_1 - u)$. Suponiendo una condición inicial de la forma:

$$\theta(\zeta, 0) = \theta(\zeta) , \quad (120)$$

Evaluando esta condición para $\tau = 0$ en $\zeta = \zeta_0$

$$\theta(\zeta_0, 0) = \theta(\zeta_0) , \quad (121)$$

de la curva característica:

$$\zeta_0 = \zeta - (a_1\rho^0v_1 - u) \tau . \quad (122)$$

Ahora, dado que a_1 es muy pequeño ($\sim 10^{-4}$), el término $a_1\rho^0v_1 \ll 1$, por lo que:

$$\theta(\tau, \zeta) \approx \theta(\zeta + u\tau) . \quad (123)$$

Aplicando las condiciones de frontera (94), en la ec. (123), se obtiene que:

$$f_1 < \zeta < f_1 \zeta_- : \theta = 1 , \quad (124)$$

$$f_1 \zeta_- < \zeta < 0 : \theta = \theta_f , \quad (125)$$

$$\zeta > 0 : \theta = 1 . \quad (126)$$

que es consistente con la idea de la existencia de tres regiones de temperatura prácticamente constante.

Para la ecuación del consumo de *Combustible*, al integrar la ec. (110), el resultado es una constante $\eta^0 = c_6$, que en el $\lim_{\zeta \rightarrow -\infty} \eta = 1$, y en $\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \eta = 0$.

Finalmente, en la ecuación para la *Presión* el resultado es una constante $p^0 = c_7$, que en el $\lim_{\zeta \rightarrow -\infty} p = p_i$, por lo que $c_7 = p_i$ y en $\lim_{\zeta \rightarrow \infty} p = p_o$, siendo $c_7 = p_o$.

En suma, las soluciones para la zona externa son las siguientes:

$$\rho v (\zeta < 0) = m_i , \quad (127)$$

$$\rho v (\zeta > 0) = m_o , \quad (128)$$

$$Y (\zeta < 0) = Y_i , \quad (129)$$

$$Y (\zeta > 0) = Y_b , \quad (130)$$

$$f_1 < \zeta < f_1 \zeta_- : \theta = 1 , \quad (131)$$

$$f_1 \zeta_- < \zeta < 0 : \theta = \theta_f , \quad (132)$$

$$\zeta > 0 : \theta = 1 , \quad (133)$$

$$\eta (\zeta < 0) = 1 , \quad (134)$$

$$\eta (\zeta > 0) = 0 , \quad (135)$$

$$p (\zeta < 0) = p_i , \quad (136)$$

$$y \quad p (\zeta > 0) = p_o . \quad (137)$$

Donde ζ_- es la fracción de la región de productos con alta temperatura y $f_{1\tau} \zeta_-$ es la posición de la zona de transferencia de calor, la cual ocurre detrás del frente.

3.2.3. Región de Transferencia de Calor

En la estructura estándar, la zona de transferencia de calor se localiza entre la entrada y el frente, es decir, cuando $\xi < 0$. Para el análisis de esta zona se utilizó la misma coordenada espacial que en la zona externa excepto que en la región de transferencia de calor, fue normalizada por la velocidad de propagación de la onda, i.e., con f_1 ; ya que haciendo esto, el término temporal que resulta particularmente en la ecuación para la temperatura, después de hacer el cambio de coordenada y la sustitución de la expansión de la solución en series asintóticas de ε , es de orden superior y con esto se puede eliminar al considerar únicamente el orden principal. Físicamente esto no tiene implicación trascendental ya que equivale a asumir que el comportamiento descrito será el final de una serie de eventos transitorios que conllevan a un estado cuasi-estacionario. Estos estados transitorios pueden describirse mediante soluciones de tipo de transformadas de Laplace (particularmente para la ecuación de la temperatura) aplicando métodos de convolución; sin embargo, esto no entra en los alcances de esta tesis. En el análisis de esta zona se hizo la transformación de la coordenada espacial utilizando la variable de alargamiento $\psi = \frac{\xi - \xi_-}{f_1} \sim O(1)$, siendo ξ_- la posición de la capa límite; se expandió en términos de ε y se buscaron soluciones en el dominio acotado por el intervalo $-\infty < \psi < \infty$. La expansión asintótica fue de la siguiente forma:

$$\theta = \theta^0(\psi, \tau) + \varepsilon\theta^1(\psi, \tau) + \dots, \quad (138)$$

$$Y = Y^0(\psi, \tau) + \varepsilon Y^1(\psi, \tau) + \dots, \quad (139)$$

$$p = p^0(\psi, \tau) + \varepsilon p^1(\psi, \tau) + \dots, \quad (140)$$

$$\rho = \rho^0(\psi, \tau) + \varepsilon \rho^1(\psi, \tau) + \dots, \quad (141)$$

$$\eta = \eta^0(\psi, \tau) + \varepsilon \eta^1(\psi, \tau) + \dots; \quad (142)$$

analizando la derivadas parciales de esta nueva coordenada de alargamiento, se observa que en la derivada temporal hay un término que depende de la coordenada espacial. i.e., $\frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\xi - \xi_-}{f_1^2} f_{1\tau} \frac{\partial}{\partial \psi}$, mientras que las derivadas en ψ , son de la siguiente forma: $\frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{1}{f_1} \frac{\partial}{\partial \psi}$ y $\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{1}{f_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2}$. Para la *ecuación de continuidad*, al hacer el cambio de variable y la sustitución de las expansiones en la ec. (89), se tiene lo siguiente:

$$\varepsilon^2 \phi f_1^2 \frac{\partial \rho}{\partial \tau} - \varepsilon^2 \phi (\xi - \xi_-) f_{1\tau} \frac{\partial (\rho^0 + \varepsilon \rho^1)}{\partial \psi} + f_1 (v_1 - \varepsilon \phi u) \frac{\partial (\rho^0 + \varepsilon \rho^1)}{\partial \psi} = 0 , \quad (143)$$

que en el orden principal, $O(0)$, queda como:

$$-f_1 v_1 \frac{d\rho^0}{d\psi} = 0 , \quad (144)$$

la cual permite una integración directa que resulta como:

$$v_1 \frac{d\rho^0}{d\psi} = 0 \Rightarrow \rho^0 v_1 = c . \quad (145)$$

donde la constante c , se determinó a partir de límite $\lim_{\psi \rightarrow -\infty} \rho^0 v_1 = m_{i1}$, por lo que la solución para (144) es:

$$\rho^0 v_1 = m_{i1} . \quad (146)$$

Para la *ecuación de especie*, el cambio de coordenada y la sustitución de las variables en la ec. (90) queda como:

$$\begin{aligned} & \varepsilon \phi f_1^2 \frac{\partial (Y^0 \rho^0 + \varepsilon \rho^0 Y^1 + \varepsilon \rho^1 Y^0 + \varepsilon^2 \rho^1 Y^1)}{\partial \tau} \\ & + \{ -\varepsilon \phi (\xi - \xi_-) f_{1\tau} + f_1 (\varepsilon^{-1} v_1 - \phi u) \} \frac{\partial (Y^0 \rho^0 + \varepsilon \rho^0 Y^1 + \varepsilon \rho^1 Y^0 + \varepsilon^2 \rho^1 Y^1)}{\partial \psi} \\ & - \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\left\{ \frac{\rho^0}{Le} + Pe_D \rho^0 \varepsilon^{-1} v_1 + \frac{\varepsilon \rho^1}{Le} + Pe_D \rho^1 v_1 \right\} \frac{\partial (Y^0 + \varepsilon Y^1)}{\partial \psi} \right] = 0 , \end{aligned} \quad (147)$$

que en el orden principal $O(0)$, se reduce a:

$$-Le \phi u f_1 \rho^0 \frac{dY^0}{d\psi} = \frac{d}{d\psi} \left[\rho^0 \frac{dY^0}{d\psi} \right] . \quad (148)$$

Haciendo $D = -Le \phi u f_1 \rho^0$, la ec. (148) se puede reescribir como:

$$\int D d\psi = \int \frac{d}{d\psi} \left[\ln \left(\frac{dY^0}{d\psi} \right) \right] , \quad (149)$$

cuya solución es de la forma

$$Y^0 = c_2 + c_1 \exp \{-Le\phi u f_1 \rho^0 \psi\} . \quad (150)$$

En (150), $\lim_{\psi \rightarrow -\infty} Y = Y_i$, por lo que $c_1 = (Y_i - c_2) \exp \{(Le\phi u f_1) \psi\}$, mientras que cuando $\xi \rightarrow 0^-$, $\psi = -\frac{\xi_-}{f_1}$, por lo que en

$\lim_{\psi \rightarrow \infty} Y = Y_i$, entonces $c_2 = Y_i$, lo que hace $c_1 = 0$. Finalmente, la concentración de la especie, i.e., del oxígeno inyectado, en ésta zona esta

dada por:

$$Y = Y_i . \quad (151)$$

Para la ecuación de *energía*, el cambio de variable en la ecuación (91), queda como:

$$\varepsilon f_1^2 \frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \{(\xi - \xi_-) f_{1\tau} + (a_1 \rho v_1 - u) f_1\} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial \psi} \left[(1 + a_1 Pe_T \rho v_1) \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right] = 0 , \quad (152)$$

sustituyendo las expansiones en (152), se obtienen que:

$$\varepsilon f_1^2 \frac{\partial \theta^0}{\partial \tau} + \varepsilon^2 f_1^2 \frac{\partial \theta^1}{\partial \tau} - \{(\xi - \xi_-) f_{1\tau} + (a_1 \rho^0 v_1 + \varepsilon \rho^1 v_1 - u) f_1\} \frac{\partial (\theta^0 + \varepsilon \theta^1)}{\partial \psi} \quad (153)$$

$$- \frac{\partial}{\partial \psi} \left[(1 + a_1 Pe_T \rho^0 v_1 + \varepsilon a_1 Pe_T \rho^1 v_1) \frac{\partial (\theta^0 + \varepsilon \theta^1)}{\partial \psi} \right] = 0 , \quad (154)$$

que en el orden principal $O(0)$, se reduce a:

$$- (a_1 \rho^0 v_1 - u) f_1 \frac{d\theta^0}{d\psi} = \frac{d}{d\psi} \left[(1 + a_1 Pe_T \rho^0 v_1) \frac{d\theta^0}{d\psi} \right] . \quad (155)$$

Haciendo $C = -\frac{(a_1 \rho v_1 - u) f_1}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)}$, la ec. (155) puede reescribirse como:

$$C \int d\psi = \int \frac{d}{d\psi} \ln \left(\frac{d\theta^0}{d\psi} \right) , \quad (156)$$

cuya solución es:

$$\theta^0 = c_2 + c_1 \exp \left\{ -\frac{(a_1 \rho v_1 - u) f_1}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)} \psi \right\} , \quad (157)$$

donde $a \ll 1$, en consecuencia $(a_1 \rho v_1 - u) f_1 < 0$. En $\lim_{\psi \rightarrow -\infty} : \theta = \theta_f$, por lo que $c_2 = \theta_f$, mientras que cuando $\xi \rightarrow 0^-$, $\psi = -\frac{\xi_-}{f_1}$, y

$\lim_{\psi \rightarrow \infty} \theta = 1$, por lo que:

$$1 = \theta_f + c_1 \exp \left\{ -\frac{(a_1 \rho v_1 - u)}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)} \right\} (-\xi_-) , \quad (158)$$

en consecuencia:

$$(1 - \theta_f) \exp \left\{ \frac{(a_1 \rho v_1 - u)}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)} \right\} (-\xi_-) = c_1 ; \quad (159)$$

De ahí que la forma final de la ec. (157) sea:

$$\theta = \theta_i + (1 - \theta_f) \exp \left\{ \frac{(a_1 \rho v_1 - u)}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)} \right\} (-\xi_-) \exp \left\{ -\frac{(a_1 \rho v_1 - u)}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)} \right\} \xi - \xi_- , \quad (160)$$

donde se obtiene que la temperatura en ésta región esta dada por:

$$\theta = \theta_i + (1 - \theta_f) \exp \left\{ -\frac{(a_1 \rho v_1 - u)}{(1 + a_1 Pe_T \rho v_1)} \xi \right\} . \quad (161)$$

Para el caso de la *velocidad de reacción*, y para la ecuación de la presión, al hacer el cambio de variable y sustituir las expansiones en (92) y en (93) respectivamente, se obtiene que:

$$\varepsilon f_1^2 \frac{\partial (\eta^0 + \varepsilon \eta^1)}{\partial \tau} - (\varepsilon (\xi - \xi_-) f_{1\tau} - u f_1) \frac{\partial (\eta^0 + \varepsilon \eta^1)}{\partial \psi} = 0 , \quad (162)$$

$$\frac{dp^0}{d\psi} = -\varepsilon^2 \kappa_1 v_1 f_1 , \quad (163)$$

que en el orden principal $O(0)$, se reducen a:

$$-u f_1 \frac{d\eta^0}{d\psi} = 0 , \quad (164)$$

$$\frac{dp^0}{d\psi} = 0 . \quad (165)$$

Para la ec. (164), la solución es:

$$\eta^0 = c_5 , \quad (166)$$

que en $\lim_{\psi \rightarrow -\infty} \eta = 1$, por lo que $c_5 = 1$, y la solución para esta región es:

$$\eta^0 = 1 , \quad (167)$$

mientras que para la ec. (165), la solución es:

$$p^0 = c_6 , \quad (168)$$

que en $\lim_{\psi \rightarrow -\infty} p = p_i$, por lo que $c_6 = p_i$, y la solución para esta región es:

$$p^0 = p_i . \quad (169)$$

En suma, las soluciones para esta zona, después de regresar a la coordenada principal, fueron:

$$\rho v = m_i, \quad (170)$$

$$Y = Y_i, \quad (171)$$

$$\theta = 1 + (\theta_f - 1) \exp \left\{ -\frac{(a\rho v - u)}{(1 + aPe_T\rho v)} \xi \right\}, \quad (172)$$

$$\eta = 1, \quad (173)$$

$$y \quad p = p_i . \quad (174)$$

3.2.4. Región de Combustión

En el orden principal, la zona de combustión se localiza delante de la región de transferencia de calor. La escala de esta zona es la que se utilizó en las ecuaciones originales por lo que no es necesaria ninguna transformación. Para el análisis asintótico, al igual que en la región de transferencia de calor, se hizo la expansión de las variables en series de ε y se buscaron soluciones en el dominio acotado por el intervalo $-\infty < \xi < \infty$. La expansión de las variables fue de la siguiente manera:

$$\theta = \theta^0(\xi, \tau) + \varepsilon\theta^1(\xi, \tau) + \dots, \quad (175)$$

$$Y = Y^0(\xi, \tau) + \varepsilon Y^1(\xi, \tau) + \dots, \quad (176)$$

$$p = p^0(\xi, \tau) + \varepsilon p^1(\xi, \tau) + \dots, \quad (177)$$

$$\rho = \rho^0(\xi, \tau) + \varepsilon\rho^1(\xi, \tau) + \dots, \quad (178)$$

$$\eta = \eta^0(\xi, \tau) + \varepsilon\eta^1(\xi, \tau) + \dots, \quad (179)$$

$$v = \varepsilon^{-1}v_1(\xi, \tau) + O(1), \quad (180)$$

$$y \quad f_t = \varepsilon^{-1}f_{1t}(\tau) + O(1). \quad (181)$$

Para la *ecuación de continuidad* en esta región, al sustituir las expansiones (178 y 180-181) en la ec. (89), se tienen que:

$$\varepsilon^2\phi\frac{\partial(\rho^0 + \varepsilon\rho^1)}{\partial\tau} + \varepsilon(\varepsilon^{-1}v_1 - \phi\varepsilon^{-1}f_{1\tau})\frac{\partial(\rho^0 + \varepsilon\rho^1)}{\partial\xi} = 0, \quad (182)$$

$$\varepsilon(\varepsilon^{-1}v_1 - \phi\varepsilon^{-1}f_{1\tau})\frac{\partial\rho^0}{\partial\xi} + \varepsilon^2(\varepsilon^{-1}v_1 - \phi\varepsilon^{-1}f_{1\tau})\frac{\partial\rho^1}{\partial\xi} = 0, \quad (183)$$

que en el orden principal $O(0)$, se reduce a:

$$\frac{d}{d\xi}[\rho^0(v_1 - \phi u)] = 0, \quad (184)$$

cuya solución es una constante:

$$\rho^0(v_1 - \phi u) = cte. \quad (185)$$

Cuando $\xi \rightarrow 0^\pm$, $\rho v_1|_-^+ = \mu_g u$, por lo que la constante de la ec. (185), es $cte = \mu_g u - \phi\rho^0 u$ y se tiene que $\rho^0 v_1 = \mu_g u$; sin embargo, cuando $\xi \rightarrow \infty$, $\rho v_1|^+ = \mu_g u + \rho v_1|_-$ y finalmente para esta zona:

$$\rho^0 v_1 = \mu_g u + \rho v_1|_-. \quad (186)$$

Para la *ecuación de especie*, al sustituir las expansiones (176, 178, y 180-181) en la ec. (90), se tiene que

$$(\rho^0 + \varepsilon\rho^1)(\varepsilon^{-1}v_1 - \phi\varepsilon^{-1}f_{1\tau})\frac{\partial}{\partial\xi}(Y^0 + \varepsilon Y^1)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \xi} \left[(\rho^0 + \varepsilon \rho_1) \left(\frac{1}{Le} + Pe_D v \right) \frac{\partial (Y^0 + \varepsilon Y^1)}{\partial \xi} \right] = 0, \quad (187)$$

Después de desarrollar términos y en el orden principal $O(0)$, la ec. (187), se reduce a:

$$\rho^0 (v_1 - \phi u) \frac{\partial Y^0}{\partial \xi} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(\rho^0 + Le Pe_D \rho^0 v_1) \frac{\partial Y^0}{\partial \xi} \right]. \quad (188)$$

Haciendo $F = \frac{Le \rho^0 (v_1 - \phi u)}{(\rho^0 + Le Pe_D \rho^0 v_1)}$ y después de una primera integración, la ec. (188) se puede reescribir como:

$$\ln \left(\frac{dY^0}{d\xi} \right) = F \xi + c_1, \quad (189)$$

cuya solución es:

$$Y^0 = c_1 \exp \left\{ \frac{Le \rho^0 (v_1 - \phi u)}{(\rho^0 + Le Pe_D \rho^0 v_1)} \xi \right\} + c_2. \quad (190)$$

En el $\lim_{\xi \rightarrow -\infty} Y = Y_i$, por lo que en la ec. (190) $c_2 = Y_i$, mientras que en $\lim_{\xi \rightarrow 0^-} Y = Y_b$, y en consecuencia $c_1 = Y_b - Y_i$. por lo que finalmente se tiene que:

$$Y^0 = Y_i + (Y_b - Y_i) \exp \left\{ \frac{Le \rho^0 (v_1 - \phi u)}{(\rho^0 + Le Pe_D \rho^0 v_1)} \xi \right\}. \quad (191)$$

Dado que $\rho(0^-) = v(0^-) = 1$, entonces $m_i = 1$, y de la ec. (191) se tiene que:

$$Y^0 = Y_i + (Y_b - Y_i) \exp \left\{ \frac{Le (1 - \phi u)}{(1 + Le Pe_D)} \xi \right\} \quad (192)$$

Ahora, en el otro extremo, i.e., en $\lim_{\xi \rightarrow 0^+} Y = Y_b$, por lo que $Y_b = c_1 + c_2$. Adicionalmente, en de la condición de frontera en $\xi \rightarrow \infty$, se tiene que $\frac{dY}{d\xi} = 0$, por lo que $c_1 = 0$ y en consecuencia $c_2 = Y_b$, por lo que en esta zona:

$$Y^0 = Y_b \quad (193)$$

que es congruente con el hecho de que después del frente de reacción, la concentración de oxígeno no quemado Y_b , es constante.

Para la *ecuación de la temperatura*, la sustitución de la expansiones (175, 178, y 180-181), en la ec. (91), conduce a la siguiente expresión:

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau} (\theta^0 + \varepsilon \theta^1) + (a_1 \rho^0 v_1 + \varepsilon a_1 \rho^1 v_1 - u) \frac{\partial}{\partial \xi} (\theta^0 + \varepsilon \theta^1)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 + (a_1 P e_T v_1 \rho^0 + \varepsilon a_1 P e_T v_1 \rho^1)) \frac{\partial (\theta^0 + \varepsilon \theta^1)}{\partial \xi} \right] = 0, \quad (194)$$

que después de desarrollar términos y en el orden principal $O(0)$, se reduce a:

$$(a_1 \rho^0 v_1 - u) \frac{d\theta^0}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \left[(1 + a_1 P e_T v_1 \rho^0) \frac{d\theta^0}{d\xi} \right]. \quad (195)$$

Debe hacerse notar que $a_1 \rho^0 v_1 - u < 0$, y $(1 + a_1 P e_T v_1 \rho^0) > 1$, por lo que en el dominio $-\infty < \xi < 0$, la ec. (195), puede reducirse a la siguiente forma:

$$\frac{d^2 \theta^0}{d\xi^2} = 0, \quad (196)$$

cuya solución es:

$$\theta^0 = c_1 \xi + c_2. \quad (197)$$

En $\lim_{\xi \rightarrow -\infty} \frac{d\theta}{d\xi} = 0$, por lo que $c_1 = 0$; mientras que en $\lim_{\xi \rightarrow 0^-} \theta = \theta_f$, entonces $c_2 = \theta_f$. De este modo, la temperatura en este intervalo esta dada por:

$$\theta^0 = \theta_f. \quad (198)$$

Ahora, haciendo $E = \frac{a_1 \rho^0 v_1 - u}{1 + a_1 P e_T v_1 \rho^0}$ e integrando una vez, la ec. (195) puede reescribirse como:

$$\frac{d\theta^0}{d\xi} = c_1 \exp \{E\xi\}, \quad (199)$$

cuya solución es:

$$\theta^0 = c_{10} \exp \left\{ \frac{a_1 \rho^0 v_1 - u}{1 + a_1 P e_T v_1 \rho^0} \xi \right\} + c_{11}. \quad (200)$$

En $\xi = 0^+$, $\left. \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right|_0^+ = -\frac{qu}{(1 + a P e_T m_1)}$, por lo que $c_1 = -\frac{qu}{(a_1 \rho^0 v_1 - u)}$, mientras que $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \theta = 1$, por lo que $c_2 = 1$. entonces la ec. (200) queda como:

$$\theta^0 = 1 - \frac{qu}{a_1 (\rho^0 v_1)^+ - u} \exp \left\{ \frac{a_1 (\rho^0 v_1)^+ - u}{1 + a_1 P e_T (\rho^0 v_1)^+} \xi \right\}; \quad (201)$$

de ahí que la solución completa de la ec. (195) sea:

$$\theta(\xi < 0) = \theta_f, \quad (202)$$

$$\theta(\xi > 0) = 1 - \frac{qu}{a_1 m_{o1} - u} \exp \left\{ \frac{a_1 m_{o1} - u}{1 + a_1 Pe_T m_{o1}} \xi \right\}. \quad (203)$$

En lo que respecta a las ecuaciones para el *consumo del combustible* y de la *presión*, al sustituir las expansiones (177 y 179-181), las ecs. (92) y (93) respectivamente, quedan de la siguiente manera:

$$\varepsilon \frac{(\partial \eta^0 + \varepsilon \partial \eta^1)}{\partial \tau} - (\varepsilon^{-1} f_{1t}) \frac{(\partial \eta^0 + \varepsilon \partial \eta^1)}{\partial \xi} = 0, \quad (204)$$

$$\frac{\partial (p^0 + \varepsilon p^1)}{\partial \xi} = -\varepsilon \kappa_1 v_1, \quad (205)$$

que en el orden principal, $O(0)$ se reducen a a la siguiente forma, respectivamente:

$$-u \frac{d\eta^0}{d\xi} = 0, \quad (206)$$

$$\frac{\partial p^0}{\partial \xi} = 0, \quad (207)$$

cuyas soluciones son constantes:

$$\eta^0 = cte, \quad (208)$$

$$p^0 = cte, \quad (209)$$

Para la ec. (208), en $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \eta = 0$, mientras que para la ec. (209), en $\lim_{\xi \rightarrow \infty} p = p_o$; por lo que las soluciones finales de estas ecuaciones son:

$$\eta^0 = 0, \quad (210)$$

$$p^0 = p_o. \quad (211)$$

En suma, las soluciones de la zona de combustión, como zona interna son:

$$\rho v (\xi \rightarrow -\infty) = m_i \quad (212)$$

$$\rho v (\xi \rightarrow \infty) = m_o = \mu_g u + m_i \quad (213)$$

$$Y (\xi \rightarrow -\infty) = Y_i + (Y_b - Y_i) \exp \left\{ \frac{Le\rho(v - \phi u)}{(\rho + LePe_D\rho v)} \xi \right\} \quad (214)$$

$$Y (\xi \rightarrow \infty) = Y_b \quad (215)$$

$$\theta (\xi \rightarrow -\infty) = \theta_f \quad (216)$$

$$\theta (\xi \rightarrow \infty) = 1 - \frac{qu}{am_o - u} \exp \left\{ \frac{am_o - u}{1 + aPe_T m_o} \xi \right\} \quad (217)$$

$$\eta = 0 \quad (218)$$

$$p = p_o \quad (219)$$

3.2.5. Solución global

La solución final del problema se obtiene combinando las soluciones de las zonas de transferencia de calor y de combustión, con la zona externa aplicando las condiciones de acoplamiento del apéndice D, condiciones de frontera (94) y las condiciones de salto (95-99). El conjunto de soluciones es el siguiente:

$$\rho v = \left\{ \begin{array}{l} m_i, \quad \xi < 0 \\ m_o = \mu_g f_t + m_i, \quad \xi > 0 \end{array} \right\}, \quad (220)$$

$$Y = \left\{ \begin{array}{l} Y_i + (Y_b - Y_i) \exp \left(\frac{Le\rho(v - \phi u)}{(\rho + LePe_D\rho v)} \xi \right), \quad \xi < 0 \\ Y_b, \quad \xi > 0 \end{array} \right\}, \quad (221)$$

$$\theta = \left\{ \begin{array}{l} 1 + (\theta_f - 1) \exp \left\{ -\frac{(am_i - u)}{(1 + aPe_T m_i)} \xi \right\}, \quad \xi < 0 \\ 1 - \frac{qu}{am_o - u} \exp \left(\frac{am_o - u}{1 + aPe_T m_o} \xi \right), \quad \xi > 0 \end{array} \right\}, \quad (222)$$

$$\eta = \left\{ \begin{array}{l} 1, \quad \xi < 0 \\ 0, \quad \xi > 0 \end{array} \right\}, \quad (223)$$

$$y \quad p = p_o . \quad (224)$$

El paso final en el análisis para tener los perfiles completos fue el determinar las magnitudes de θ_f , Y_b , and u , lo cual se describe en la siguiente sección.

3.2.6. Temperatura del frente

De la ec. (222), dado que es continua excepto en el frente, $\xi = 0$, se tiene la siguiente expresión para la temperatura del frente

$$\theta_f = 1 - \frac{qu}{am_o - u} \quad (225)$$

definiendo a $u = V_f$ como la velocidad del frente, y dado que $m_o = \mu_g u + 1$, la ec. para la temperatura del frente se puede reescribirse como:

$$\theta_f = 1 - \frac{qV_f}{am_o - V_f}, \quad (226)$$

la cual puede analizarse para dos casos importantes:

Caso 1: $a \ll 1$, el término de flujo másico es despreciable.

$$\theta_f \approx 1 + q, \quad (227)$$

dado que la temperatura del frente esta definida como $\theta_f = \frac{\tilde{T}_f}{\tilde{T}_0}$, y el contenido calórico del combustible, como $q = \frac{\tilde{Q}\rho_f^0}{(1-\phi)c_s\rho_s\tilde{T}_0}$, de la ec. (226), se llega a la expresión para la temperatura dimensional del frente:

$$\tilde{T}_f = \tilde{T}_0 + \frac{\tilde{Q}\rho_f^0}{(1-\phi)c_s\rho_s}. \quad (228)$$

Caso 2: participa el término de flujo másico. En este caso, la ec. (226) puede reescribirse como:

$$1 - \theta_f = \frac{qV_f}{V_f(a\mu_g - 1) + a}, \quad (229)$$

donde, después de sustituir q , se tiene lo siguiente:

$$\tilde{T}_f = \tilde{T}_0 - \frac{\tilde{Q}\rho_f^0}{(1-\phi)c_s\rho_s T_0 \left(a\mu_g - 1 + \frac{a}{V_f} \right)} \quad (230)$$

En ambos casos \tilde{T}_f es una expresión dimensional de la temperatura adiabática.

3.2.7. Fracción de oxígeno no quemado

Dado que el fenómeno de la combustión in situ no es eficiente al cien por ciento por diferentes factores, entre los que se puede citar el flujo másico alto, la presencia de fracturas en el medio que permitan el rebasamiento del frente por el oxígeno inyectado y pérdidas de calor, en el caso de la estructura estándar del frente, donde hay exceso de gas oxidante, existe una cantidad de oxígeno que no alcanza a consumirse, a la cual se designó como Y_b y que debe determinarse como parte del problema. En esta determinación, para simplificar las ecuaciones, se definió un término de dispersión másica en el que está metido el flujo másico, el valor de dispersión de masa a través del número de Péclet másico, y el número de Lewis, de la siguiente manera:

$$Disp_M = (\rho^0 + LePe_D m^+) , \quad (231)$$

entonces, aplicando la condición de salto para la especie, i.e, la fracción de oxígeno (98), a la solución para Y cuando $\xi < 0$, ec. (221), se tiene lo siguiente:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \xi} \left(Y^i + (Y_b - Y^i) \exp \left\{ \frac{Le\rho^0 (v_1 - \phi V_f)}{Disp_M} \xi \right\} \right) \right|_{0^+} = \frac{(\mu + Y_b \mu_g)}{Disp_M} LeV_f ,$$

donde después de obtener la derivada, ordenando términos, y dado $Y_i = 1, \phi \ll 1$, se obtiene que:

$$Y_b \approx \frac{1 - \mu V_f}{1 + \mu_g V_f} , \quad (232)$$

que relaciona la cantidad de oxígeno no quemado, con las magnitudes del combustible quemado, del gas producido y con la velocidad del frente de combustión.

Cabe señalar que las expresiones obtenidas para θ_f y Y_b son similares a las obtenidas por Akkutlu et al. [4] sin los efectos dispersivos, lo que significa que los efectos de dispersión térmica y de masa entran en el sistema por la expresión de velocidad del frente, lo cual es consistente con la teoría de dispersión hidrodinámica.

3.2.8. Velocidad del frente

La obtención de la velocidad del frente $u(f_t) = V_f$ se hizo bajo la suposición de que la presión de inyección es mayor que la presión en la entrada, i.e. cuando $\Pi \ll 1$, entonces de la ec. (99), se tienen que:

$$V_f = \left[(1 + aPe_T m_o) \frac{a_s Y_b}{q\theta_f} \right]^{1/2}, \quad (233)$$

definiendo al término dispersivo, como $Disp_T = (1 + aPe_T m_o)$, y dado que $m_o = \mu_g V_f + 1$, entonces se puede escribir que

$$Disp_T = (1 + aPe_T \mu_g V_f + aPe_T), \quad (234)$$

y en consecuencia la ec. (233) puede expresarse de la siguiente manera:

$$V_f = \left[Disp_T \frac{a_s Y_b}{q\theta_f} \right]^{1/2}. \quad (235)$$

En esta ecuación, el término del área específica adimensional, a_s , fue adimensionalizado con $a_s = \frac{\tilde{a}_s}{a_{sc}}$, donde el area característica esta dada por

$$a_{sc} = \frac{Z R \tilde{T}_0}{t_c k_0 Y_i \tilde{p}_i \exp \left\{ -\frac{E}{R \tilde{T}_f} \right\}}; \quad (236)$$

donde a su vez el tiempo característico, t_c , esta dado por $t_c = \frac{\alpha_s}{v_i^2}$, y el número de Zeldovich por $Z = \frac{E \tilde{T}_0}{R \tilde{T}_f^2}$. Así que se puede escribir la ec. (236) de la siguiente manera:

$$a_s = \frac{\tilde{a}_s}{a_{sc}} = \frac{\tilde{a}_s \alpha_s k_0 Y_i \tilde{p}_i \theta_f^2}{E v_i^2} \exp \left\{ -\frac{E}{R \tilde{T}_0} \frac{1}{\theta_f} \right\}. \quad (237)$$

Sustituyendo el término de a_s , ec. (237) en (235), se tiene que:

$$V_f = \left[Disp_T \frac{\tilde{a}_s \alpha_s k_0 Y_i \tilde{p}_i}{q E v_i^2} \theta_f \exp \left\{ -\frac{E}{R \tilde{T}_0} \frac{1}{\theta_f} \right\} [Y_b] \right]^{1/2}. \quad (238)$$

Ahora, si hacemos $\mathcal{L} = \frac{\tilde{a}_s \alpha_s k_0 Y_i \tilde{p}_i}{q E v_i^2}$, la ec. (238) se puede reducir a la siguiente expresión:

$$V_f = \left[Disp_T \mathcal{L} \theta_f \exp \left\{ -\frac{\gamma}{\theta_f} \right\} [Y_b] \right]^{1/2}, \quad (239)$$

donde $\gamma = \frac{E}{RT_0}$ es el número de Arrhenius. Haciendo $\Xi(\theta_f) = \mathcal{L}\theta_f \exp\left\{-\frac{\gamma}{\theta_f}\right\}$ la expresión entre corchetes de la ec. (239), con fines de reducción, esta ecuación para la velocidad de propagación queda finalmente como:

$$V_f^2 = Disp \Xi(\theta_f) Y_b , \quad (240)$$

donde, en el primer término está medido el efecto dispersivo, mientras que en el término, $\Xi(\theta_f)$ se concentran los efectos de la temperatura, la concentración de oxígeno inyectado, la presión inicial del sistema, la velocidad de inyección del gas y la porosidad del medio. Finalmente, en Y_b , está contenido el efecto de la cantidad de combustible consumido y de gas producido. En este punto del análisis, se tiene un sistema de tres ecuaciones algebraicas acoplado, con tres incógnitas, el cual fue resuelto numéricamente y los resultados son presentados en la siguiente sección.

Capítulo IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la solución de la ecuación (240), después de sustituir el término de la concentración de oxígeno no quemada Y_b , se obtiene la siguiente ecuación cúbica:

$$V_f^3 + \frac{(1 + \Xi \mu a P e_T \mu_g)}{\mu_g} V_f^2 - \frac{\Xi (a P e_T (\mu_g - \mu) - \mu)}{\mu_g} V_f - \frac{\Xi (1 + a P e_T)}{\mu_g} = 0 . \quad (241)$$

Para resolver numéricamente esta ecuación, se definieron los siguientes coeficientes para los términos cuadrático, lineal e independiente respectivamente:

$$A = \frac{(1 + \Xi a P e_T \mu \mu_g)}{\mu_g} , \quad (242)$$

$$B = \frac{\Xi (a P e_T (\mu - \mu_g) + \mu)}{\mu_g} , \quad (243)$$

$$C = -\frac{\Xi (1 + a P e_T)}{\mu_g} , \quad (244)$$

con lo cual la ec. (241) se puede reescribir como:

$$V_f^3 + A V_f^2 + B V_f + C = 0 , \quad (245)$$

que fue resuelta numéricamente por el método de Cardano y en todos los casos, de las tres raíces que se obtienen como solución, únicamente la raíz real y positiva fue considerada físicamente viable. Los valores de las variables físico químicas, termo físicas y de transporte utilizadas en la soluciones, se muestran en el Cuadro 1 y corresponden a valores típicos para procesos de combustión in situ en un medio poroso. En el Cuadro 2 se presentan los parámetros adimensionales directamente calculados con información del Cuadro 1 .

En las siguientes secciones se presentan resultados en la determinación de los efectos de la dispersión térmica y de masa en las principales variables que determinan la estabilidad y el éxito de un proceso CIS: velocidad del frente V_f , temperatura del frente θ_f y concentración

Parámetro	Valor	Unidades
\tilde{Q}	39542	kJ/kg de combustible
E	$7,35 \times 10^4$	kJ/kmol
R	8,314	kJ/kmol – K
\tilde{a}_s	$1,41 \times 10^5$	m ² /m ³
k_0	227	kW – m/atm – kmol
\tilde{T}_0	373,15	K
\tilde{p}_i	1,0	atm
\tilde{p}_{iny}	1,2	atm
Y_i	1,0	kg/kg
D_0	$2,014 \times 10^{-6}$	m ² /s
λ	$8,654 \times 10^{-4}$	kW/m – K
ϕ	0,3	%
$\rho_{gi}c_g$	1,2339	kJ/m ³ – K
$\rho_s c_s$	2874,2857	kJ/m ³ – K
ρ_{gi}	1,2254	kg/m ³
η_g	$1,73 \times 10^{-5}$	cP
v_i	$1,157 \times 10^{-3}$	m/s
M_f	235	kg/kmol
$\psi(\eta)$	$1 - \eta$	
H/C	1,65	adimensional
$\tilde{\mu}$	3,018	
$\tilde{\mu}_g$	1,0	
d_p	1×10^{-3}	m
τ	1,5	
K	$2,5 \times 10^{-7}$	m ²

Cuadro 1: Valores de los parámetros utilizados en la solución numérica. Fuente Akkutlu et al. [4].

Parámetro adimensional	Valor
a	$6,132 \times 10^{-4}$
q	1,0121
μ	47,3319
μ_g	15,6832
α_s	$4,30 \times 10^{-7}$
γ	23,69
κ	$6,0 \times 10^{-5}$
Π	0,2
Le	0,2135
Z	5,851

Cuadro 2: Parámetros adimensionales determinados con información de la Tabla 1.

de oxígeno no quemado Y_b , así como la visualización de los perfiles espaciales de temperatura y concentración de oxígeno bajo diferentes valores de Pe_T y Pe_D respectivamente. Adicionalmente, aprovechando el programa de la solución numérica, se evaluó el efecto de algunas de las variables críticas que intervienen en el proceso CIS como la porosidad del medio ϕ , la temperatura inicial del medio T_0 , la concentración de oxígeno inyectada Y_i , y la concentración inicial depositada del combustible sólido a través de ρ_f^0 . Se comparó el efecto que tiene cada variable cuando los efectos de dispersión son despreciables y cuando no lo son i.e., cuando $Pe_T = Pe_D = 0$ y cuando $Pe_T \neq Pe_D \neq 0$ respectivamente. En adelante, se referirán como ambientes no dispersivo y dispersivo respectivamente.

4.1. Velocidad del frente de combustión

En la Figura 4, se presenta el comportamiento adimensional de la velocidad del frente de combustión en función de la velocidad de inyección, para un caso adiabático estacionario de un proceso CIS, en un ambiente no dispersivo ($Pe_T = 0$). Puede apreciarse que a velocidades de inyección bajas ($\nu < 0,3$ en unidades adimensionales, ua), el incremento en V_f es proporcional al incremento en la velocidad de inyección. En este caso se dice que el régimen de solución es estequiométrico. Mientras que con $\nu > 0,3$ la velocidad del frente se vuelve independiente de la velocidad de inyección, en este caso el régimen de solución es cinético. Debe señalarse que en esta figura, y en general para todas las de velocidad del frente, V_f fue normalizada con la velocidad de inyección, por lo que es inversamente proporcional cuando se transforma en unidades dimensionales, por esta razón, la aparente caída en la velocidad del frente, es en realidad un incremento, como se muestra en el recuadro superior de la Fig. 4.

Como se hizo mención, este resultado corresponde al caso cuando $Pe_T = 0$, que es consistente con los resultados de Akkutlu et al.[4], para el caso adiabático estacionario, en donde hay soluciones únicas para la velocidad y la temperatura del frente. Los resultados para la velocidad del frente cuando se considera un ambiente dispersivo, i.e., cuando $Pe_T \neq 0$, se presentan a continuación.

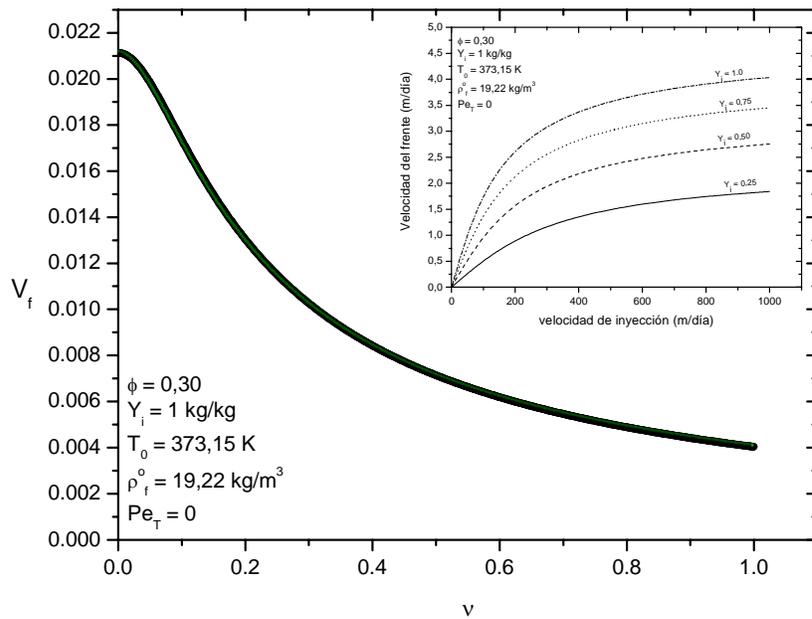


Figura 4: Velocidad adimensional del frente de combustión en función de la velocidad de inyección en un caso adiabático estacionario en un proceso CIS. En el recuadro superior se presentan el comportamiento cuando se considera las variables dimensionales (i.e., con la velocidad del frente, u y de inyección v , ambas en m/día). Esto para tres valores diferentes de oxígeno inyectado.

4.1.1. Efectos de dispersión en la velocidad del frente de combustión

En la Figura 5, se presenta el comportamiento de la velocidad adimensional del frente de combustión en función de la velocidad de inyección para diferentes ambientes de dispersión térmica. Puede observarse que cuando $Pe = 0$, el comportamiento es muy similar al observado en la Figura 4; sin embargo, existe un incremento gradual en V_f , cuando aumenta el valor del Pe_T , lo cual equivale a evaluar el comportamiento de V_f en un medio en donde las heterogeneidades, modeladas a través de la dispersión térmica, son altas. Si observáramos esta curva desde un punto constante en la velocidad de inyección, se observaría que este incremento en la velocidad del frente, es de naturaleza exponencial como se muestra en la Figura 6. A valores de $Pe_T < 1000$, el incremento es suave y después de este valor, la velocidad del frente se dispara. En analogía con la estratificación del número de Péclet de Sahimi [27], en el intervalo $0 < Pe_T < 100$ el régimen es difusivo, en $100 < Pe_T < 1000$, se considera un estado de transición, mientras que a $Pe_T > 1000$, el régimen es puramente dispersivo.

Dentro del estudio del comportamiento de la velocidad del frente en un ambiente puramente dispersivo ($Pe_T = 5000$), se determinó el efecto que tiene la variación de dos propiedades del medio: ϕ y T_0 , y dos propiedades de los fluidos: ρ_f^0 y Y_i . En el caso de ϕ y T_0 , la variación de estas propiedades se hizo en base a los valores observados en los yacimientos de petróleo. Para ϕ , se tomaron valores entre 10 % y 47 % (señalando que cuando $\phi > 47$ % corresponde a empacamientos de esferas), para la T_0 se consideraron valores entre $100^\circ C$ y $130^\circ C$, que corresponden a las temperaturas de los yacimientos más importantes de nuestro país. Mientras que para Y_i , se evaluaron valores entre 0,50 kg y 1 kg de oxígeno por kg de combustible, y para ρ_f^0 , se consideraron valores entre 10 kg/m^3 y 40 kg/m^3 . En las Figuras 7-10, se presentan los resultados de las corridas numéricas para cada propiedad. En ellas se observó que la dependencia existente entre estas propiedades y la velocidad del frente, es directamente proporcional en todos los casos. Las observaciones para ϕ, ρ_f^0 , son consistentes con la teoría de flujo de fluidos en medios porosos y con la teoría de combustión, respectivamente; sin embargo, lo observado al variar T_0 y Y_i , es un resultado nuevo.

Una forma de observar los efectos que tienen las diferentes variables ϕ, T_0, Y_i y ρ_f^0 en V_f ,

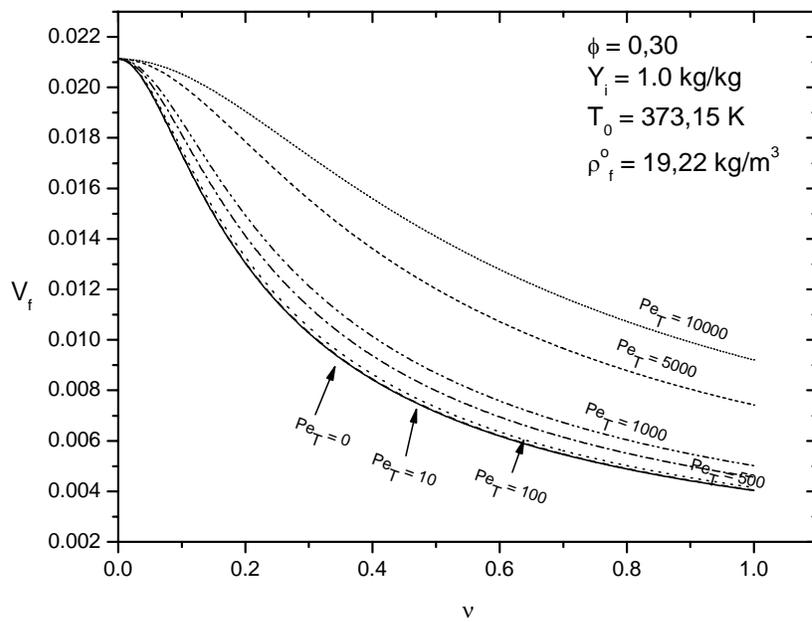


Figura 5: Velocidad adimensional del frente de combustión en función del número de Péclet en un proceso CIS para un caso adiabático estacionario y unidimensional.

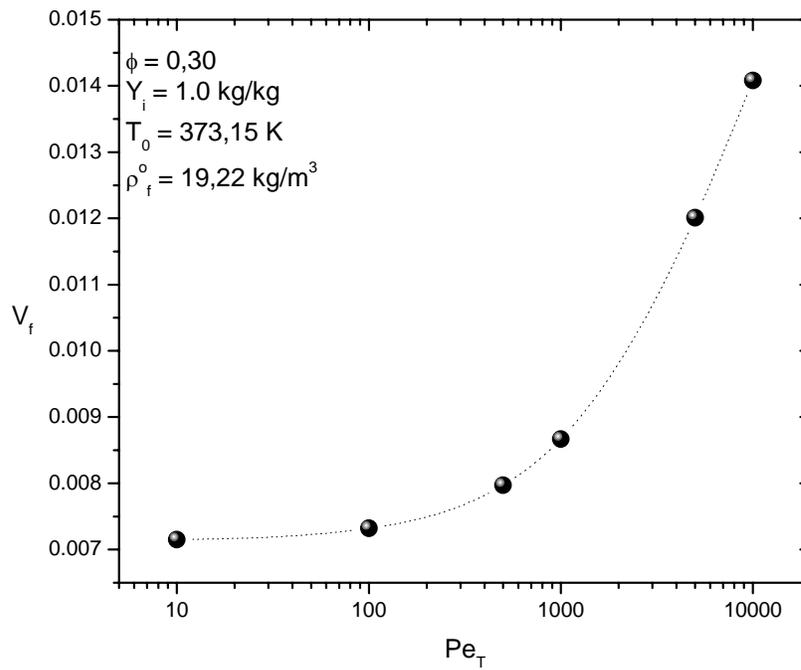


Figura 6: Comportamiento de la velocidad de propagación del frente de combustión en función del ambiente dispersivo, causado por la dispersión térmica modelada a través del número Pe_T , para el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

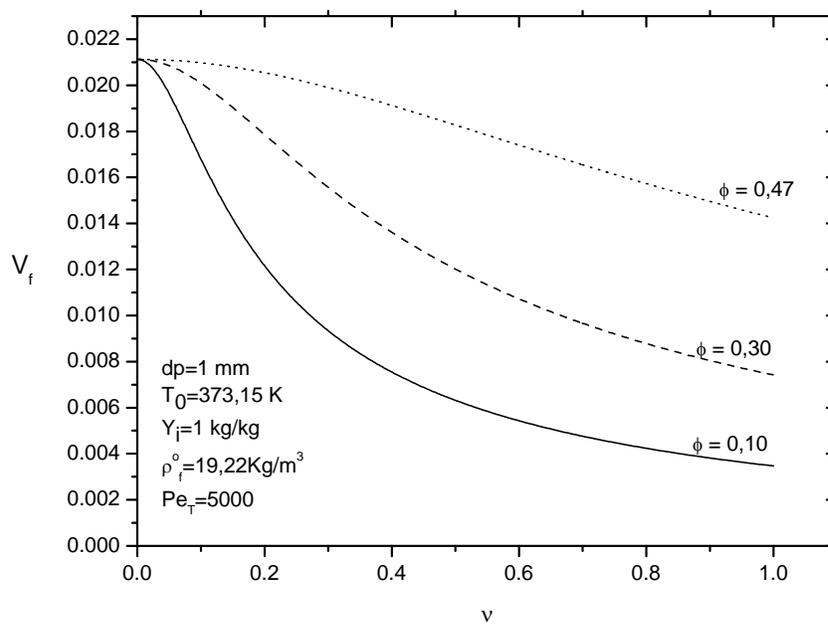


Figura 7: Velocidad adimensional del frente de combustión en función de la velocidad de inyección en un caso adiabático estacionario en un proceso CIS, para diferentes valores de del porosidad (ϕ) del medio.

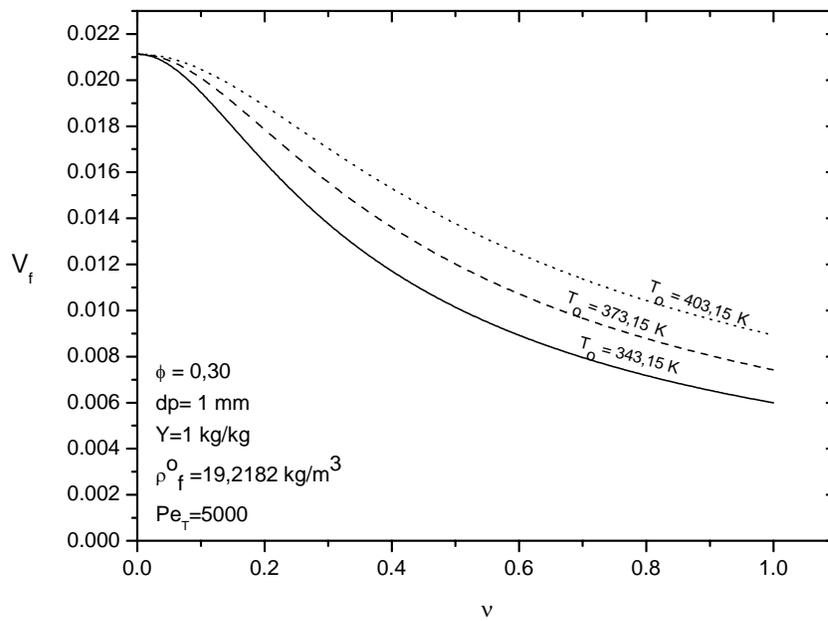


Figura 8: Velocidad adimensional del frente de combustión en función de la velocidad de inyección en un caso adiabático estacionario en un proceso CIS, para diferentes valores de temperatura inicial (T_0) del medio.

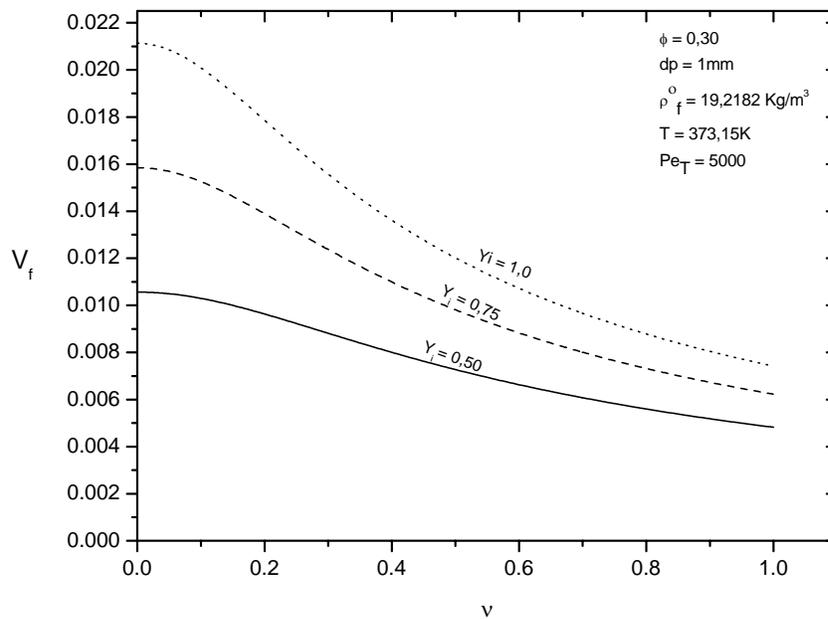


Figura 9: Velocidad adimensional del frente de combustión en función de la velocidad de inyección en un caso adiabático estacionario en un proceso CIS, para diferentes valores de concentración de oxígeno inyectado (Y_i).

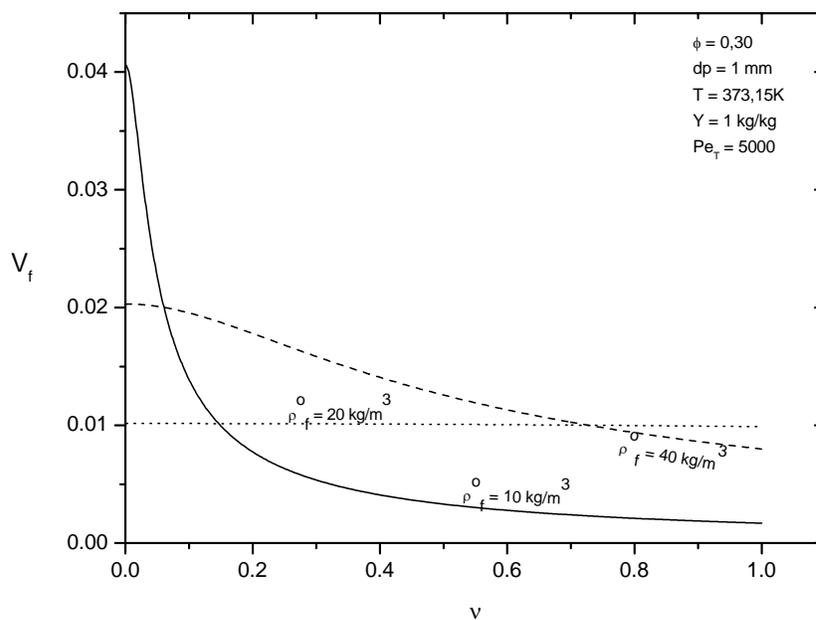


Figura 10: Velocidad adimensional del frente de combustión en función de la velocidad de inyección en un caso adiabático estacionario en un proceso CIS, para diferentes valores de cantidad inicial de combustible semisólido (ρ_f^0) depositado en el medio poroso.

es a través de figuras en 3-D, que pueden ser construidas a partir de las Figuras 7-10, bajo diferentes ambientes dispersivos. Para ello se utilizó una velocidad inyección de referencia de $5,78 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ (500 m/día). En el eje horizontal se colocó la escala del número de Pe_T , en la escala vertical se colocó la velocidad del frente y en el eje de las Z , la variable a considerar. De este modo se puede ver el efecto individual de cada variable en la velocidad del frente (sistema coordenado ZY), para diferentes ambientes dispersivos (ejes XZY), en una sola gráfica. En la Figura 11 se puede observar el efecto de la porosidad ϕ , en la velocidad de propagación del frente V_f , bajo diferentes condiciones de dispersión térmica, en un caso adiabático estacionario de un proceso de CIS. Puede apreciarse que por sí misma, la porosidad incrementa la velocidad del frente. Este efecto es ligeramente mejorado en un ambiente dispersivo y se mejorado cuando el ambiente es fuertemente dispersivo. Un comportamiento similar se observa cuando se hace variar la concentración de oxígeno inyectado Y_i , (cf. Figura 12) y la temperatura inicial del medio T_0 , (Figura 13) en diferentes ambientes de dispersión de masa. En lo que respecta a la variación de la concentración inicial de combustible depositado en el medio (producto de etapas previas reacciones de oxidación a baja temperatura, ver Apéndice B) el comportamiento de la velocidad del frente es singular (ver Figura 14), ya que en ambientes no dispersivos, y aún en aquellos ligeramente dispersivos ($Pe_T < 1000$), el incremento en V_f es proporcional al incremento de ρ_f^0 . Sin embargo cuando el ambiente es fuertemente dispersivo ($Pe_T > 5000$) hay una concentración crítica de combustible ($\rho_f^0 = 20 \text{ kg/m}^3$) en la cual se obtiene un máximo en la velocidad del frente.

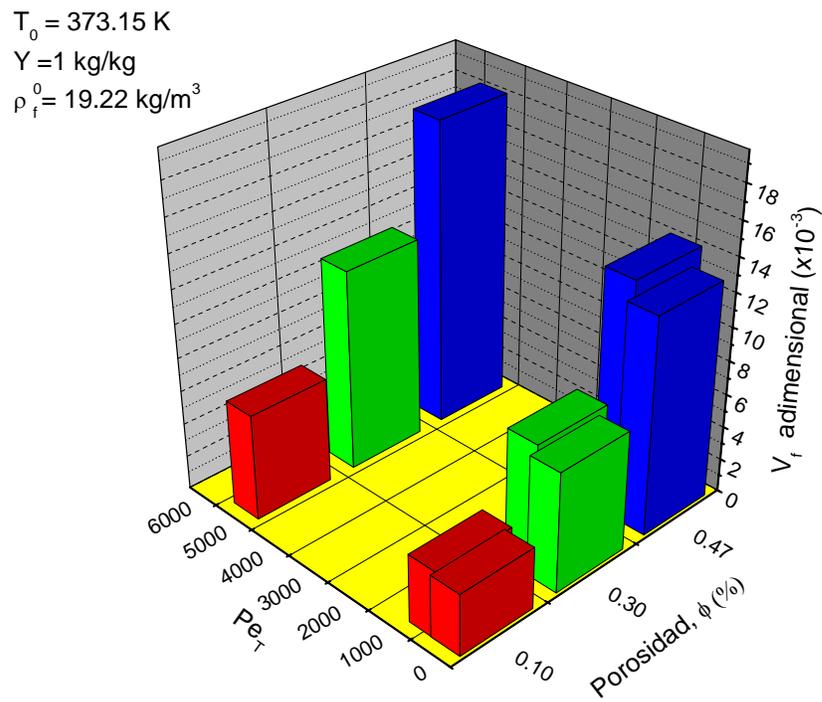


Figura 11: Efectos de la porosidad, ϕ (%) del medio, en la velocidad adimensional del frente de combustión bajo tres escenarios de dispersión térmica.

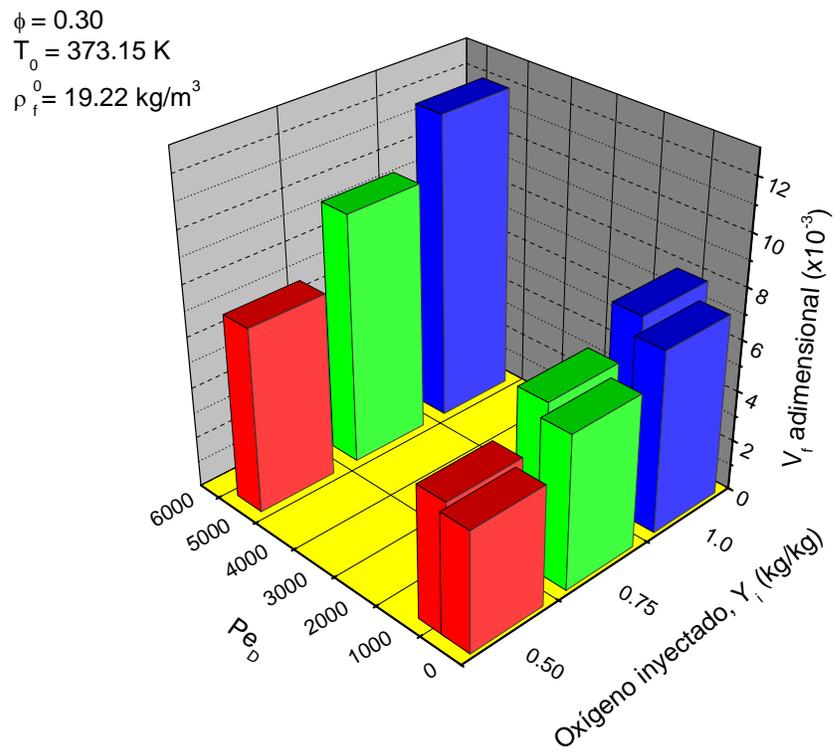


Figura 12: Efectos de la concentración de oxígeno inyectado, Y_i , en la velocidad adimensional del frente de combustión bajo tres escenarios de dispersión térmica.

$\phi = 0.30$
 $Y = 1 \text{ kg/kg}$
 $\rho_i^0 = 19.22 \text{ kg/m}^3$

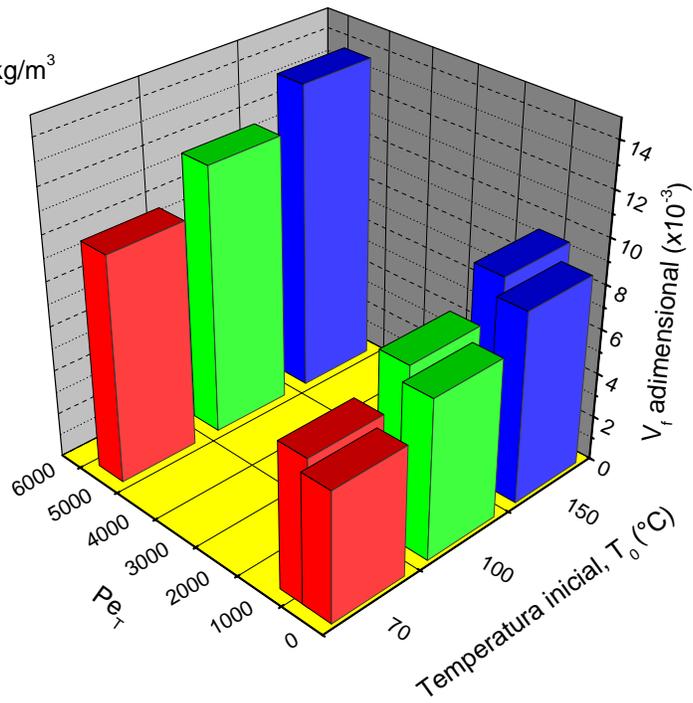


Figura 13: Efectos de la temperatura inicial del medio T_0 ($^{\circ}\text{C}$), en la velocidad adimensional del frente de combustión bajo tres escenarios de dispersión térmica.

$\phi = 0.30$
 $T_0 = 373.15 \text{ K}$
 $Y = 1 \text{ kg/kg}$

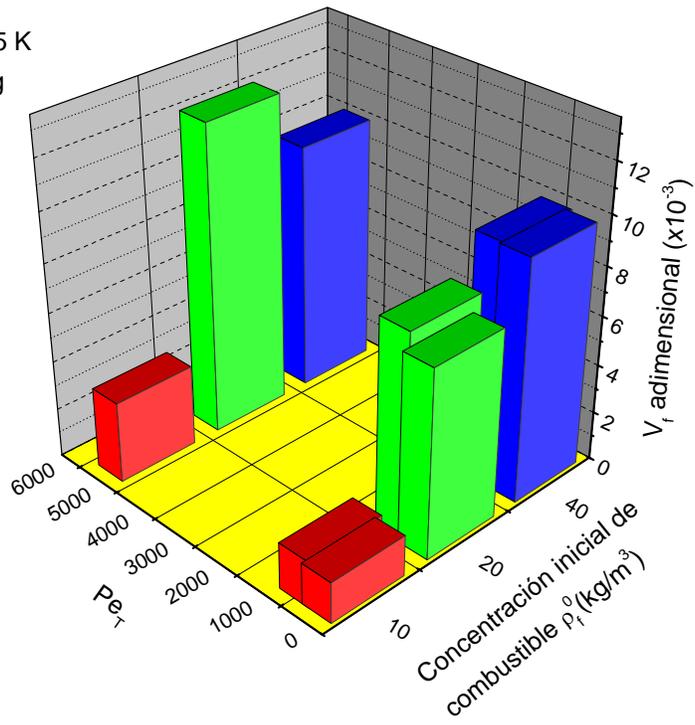


Figura 14: Efectos de la concentración inicial del combustible a quemar ρ_f^0 (kg/m^3), en la velocidad adimensional del frente de combustión bajo tres escenarios de dispersión térmica.

	Velocidad adimensional del frente de combustión, $V_f (\times 10^{-3})$											
Pe_T	ϕ (%)			T_0 ($^{\circ}C$)			Y_i (kg/kg)			ρ_f^0 (kg/m ³)		
	0.10	0.30	0.47	70	100	150	0.50	0.75	1.0	10	20	40
0	3.7	7.1	12.9	5.8	7.1	8.6	4.7	6.0	7.1	1.7	7.6	9.8
500	4.0	7.9	14.2	6.5	7.9	9.5	5.2	6.7	8.0	1.9	8.5	9.9
5000	6.3	12.0	18.3	10.1	12.0	13.8	7.2	9.8	12.0	3.3	12.6	10.0

Cuadro 3: Velocidad del frente en función de cuatro variables críticas en un proceso de combustión in situ directa en un medio poroso, para tres escenarios de dispersión térmica.

Haciendo un comparativo del efecto individual de cada variable en la velocidad del frente, en el Cuadro 3 se resume la velocidad del frente en función de cada variable para los tres escenarios de dispersión térmica. En términos globales se puede decir que en el caso no dispersivo la sensibilidad de la velocidad del frente con respecto a cada variable lleva el siguiente orden: $Y_i \leq T_0 \ll \rho_f^0 < \phi$. Mientras que en el ambiente fuertemente dispersivo, el orden es: $T_0 < Y_i < \rho_f^0 \ll \phi$. En suma, se observa que la velocidad del frente tiene una relación directamente proporcional con todas las variables evaluadas.

4.2. Fracción de oxígeno no quemada

Aplicando el mismo análisis que en el caso anterior, para la fracción de oxígeno no quemado se puede decir lo siguiente. Cuando la concentración de oxígeno en el aire inyectado entra en contacto con el combustible sólido, ocurren una serie de reacciones complejas que se engloban en el término de reacciones de oxidación a alta temperatura HTO. Para que éstas ocurran, se requiere de un tiempo de residencia del oxígeno adecuado. Esto implica que cuando se inyecta a altas velocidades, el tiempo de residencia del oxígeno es tan bajo que su consumo por el combustible es mínimo y consecuentemente se incrementa la cantidad de oxígeno no quemado u oxígeno "bypaseado" (término que designa la cantidad de oxígeno que rebasa el frente de combustión por vías alternas o por exceso de velocidad de inyección, sin ser quemado o consumido). Esto acarrea problemas tanto operativos, por el riesgo de explosión en el pozo de producción, como de erosión en el medio poroso. Por el contrario, si se inyecta el gas a velocidades demasiado bajas, el oxígeno introducido es inmediatamente consumido y puede ocurrir la extinción del frente de combustión por la disminución de las reacciones HTO, y consecuentemente por la caída de la temperatura del frente. Esta teoría se puede observar gráficamente en la Figura 15.

4.2.1. Efectos de dispersión en la fracción de oxígeno no quemada

Dado que el efecto de dispersión de masa, se puede interpretar como un mezclado macroscópico, debido a las heterogeneidades del medio, es de esperarse que en un ambiente altamente dispersivo, aumente el consumo de oxígeno y disminuya Y_b . En la Figura 16, se demuestra esta hipótesis, ya que la concentración de oxígeno no quemado en función de la velocidad de inyección, disminuye notablemente ante una creciente variación del Péclét dispersivo Pe_D . Cuando se grafica Y_b en función de Pe_D , se puede apreciar que esta disminución de Y_b es de naturaleza exponencial, (cf., Figura 17). En $0 < Pe_T < 100$, el régimen es difusivo y la caída de Y_b es suave, en el intervalo $100 < Pe_D < 1000$, estaría en un estado de transición, mientras que a $Pe_T > 1000$, el régimen es puramente dispersivo y las heterogeneidades del medio son altas.

En las Figuras 18-21 se muestran los resultados de la determinación del efecto que tienen

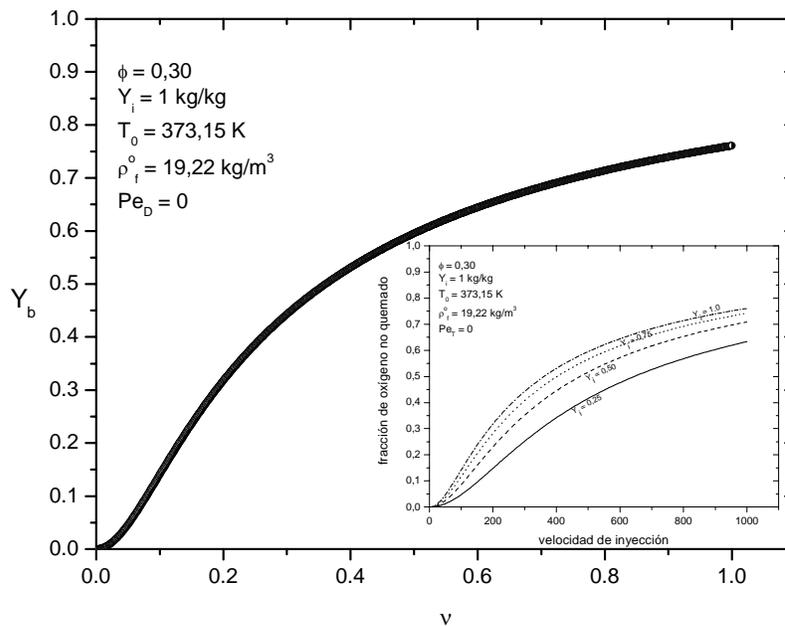


Figura 15: Concentración adimensional de oxígeno no quemado Y_b , en función de la velocidad de inyección, para un caso adiabático estacionario de un proceso CIS. En el recuadro inferior se presenta el comportamiento de Y_b dimensional (kg/kg) en función de v ($m/día$), para tres valores de concentración de oxígeno inyectado.

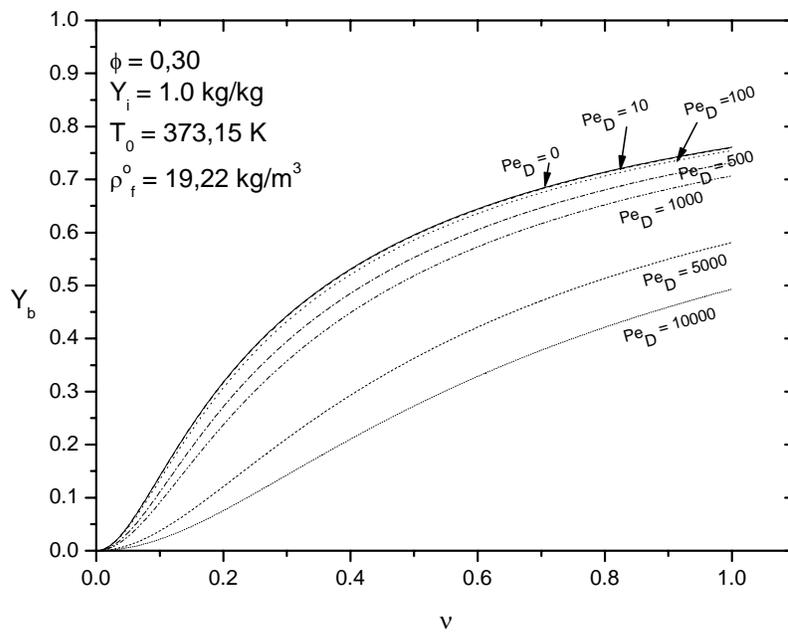


Figura 16: Efectos de dispersión de masa en la concentración de oxígeno no quemado Y_b , para el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

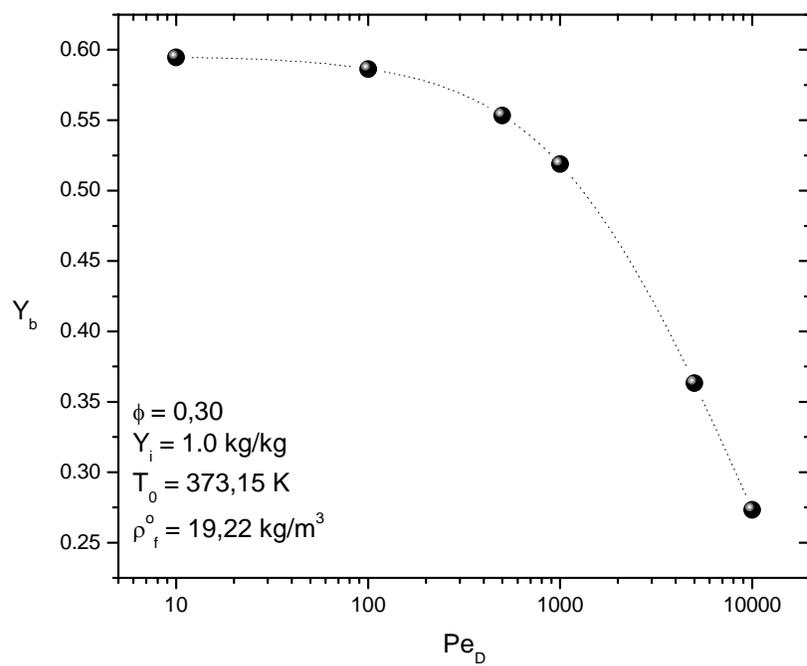


Figura 17: Concentración adimensional de oxígeno no quemado Y_b , en función del número de Péclet dispersivo Pe_D , para un caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

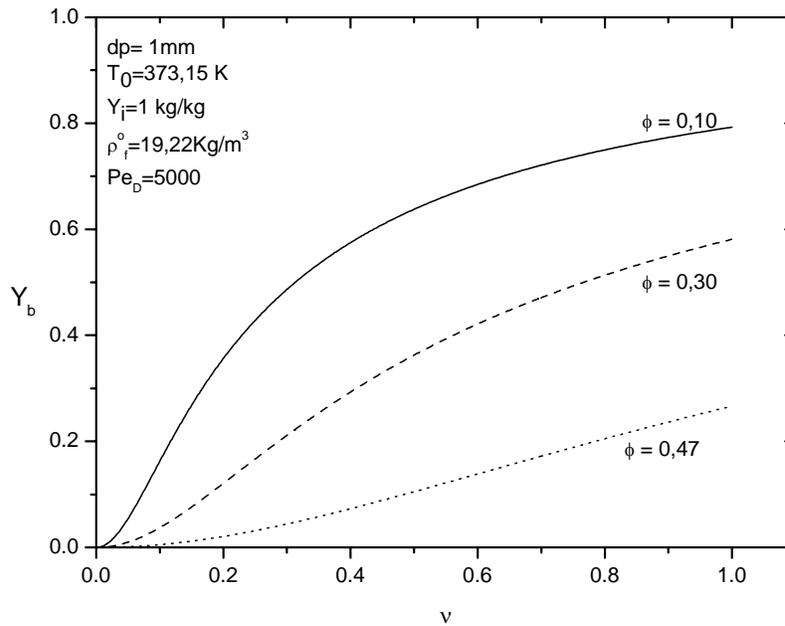


Figura 18: Efectos de la porosidad del medio ϕ , en la concentración adimensional de oxígeno no quemado Y_b , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

la porosidad del medio, concentración de combustible semisólido depositado en el medio, temperatura inicial del medio y concentración de oxígeno inyectado respectivamente, en la concentración de oxígeno no quemado en un ambiente dispersivo ($Pe_D \neq 0$). Para el caso de la variación de la porosidad, se observa que Y_b disminuye cuando la porosidad del medio se incrementa, lo cual se debe al incremento implícito en la concentración de combustible disponible cuando aumenta la porosidad. Esto puede corroborarse en la Figura 19 (donde se hizo variar ρ_f^0), que muestra la alta sensibilidad de Y_b a la concentración de combustible disponible.

En el análisis del efecto de la temperatura inicial del medio en concentración de oxígeno no quemado, se aprecia que Y_b es menor cuando T_0 es alta (cf., Figura 20). Esto puede deberse a que en un medio cuya temperatura inicial es alta, le cuesta menos trabajo alcanzar la temperatura de ignición de los reactivos, se estabiliza con mayor rapidez la temperatura del frente y consecuentemente hay un mayor consumo tanto de oxígeno como de combustible

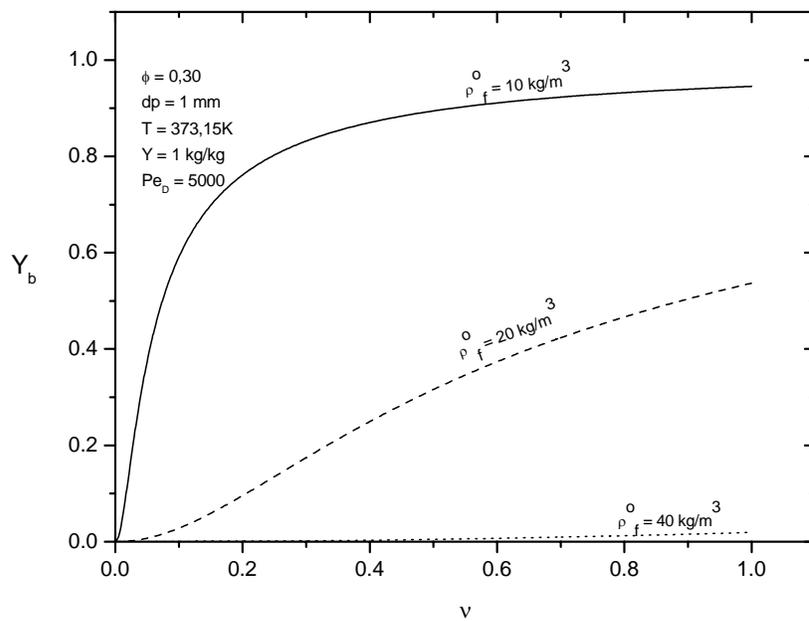


Figura 19: Efectos de la concentración inicial de combustible semisólido ρ_f^0 , en la concentración adimensional de oxígeno no quemado Y_b , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

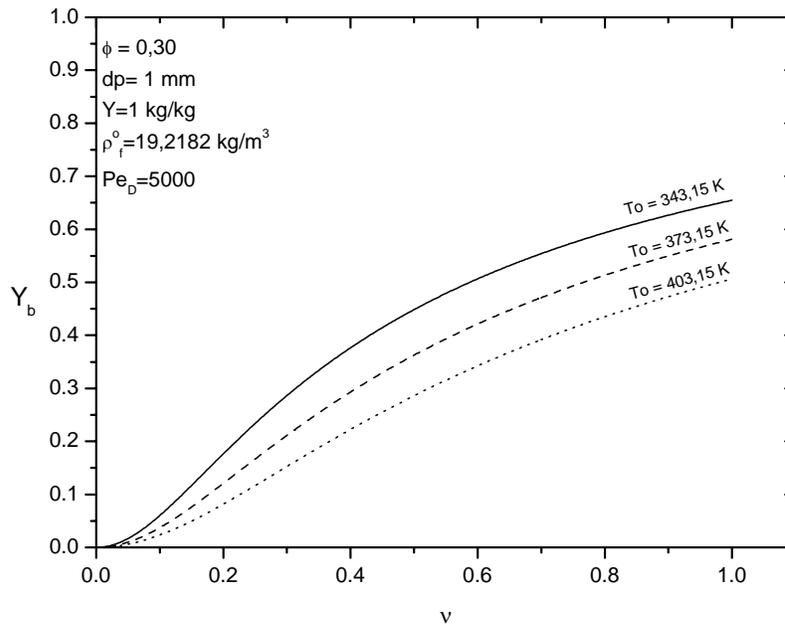


Figura 20: Efectos de la temperatura inicial del medio T_0 , en la concentración adimensional de oxígeno no quemado Y_b , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

con lo que disminuye el valor de Y_b .

Con respecto al efecto que tiene la concentración de oxígeno inyectado en Y_b , en la Figura 21, se aprecia que es relativamente débil el efecto de esta variable; sin embargo, la tendencia observada es de un aumento de Y_b cuando se incrementa el valor de Y_i .

Al igual que en el caso de la velocidad del frente, para la concentración de oxígeno no quemado Y_b , a partir de las Figuras 18-21, se construyeron gráficas en 3-D para visualizar los efectos de las cuatro variables evaluadas. En la Figura 22 se muestra el efecto de la porosidad en Y_b . Se observa que por sí misma, la porosidad del medio disminuye el valor de Y_b y hay sinergia con la dispersión de masa.

Con respecto al efecto que tiene la concentración inicial de oxígeno inyectado en Y_b , en la Figura 23, se aprecia que, a pesar de que existe una tendencia a disminuir el valor de Y_b , el efecto de esta variable es menor y es débil la sinergia con el efecto de dispersión de masa.

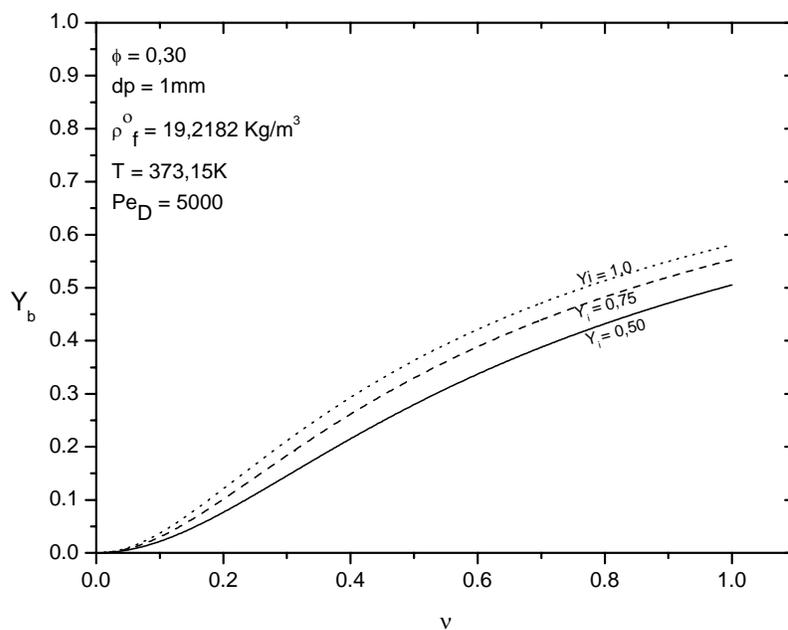


Figura 21: Efectos de la concentración inicial de oxígeno inyectado Y_i , en la concentración adimensional de oxígeno no quemado Y_b , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

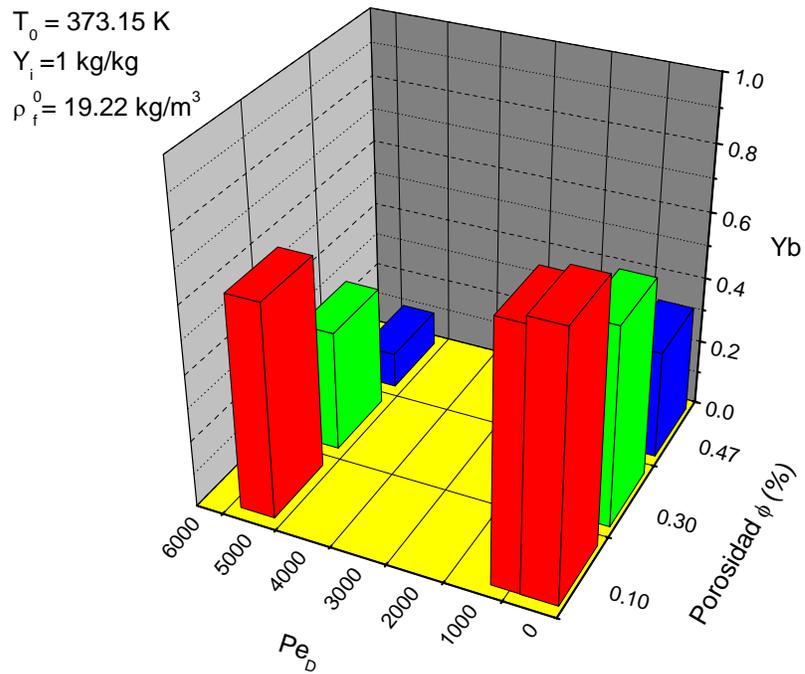


Figura 22: Efectos de la porosidad del medio (ϕ), en la concentración de oxígeno no quemado bajo tres escenarios de dispersión de masa, a través del número Pe_D .

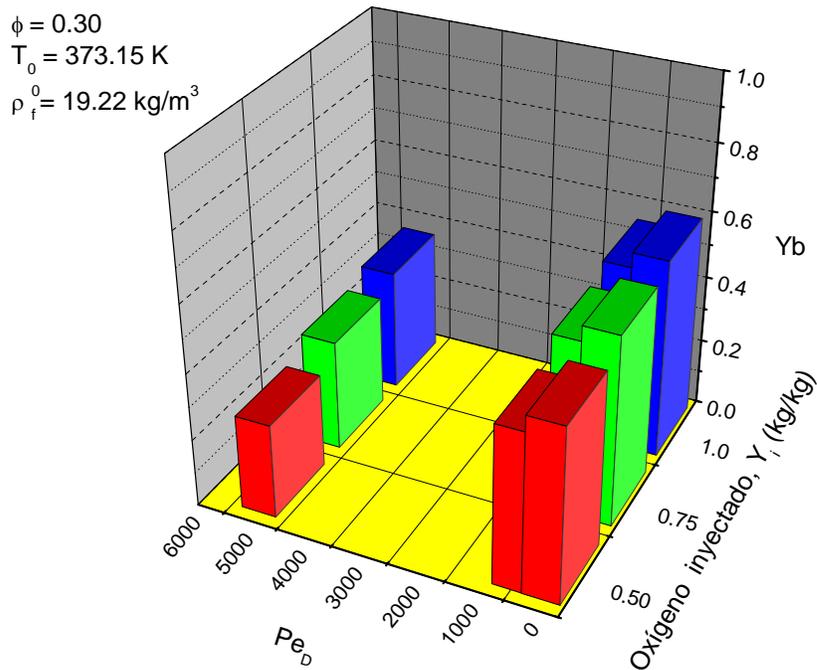


Figura 23: Efectos de la concentración de oxígeno inyectado Y_i , en la concentración de oxígeno no quemado Y_b , bajo tres escenarios de dispersión de masa a través del número Pe_D en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

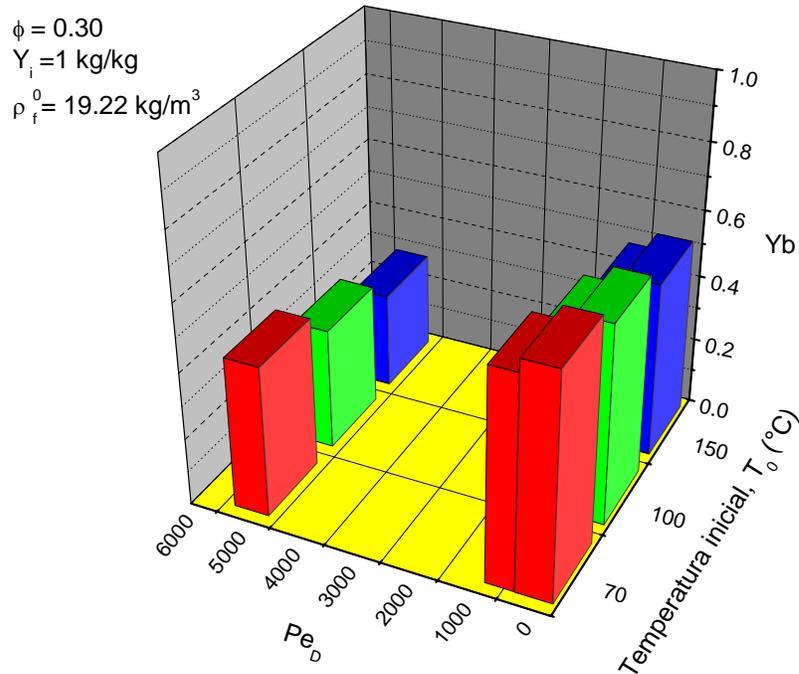


Figura 24: Efectos de la temperatura inicial del medio T_0 , en la concentración de oxígeno no quemado Y_b , bajo tres escenarios de dispersión de masa a través del número Pe_D en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

En la Figura 24 se presenta el efecto de la temperatura inicial del medio, en Y_b . Se aprecia que el consumo de oxígeno es mayor cuando la temperatura del medio es mayor y que el efecto se favorece en un ambiente dispersivo.

Finalmente, con respecto al efecto que tiene la concentración inicial de combustible depositado, en Y_b , en la Figura 25 se muestra que la concentración de Y_b es proporcional a ρ_f^0 , ya que al haber más combustible en el medio hay más consumo de oxígeno y Y_b tiende al mínimo.

Haciendo un comparativo del efecto individual de cada variable en la fracción de oxígeno no quemada, en el Cuadro 4, se resumen el comportamiento de Y_b en función de cada variable para los tres escenarios de dispersión térmica. En términos globales se puede decir que en ambos casos, i.e., tanto en el no dispersivo como en el dispersivo, la sensibilidad de Y_b con respecto a cada variable lleva el siguiente orden: $Y_i < T_0 < \phi \ll \rho_f^0$. Resumiendo, se observa

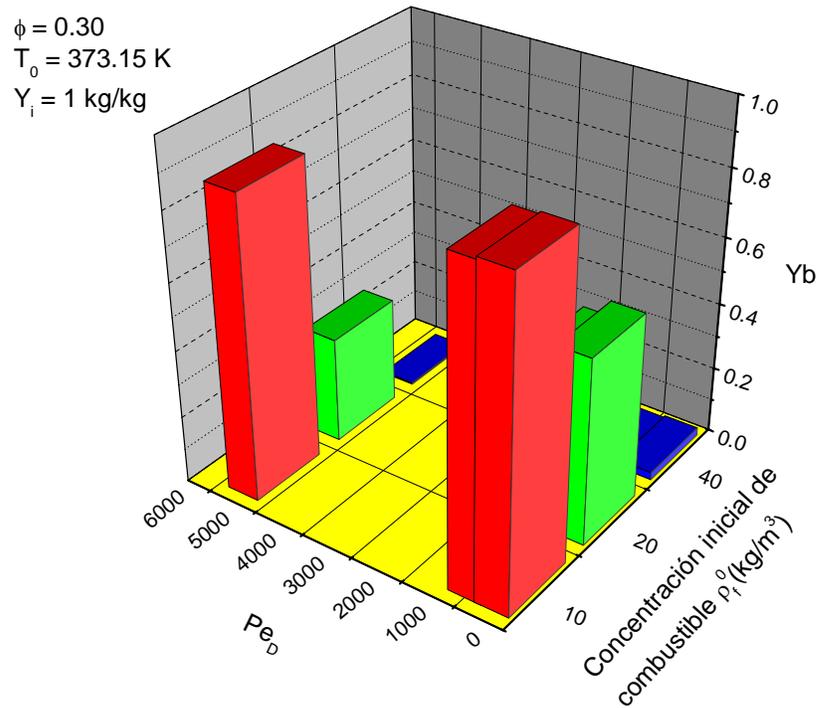


Figura 25: Efectos de la concentración de combustible depositado en el medio ρ_f^0 , en la concentración de oxígeno no quemado Y_b , bajo tres escenarios de dispersión de masa a través del número Pe_D en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

	<i>Concentración adimensional de oxígeno no quemado $Y_b (\times 10^{-1})$</i>											
Pe_T	ϕ (%)			T_0 ($^{\circ}C$)			Y_i (kg/kg)			ρ_f^0 (kg/m ³)		
	0.10	0.30	0.47	70	100	150	0.50	0.75	1.0	10	20	40
0	7.81	5.96	3.25	6.66	5.96	5.24	5.17	5.66	5.96	9.46	5.53	.24
500	7.60	5.53	2.66	6.28	5.53	4.78	4.71	5.22	5.53	9.39	5.09	.17
5000	6.38	3.63	1.05	4.49	3.63	2.87	2.80	3.30	3.63	8.94	3.17	.05

Cuadro 4: Concentración de oxígeno no quemado en función de cuatro variables críticas durante el proceso CIS para tres escenarios de dispersión de masa.

que aparentemente la concentración de oxígeno no quemado tiene una relación inversamente proporcional con la porosidad, la temperatura inicial del medio, y con la concentración inicial de combustible depositado. En tanto que es directamente proporcional a la concentración de oxígeno inyectado.

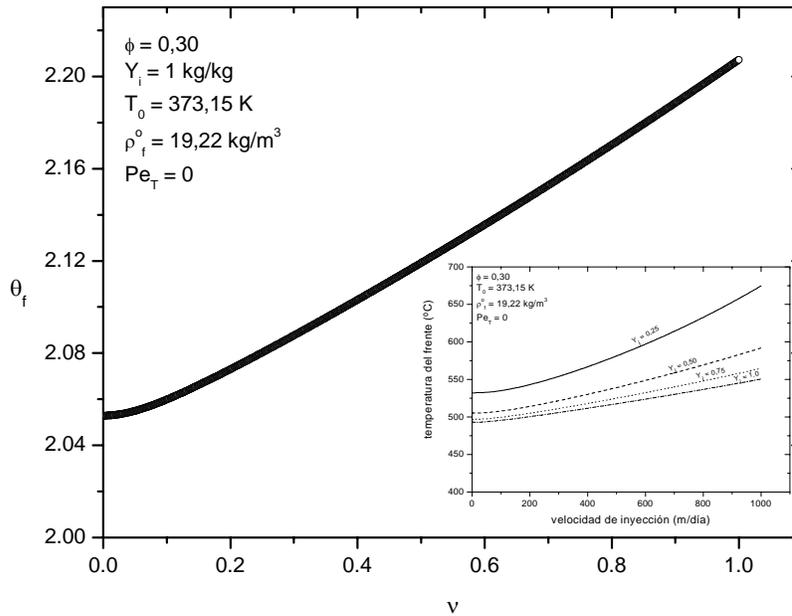


Figura 26: Temperatura adimensional del frente θ_f , en función de la velocidad de inyección, para un caso adiabático estacionario de un proceso CIS. En el recuadro inferior se presenta el comportamiento dimensional ($^{\circ}\text{C}$) de T_f en función de v (m/día), para tres valores de concentración de oxígeno inyectado.

4.3. Temperatura del frente

En el análisis de la temperatura del frente se tiene lo siguiente. La temperatura del frente, θ_f , para la cual hay una única solución en el caso adiabático estacionario, depende del flujo másico de aire inyectado y de la cantidad neta de gas producido por la reacción (cf. ecuación 226). En la Figura 26 se observa que ambos parámetros incrementan ligeramente la temperatura con la velocidad de inyección.

4.3.1. Efectos de dispersión en la temperatura del frente

A diferencia del comportamiento de la velocidad del frente a diferentes valores de número de Péclet dispersivo, i.e., cuando se incrementa la dispersión térmica debida a heterogeneidades del medio, en la temperatura del frente se aprecia una marcada tendencia a disminuir en ambientes altamente dispersivos (ver Figura 27). Al igual que en los casos

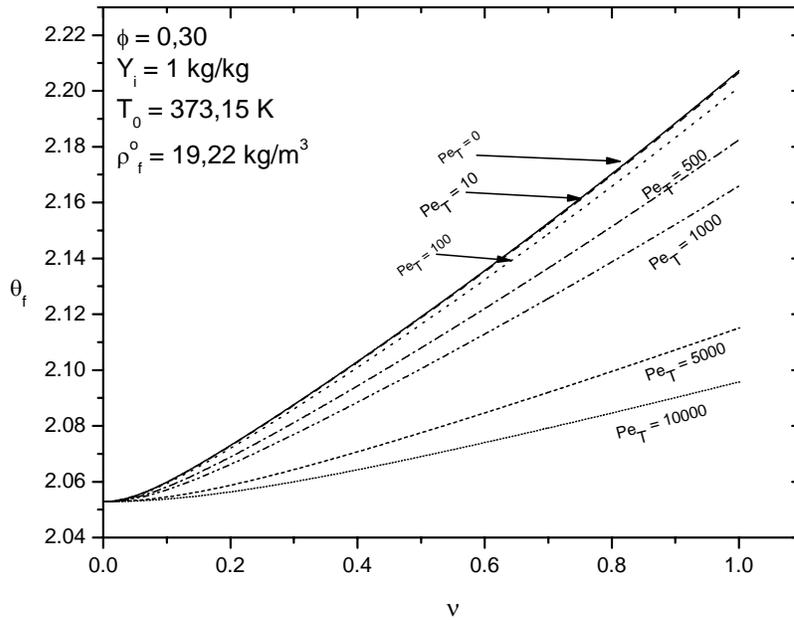


Figura 27: Temperatura adimensional del frente de combustión θ_f , en función de la velocidad de inyección, para diferentes valores de número de Péclet térmico Pe_T , en un caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

anteriores, cuando se grafica la temperatura del frente en función del número del Péclet dispersivo (Figura 28), se observa una dependencia de naturaleza exponencial (descendente) de θ_f con Pe_T , y se puede hacer el análisis respectivo en términos del número de Péclet observando el régimen difusivo en $0 < Pe_T < 100$, el transitorio en $100 < Pe_T < 1000$ y el dispersivo en $Pe_T > 10000$.

Por otra parte, en las Figuras 29-32, se presentan los resultados obtenidos, en relación a los efectos que tienen las variables ϕ , ρ_f^0 , T_0 y Y_i respectivamente, en la temperatura del frente, en un ambiente dispersivo ($Pe_T = 5000$). En la Figura 29, puede apreciarse que θ_f directamente proporcional a ϕ , esto por el mismo argumento que en V_f y Y_b , i.e., cuando aumenta la porosidad, se incrementa la cantidad de combustible disponible.

En la Figura 30 se presenta el efecto de la cantidad de combustible disponible en la temperatura adimensional del frente. Puede apreciarse que cuando $\rho_f^0 > 15 \text{ kg/kg}$, la

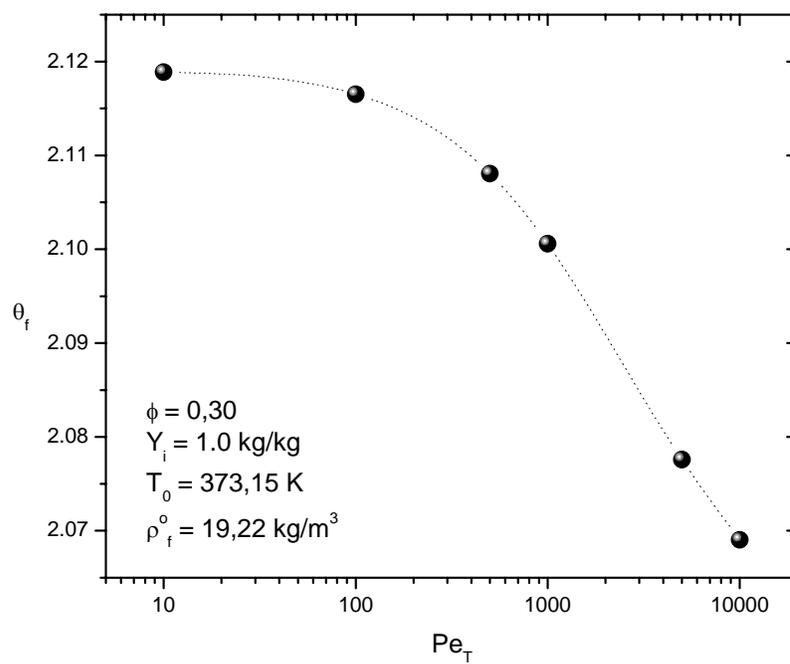


Figura 28: Temperatura adimensional del frente de combustión θ_f , en función del número de Péclet dispersivo Pe_D , para un caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

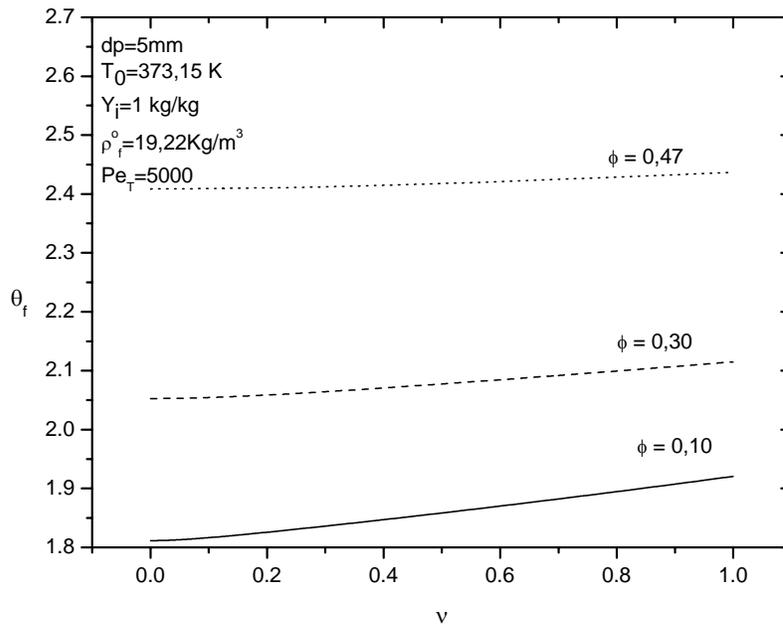


Figura 29: Efectos de la porosidad del medio ϕ , en la temperatura adimensional del frente θ_f , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

temperatura del frente es prácticamente independiente de la velocidad de inyección, y la dependencia de θ_f con ρ_f^0 es directamente proporcional, mientras que a $\rho_f^0 < 15\text{ kg/kg}$, hay un ligero incremento en θ_f al aumentar la velocidad de inyección. Con respecto al efecto que tiene la temperatura inicial del medio en la temperatura adimensional del frente de combustión, en la Figura 31, se observa que es mayor θ_f cuando la temperatura del medio es menor. Este resultado debe tomarse con precaución ya que esta ligera tendencia al incremento en el valor de θ_f con respecto a la velocidad de inyección y con respecto a la temperatura del medio, es relativo a la escala utilizada.

En lo que respecta al efecto que tiene la concentración de oxígeno inyectado en la temperatura del frente de combustión, en la Figura 32, se aprecia que es poco sensible a los cambios en Y_i y a la velocidad de inyección. La tendencia que se aprecia es decreciente en θ_f cuando se incrementa el valor de Y_i . Al igual que los efectos de las demás variables en la temperatura adimensional del frente, este resultado debe considerarse relativo a la escala

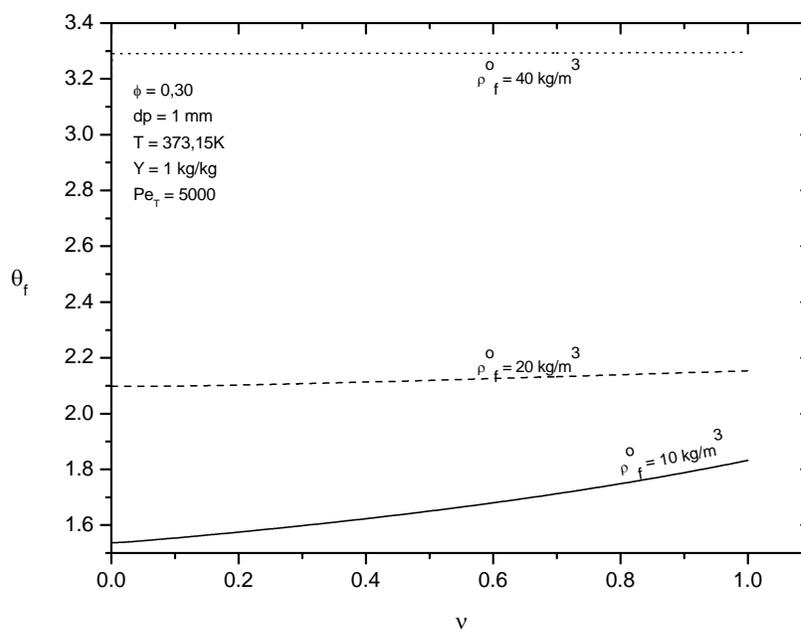


Figura 30: Efectos de la concentración inicial de combustible depositado en el medio ρ_f^0 , en la temperatura adimensional del frente θ_f , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

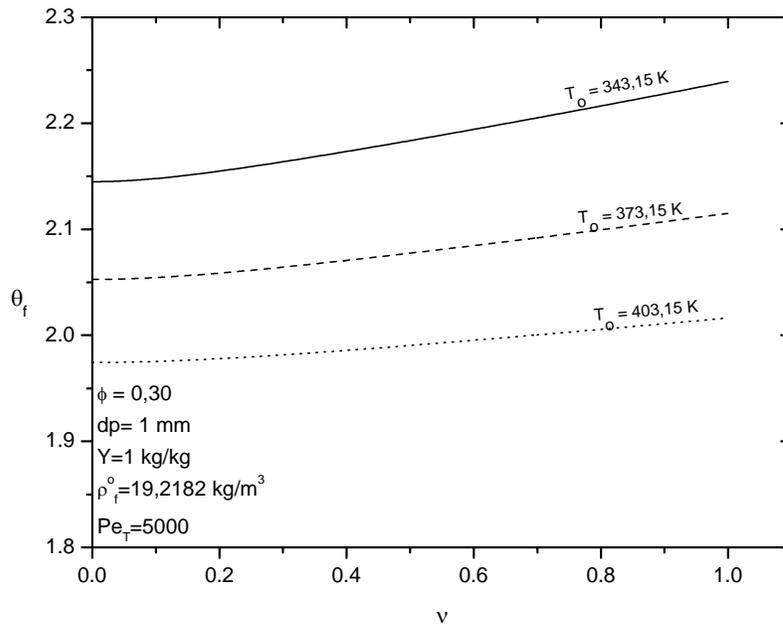


Figura 31: Efectos de la temperatura inicial del medio T_0 , en la temperatura adimensional del frente θ_f , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

utilizada en las figuras correspondientes, siendo en general θ_f poco sensible a los cambios en las variables evaluadas.

Al igual que en los casos anteriores, se construyeron gráficas en 3-D a partir de las Figuras 29-32, para visualizar los efectos de las cuatro variables evaluadas en la temperatura adimensional del frente θ_f . En lo que respecta a los efectos de la porosidad, en la Figura 33, se presenta la temperatura del frente en función de la porosidad del medio para tres valores de Pe_T . Se observa un ligero incremento de θ_f cuando se incrementa la dispersión térmica y cuando se incrementa la porosidad. Aparentemente un incremento en la porosidad tiende a invertir el efecto individual de la dispersión térmica en la temperatura del frente. A diferencia de los casos anteriores, las variaciones en θ_f son bajas.

Con respecto a la temperatura inicial del medio, y a la concentración de oxígeno inyectado, en las Figuras 34 y 35 respectivamente, se observa que tanto en el ambiente dispersivo como en el no dispersivo, hay una disminución de la temperatura del frente por incremento en

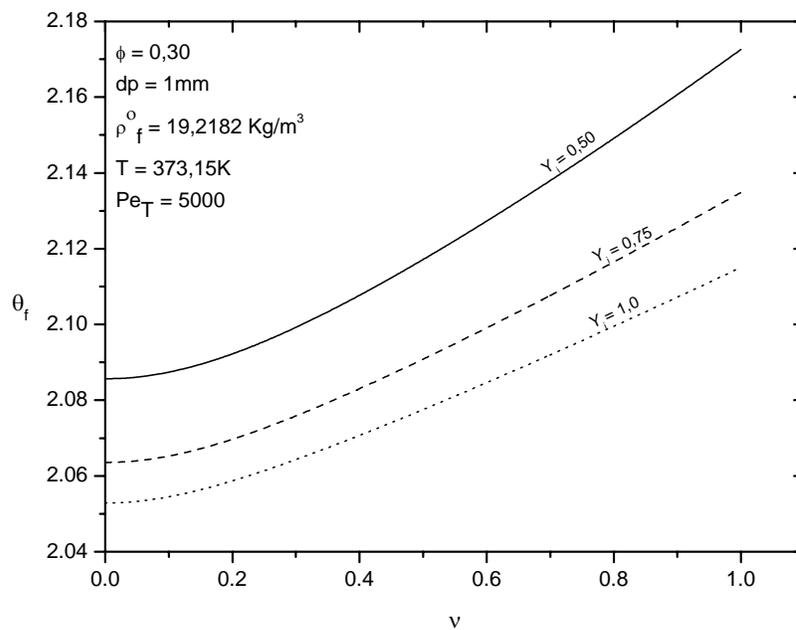


Figura 32: Efectos de la concentración inicial de oxígeno inyectado Y_i , en la temperatura adimensional del frente θ_f , en el caso dispersivo, adiabático y estacionario de un proceso CIS.

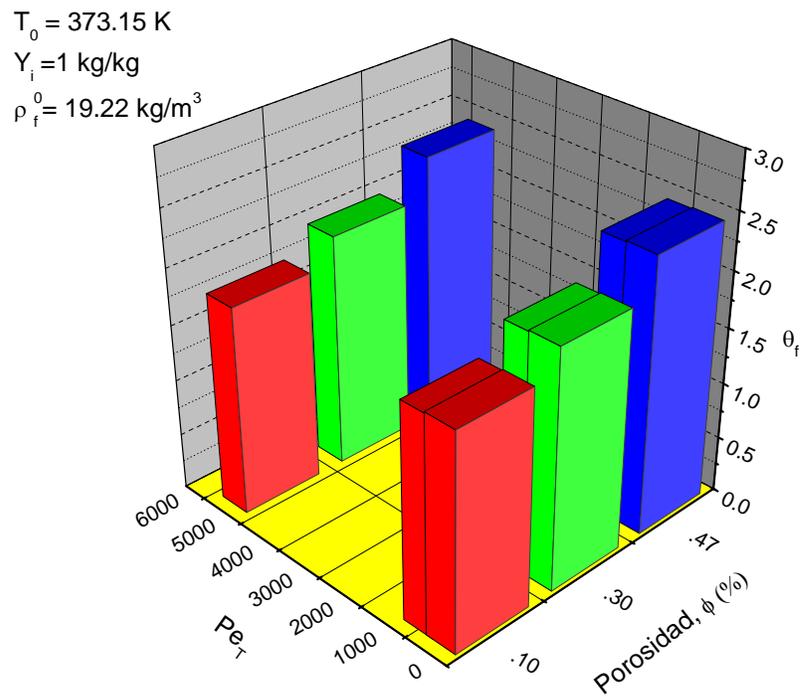


Figura 33: Efectos de la porosidad del medio (ϕ), en la temperatura adimensional del frente θ_f , bajo tres escenarios de dispersión térmica a través del número Pe_T en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

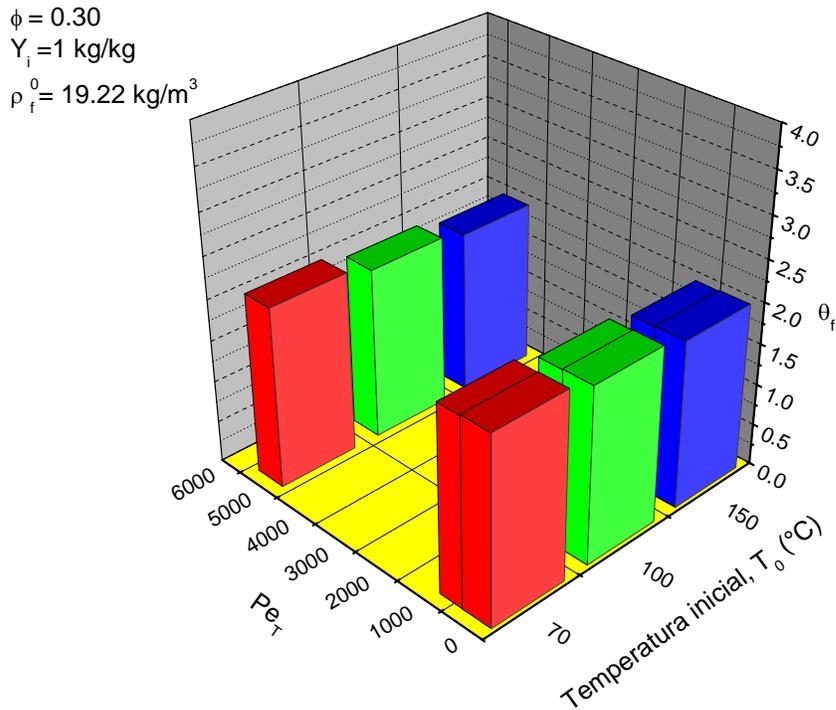


Figura 34: Efectos de la temperatura inicial del medio T_0 , en la temperatura adimensional del frente θ_f , bajo tres escenarios de dispersión térmica a través del número Pe_T en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

la temperatura inicial del medio, así como en la concentración de oxígeno inyectado, sin embargo este cambio es mínimo.

Finalmente, en la Figura 36, se observa el efecto de la concentración inicial de combustible depositado, en la temperatura del frente para tres casos de dispersión térmica. El efecto individual de ρ_f^0 es el de incrementar θ_f , y al contrario de todos los casos anteriores, este efecto se ve ligeramente disminuido cuando se incrementa la dispersión térmica. Se piensa que esto pueda deberse a que al tener una cantidad mayor de combustible, por un lado se incrementa el calor generado, pero si hay mucha dispersión habrá más pérdida conductiva del calor, lo cual impacta directamente en θ_f .

Al igual que en los casos anteriores, en un comparativo del efecto individual de cada variable en la temperatura del frente de combustión, en el Cuadro 5, se resume el comportamiento

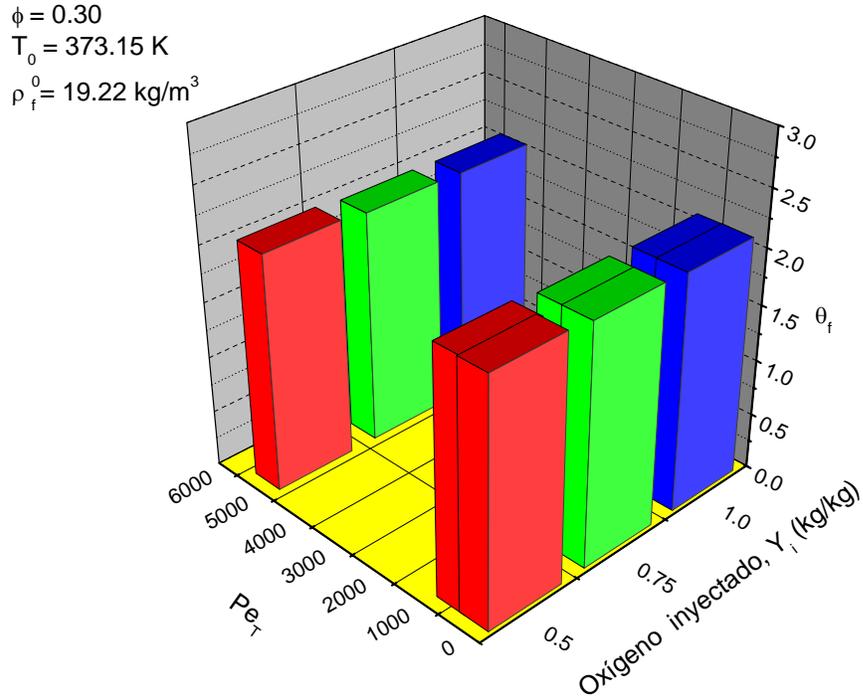


Figura 35: Efectos de la concentración de oxígeno inyectado Y_i , en la temperatura adimensional del frente θ_f , bajo tres escenarios de dispersión térmica a través del número Pe_T en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

Pe_T	Temperatura adimensional del frente θ_f											
	ϕ (%)			T_0 ($^{\circ}C$)			Y_i (kg/kg)			ρ_f^0 (kg/m^3)		
	0.10	0.30	0.47	70	100	150	0.50	0.75	1.0	10	20	40
0	1.91	2.12	2.45	2.24	2.12	2.02	2.17	2.14	2.12	1.84	2.16	3.30
500	1.90	2.11	2.44	2.23	2.11	2.01	2.18	2.14	2.12	1.84	2.16	3.30
5000	1.86	2.08	2.42	2.18	2.08	1.99	2.12	2.09	2.08	1.65	2.12	3.29

Cuadro 5: Temperatura adiabática del frente de combustión en función de cuatro variables en un proceso CIS directa para tres escenarios de dispersión térmica.

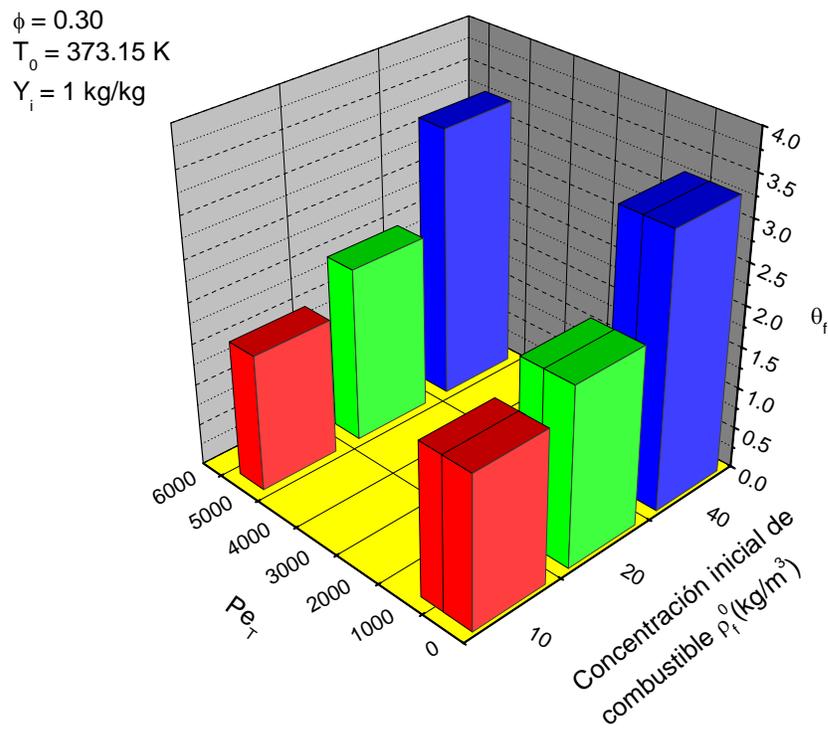


Figura 36: Efectos de la concentración de combustible depositado en el medio ρ_f^0 , en la temperatura adimensional del frente θ_f , bajo tres escenarios de dispersión térmica a través del número Pe_T en el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

de θ_f en función de cada variable, para los tres escenarios de dispersión térmica. En términos globales se puede decir que en ambos casos, i.e., tanto en el no dispersivo como en el dispersivo, la sensibilidad de θ_f con respecto a cada variable es muy baja. Para fines prácticos puede considerarse no sensible a las variables evaluadas, sin embargo, en esa escala mínima de sensibilidad, existe el siguiente orden: $Y_i < T_0 < \phi \ll \rho_f^0$. A manera de resumen, se observa que aparentemente la temperatura del frente tiene una relación directamente proporcional con la porosidad y con la concentración inicial de combustible depositado, e inversamente proporcional con la temperatura inicial del medio y con la concentración de oxígeno inyectado.

4.4. *Perfil de Temperatura*

Una vez que se determinaron las variables V_f , Y_b y θ_f , se construyó el perfil de temperatura inicialmente para un caso no dispersivo, esto se hizo para un caso adiabático estacionario, utilizando la ec. (222). En la Figura 37, se muestra el perfil de temperatura para un instante de tiempo. Se observa claramente una zona de alta temperatura, donde se localiza el frente de reacción (en las cercanías a $\xi = 0$), rodeada por dos zonas de menor temperatura. De acuerdo con la teoría de la estructura estándar de la flama, en la región $-\infty < \xi < \sim 450$, se localiza la zona de productos, en donde ya no hay reacción debido al consumo completo del combustible, y la temperatura es baja debido al aire frío que pasa por esta zona. En el intervalo $\sim 450 < \xi < 0$, se localiza la región de transferencia de calor, que es donde la temperatura va incrementándose por convección hasta alcanzar la temperatura de flama adiabática, θ_f , donde ocurre la reacción y la producción de una gran cantidad de calor. Si se hace un acercamiento de la zona de la reacción, del lado izquierdo del frente se observaría una meseta en donde la temperatura del frente es constante. Posteriormente, en el intervalo $0 < \xi < \sim 450$, se localiza la región de combustión, que a su vez contiene a la zona de reacción, donde la temperatura cae exponencialmente debido al consumo completo del combustible y porque el frente avanza por un medio que se encuentra a una temperatura fría (en el intervalo $450 < \xi < \infty$).

El perfil de temperatura también se ve afectado cuando se somete a un ambiente

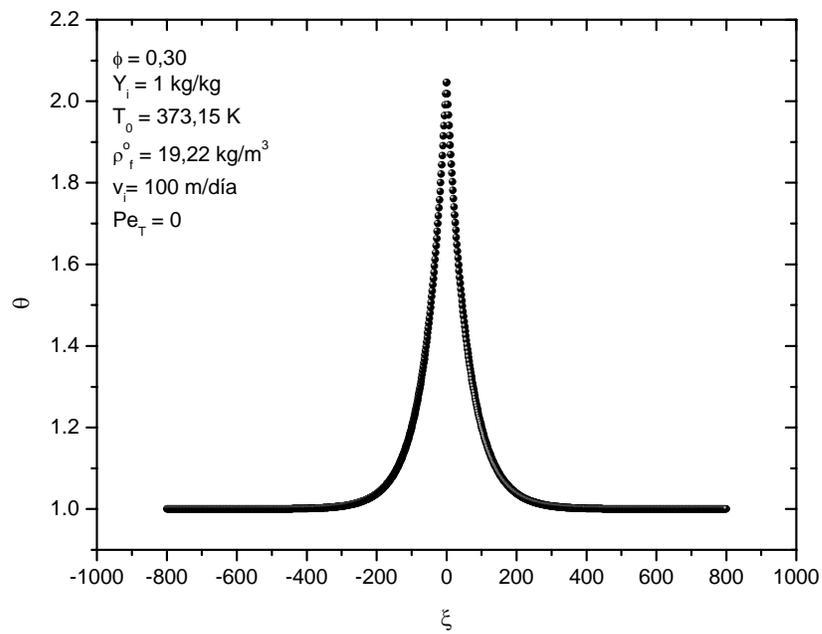


Figura 37: Perfil de temperatura para el caso adiabático estacionario de un proceso CIS, en un ambiente no dispersivo, $Pe_T = 0$.

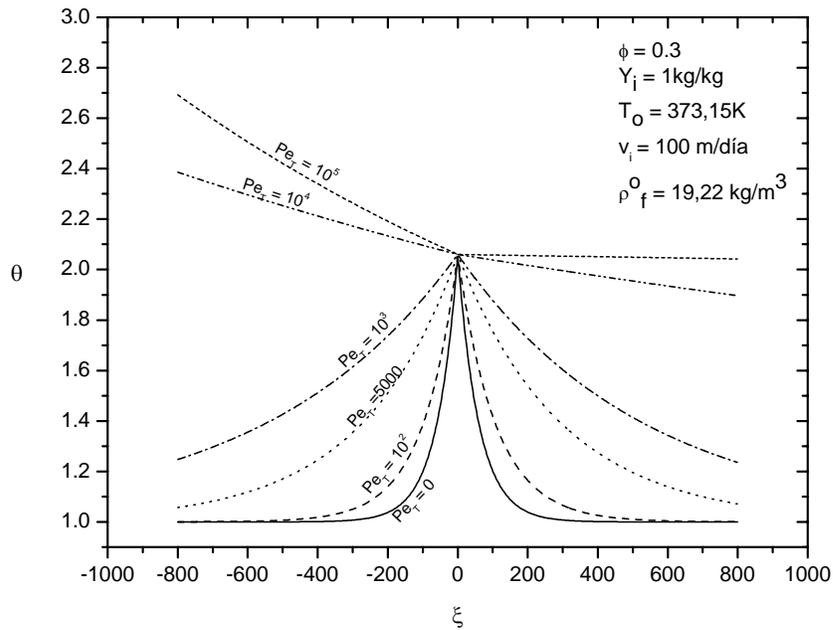


Figura 38: Efectos del ambiente dispersivo a través del número de Pe_T , en el perfil de la temperatura para el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

dispersivo, para determinar este efecto, se hicieron varias corridas numéricas en el intervalo $100 < Pe_T < 10^5$ y los resultados se presentan en la Figura 38, donde puede observarse que la temperatura del frente se mantienen constante aún un ambiente puramente dispersivo, mientras que hay una marcada variación de la temperatura en las regiones de transferencia de calor y de combustión. En la región de transferencia de calor la temperatura se incrementa proporcionalmente cuando se eleva el número Pe_T ; sin embargo, cuando $Pe_T > 10^4$, hay un cambio radical en el perfil de temperatura, en donde ahora la tendencia es decreciente hacia la zona de reacción, lo cual puede deberse a un cambio en el régimen de flujo laminar a uno de dispersión turbulenta. En el otro lado del frente, en la zona de combustión, la tendencia de la temperatura es decreciente inversamente proporcional al aumento en el número Pe_T . Entonces por un lado, el ambiente dispersivo favorece el perfil de temperatura en ambas zonas.

Por otra parte, para la determinación de los efectos que tienen las variables ϕ , ρ_f^0 , T_0 , y la

misma velocidad del frente, V_f , en el perfil de temperatura, se hicieron comparativos entre el perfil que se observa cuando $Pe_T = 0$, con el perfil cuando $Pe_T = 5000$. Los resultados se presentan en las Figuras 39-42. Con respecto al efecto que tiene la porosidad del medio (ϕ) en el perfil de temperatura (ver Figura 39), se observa que cuando no se considera la dispersión térmica ($Pe_T = 0$), un incremento en la porosidad del medio se traduce en un aumento en la temperatura del frente, y un estrechamiento de las regiones de variación (i.e., zona de transferencia de calor y zona de combustión). Mientras que en un ambiente dispersivo ($Pe_T = 5000$), ocurre también un incremento en la temperatura del frente, pero hay un alargamiento de las regiones de variación, lo cual conlleva un incremento de temperatura en estas regiones. Posiblemente esto se deba a que en el aumento de porosidad, va implícito un incremento en la cantidad de combustible a quemarse (ρ_f^0), y la dispersión térmica mejora el consumo de este combustible (cf. Figura 40).

Con respecto al efecto que tiene la temperatura del medio (T_0), en el perfil de temperatura, en la Figura 41, se observa que hay una ligera disminución de temperaturas tanto en las regiones de variación como en la temperatura del frente, cuando se incrementa la temperatura inicial del medio, este efecto se resuelve con mayor claridad en un ambiente dispersivo.

Por último, después haber determinado el intervalo en el que varía la velocidad de propagación del frente de combustión (V_f), se determinó el efecto que tiene este auto valor en el perfil de temperatura. Se observa que en el ambiente no dispersivo, cuando $V_f < 3,0$, la temperatura del frente se mantiene constante y hay alargamiento de las zonas de variación, con un respectivo incremento en la temperatura de cada zona. La naturaleza de este comportamiento se ve mejorada en un ambiente dispersivo, de tal manera que cuando $V_f > 3,0$, la temperatura de la zona de transferencia de calor ya no está tan alejada de la temperatura del frente (cf. Figura 42).

4.5. Perfil de concentración de oxígeno

A partir de la ec. (221), se construyó el perfil de concentración de oxígeno para el caso adiabático estacionario del proceso CIS en estudio. Para ello, se hicieron varias corridas

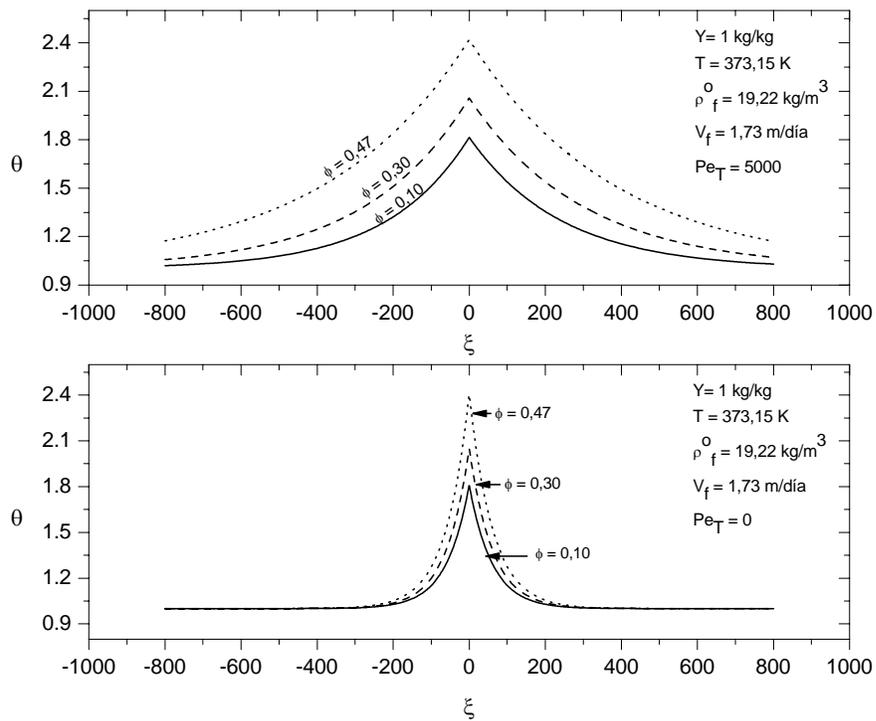


Figura 39: Efectos de la porosidad en el perfil de la temperatura en el caso estacionario adiabático de un proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo, $Pe_T = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo, $Pe_T \neq 0$ (parte superior de la figura).

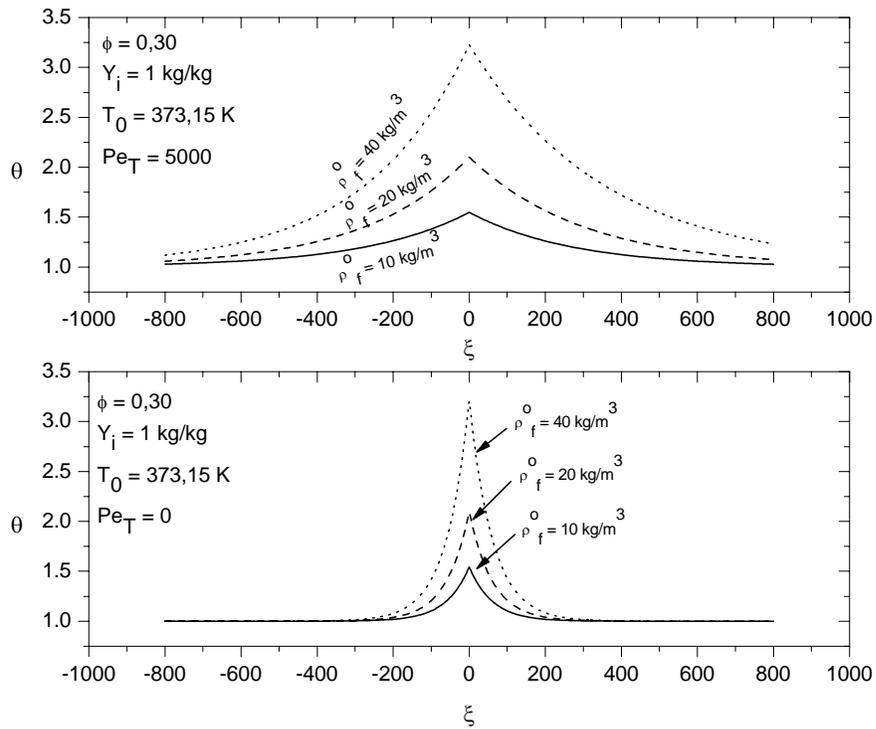


Figura 40: Efectos de la concentración inicial de combustible semisólido depositado, en el perfil de la temperatura en el caso estacionario adiabático de un proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo $Pe_T = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo $Pe_T \neq 0$ (parte superior de la figura).

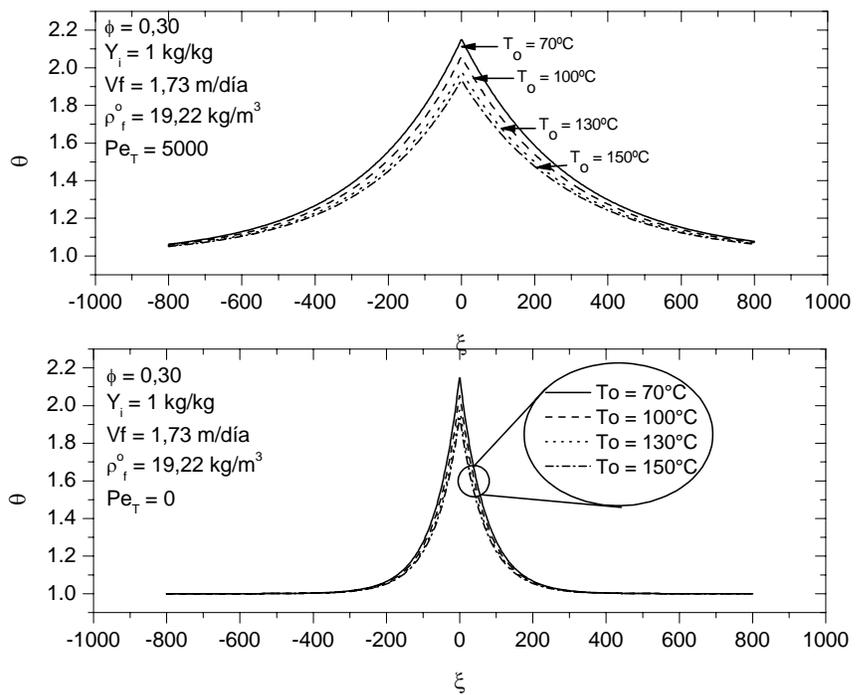


Figura 41: Efectos de la temperatura inicial del medio, en el perfil de la temperatura en el caso estacionario adiabático de un proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo $Pe_T = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo $Pe_T \neq 0$ (parte superior de la figura).

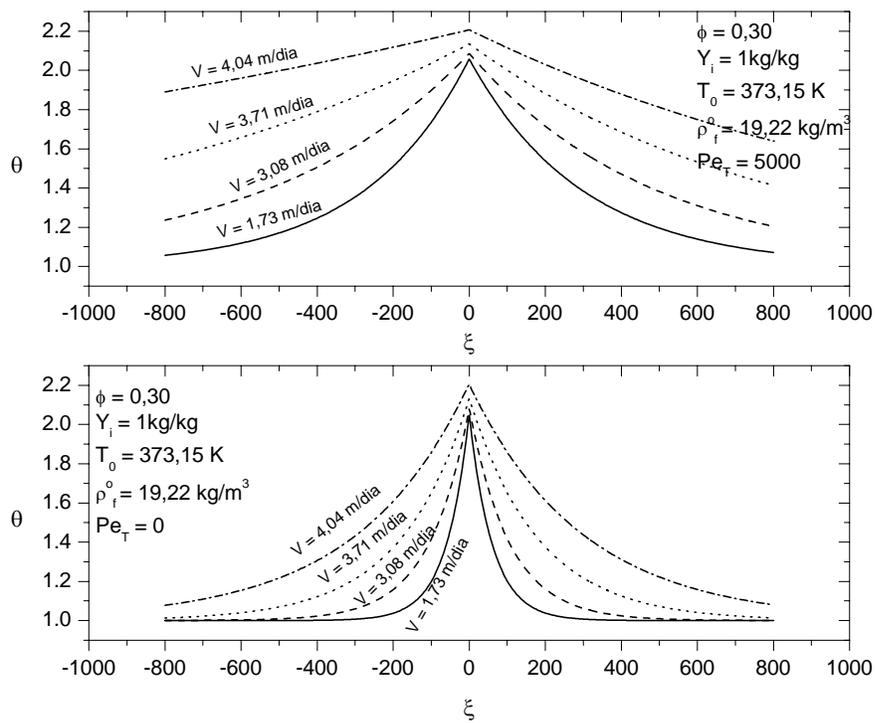


Figura 42: Efectos de la velocidad de propagación del frente de combustión, en el perfil de la temperatura en el caso estacionario adiabático de un proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo $Pe_T = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo $Pe_T \neq 0$ (parte superior de la figura).

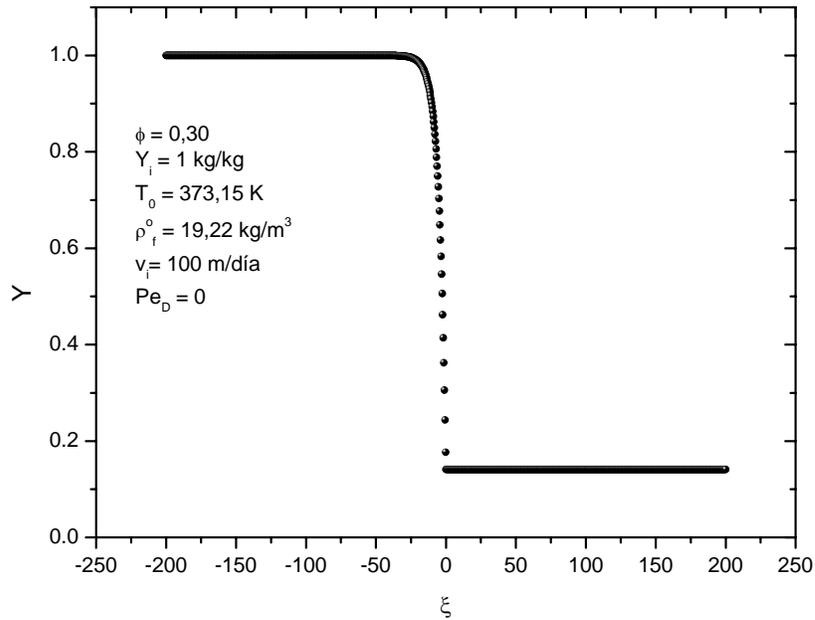


Figura 43: Perfil de la concentración de oxígeno para el caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

numéricas preliminares utilizando el auto valor generado previamente, en donde inicialmente se utilizó la misma malla que en el perfil de temperatura ($-1000 < \xi < 1000$); sin embargo, no se observó una resolución adecuada del perfil de concentración de oxígeno aún incrementando el número de puntos numéricos, por esta razón se fue afinando el espacio numérico hasta que en el intervalo $-250 < \xi < 250$, se resolvió adecuadamente la curva como se muestra en la Figura 43, en donde se observa que el oxígeno atraviesa por la zona quemada ($-\infty < \xi < \sim 50$, para este caso), hasta contactar al combustible semisólido en la zona de combustión ($\sim 50 < \xi < 0$), donde se consume de manera exponencial. Dado que una de las hipótesis del modelo fue que habiendo un exceso de oxígeno y un consumo completo del combustible, existe una cantidad de oxígeno no quemado o remanente Y_b , que es lo que se observa en el intervalo $0 < \xi < \infty$.

Al igual que en el perfil de temperatura, en la concentración de oxígeno también se hicieron análisis comparativos de los efectos que tienen las variables ϕ , ρ_f^0 , T_0 , y V_f ,

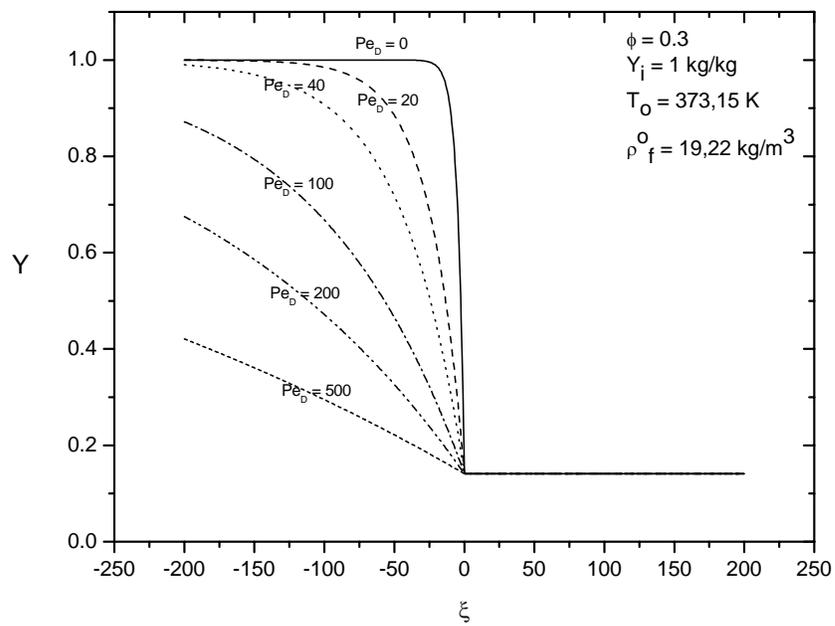


Figura 44: Efectos de la dispersión de masa, a través del número Pe_D , en el perfil de la concentración de oxígeno para un caso adiabático estacionario de un proceso CIS.

en ambientes no dispersivos y dispersivos respectivamente, los cuales se muestran en las Figuras 45-46. En lo referente al efecto que tiene la concentración de combustible semisólido depositado ρ_f^0 , en el perfil de concentración de oxígeno para el caso no dispersivo, en la Figura 45, se observa que cuando se incrementa ρ_f^0 , hay una disminución de la concentración de oxígeno no quemado Y_b y el consumo de oxígeno es de naturaleza exponencial; mientras que esta caída exponencial se suaviza en el caso dispersivo. Esto es consistente con la teoría de combustión; sin embargo, en ambos casos, cuando $\rho_f^0 > 30 \text{ kg/m}^3$, se consume todo el oxígeno y $Y_b = 0$. Este es un caso singular ya que en la deducción de la ecuación del auto valor en la zona de reacción, la integral de la exponencial $\int_0^{-\infty} \exp \Theta_1 d\Theta_1$, pudo resolverse ya que nuestro caso pertenece aquel con control de temperatura cuando $Y_b > 0$, lo cual no se cumple aquí. Otra condición para que existiera el control de temperatura es que $\eta < 1$, lo cual tampoco se cumple dado que se consume todo el combustible. Este resultado es similar al observado cuando se disminuye la concentración de oxígeno inyectado Y_i , (cf. Figura 46), el cual también es consistente con la teoría de combustión; sin embargo, cuando $Y_i < 0,25 \text{ kg/kg}$, en el modelo desarrollado se presentan puntos singulares, dado que $Y_b = 0$. Estos resultados requieren un análisis más detallado.

Finalmente, cuando se hizo variar el valor de la velocidad de propagación del frente de combustión V_f , se observa que en un ambiente de dispersión de masa el consumo de oxígeno es menor en la zona de combustión. Por otra parte, en ambos casos, i.e., cuando $Pe_D = 0$, y $Pe_D \neq 0$, se observa un incremento en la concentración de oxígeno no quemado cuando aumenta la velocidad del frente (cf. Figura 47).

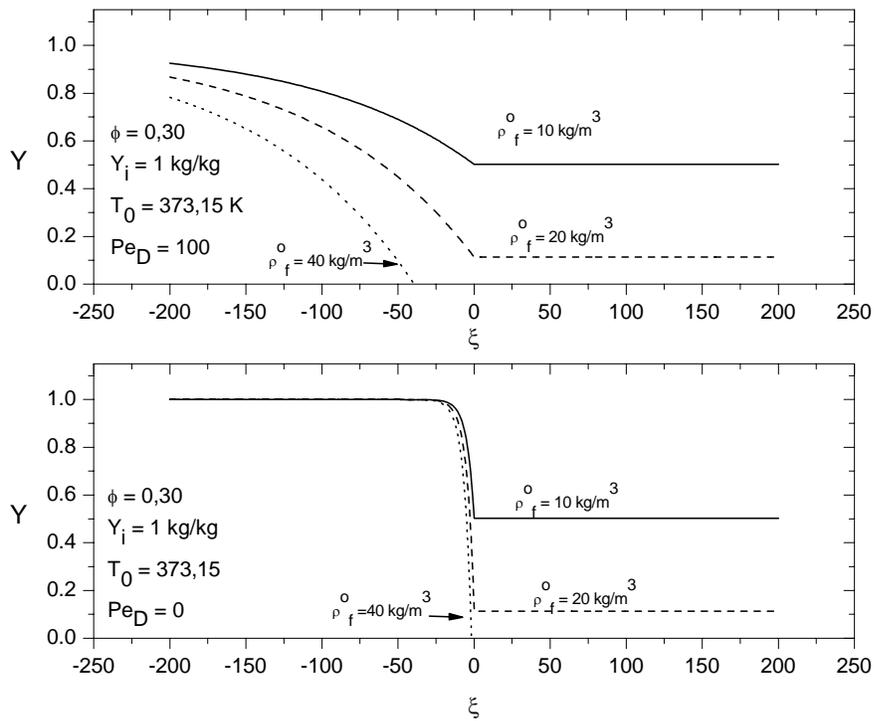


Figura 45: Efectos de la concentración inicial de combustible semisólido depositado, en el perfil de la concentración de oxígeno, en el caso adiabático estacionario del proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo $Pe_D = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo $Pe_D \neq 0$ (parte superior de la figura).

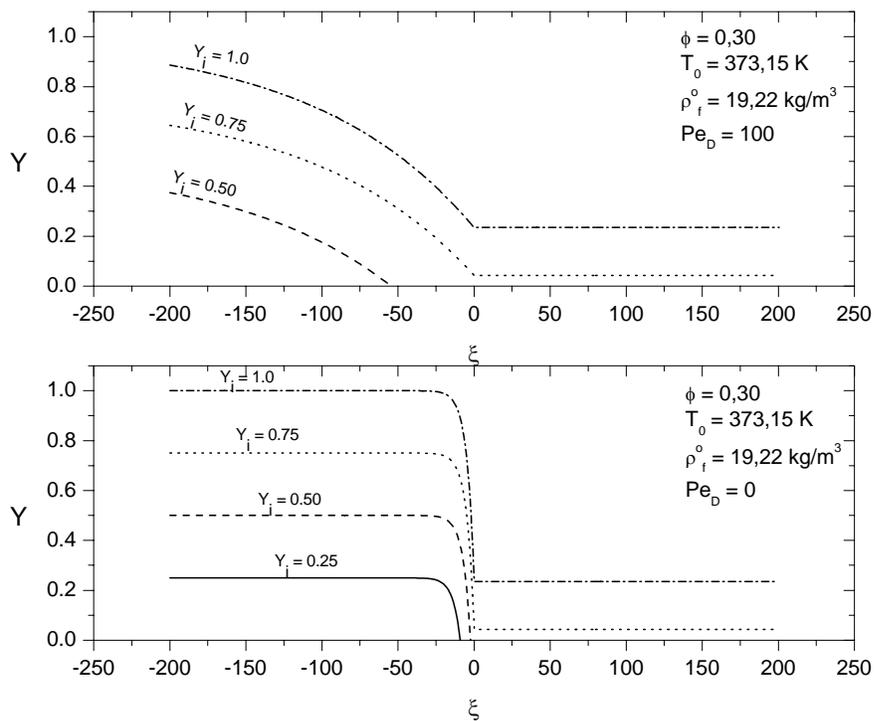


Figura 46: Efectos de la concentración de oxígeno inyectado, Y_i , en el perfil de la concentración de oxígeno, en el caso adiabático estacionario del proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo $Pe_D = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo $Pe_D \neq 0$ (parte superior de la figura).

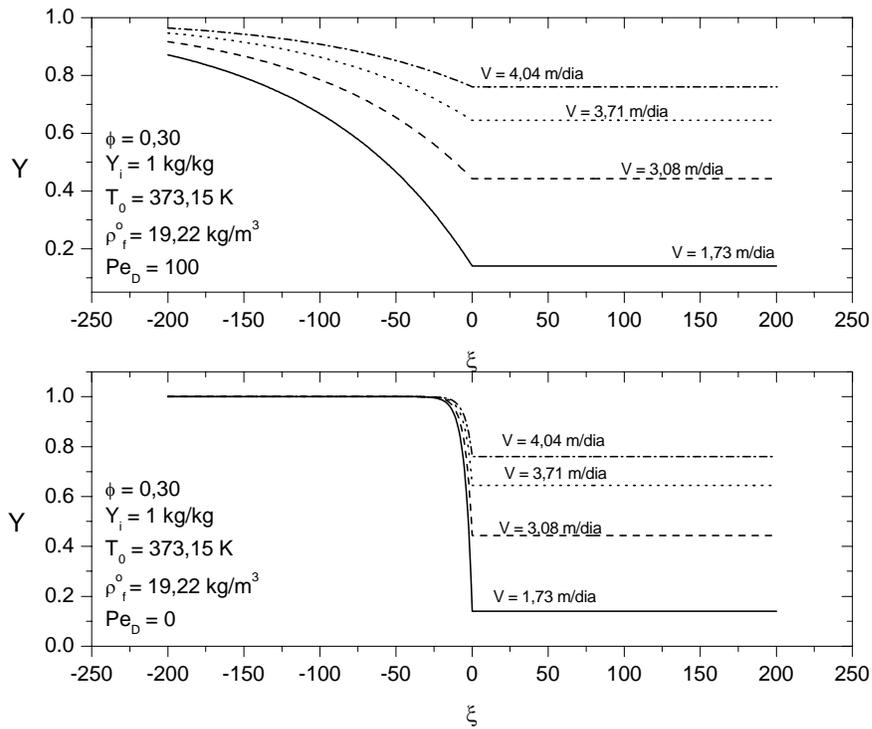


Figura 47: Efectos de la velocidad de propagación del frente de combustión, en el perfil de la concentración de oxígeno, en el caso adiabático estacionario del proceso CIS. Comparativo entre los casos no dispersivo $Pe_D = 0$ (parte inferior de la figura) y dispersivo $Pe_D \neq 0$ (parte superior de la figura).

Capítulo V

CONCLUSIONES

En este trabajo se llevó a cabo un estudio analítico y numérico sobre los efectos de la dispersión térmica y de masa, debidas a heterogeneidades del medio, en la dinámica del frente de combustión directa in situ en un medio poroso. Se analizó el caso adiabático, estacionario y unidimensional de las ecuaciones diferenciales conservativas que dominan el proceso de combustión in situ. Para resolver las ecuaciones se utilizó el método de expansiones asintóticas acopladas, el cual es comúnmente utilizado en problemas de capa límite. Al final, con las soluciones encontradas, se construyó un sistema de ecuaciones algebraicas que se resolvió numéricamente utilizando valores característicos de las propiedades de la roca y de los fluidos en procesos de combustión in situ. Adicional a los efectos dispersivos, fueron evaluados los efectos combinados de algunas propiedades como la porosidad del medio, temperatura inicial del medio, concentración de oxígeno inyectado y concentración inicial de combustible depositado, con y sin efectos de dispersión, en la temperatura y velocidad del frente de combustión y en la fracción de oxígeno no quemado. Las principales conclusiones de este trabajo son las siguientes:

1. De acuerdo con los resultados de Akkutlu et al. [21] y Lu [23], en donde se modela a las heterogeneidades del medio a través de capas a las que se les asignó diferente permeabilidad, en el caso donde la dispersión térmica y de masa ocasionadas por heterogeneidades del medio es alta, existe una única solución para la temperatura del frente y para la velocidad de propagación del frente de combustión.
2. *La dispersión térmica* incrementa la velocidad de propagación del frente en dos órdenes de magnitud, con una naturaleza exponencial. Mientras que en la temperatura del frente tiene un efecto reductivo. En el intervalo de dispersión en el que se trabajó, se observó una máxima reducción de $18^{\circ}C$.

3. *La dispersión de masa* disminuye la concentración de oxígeno no quemado hasta en un 42% con respecto al caso en donde no hay efectos dispersivos. Aparentemente la dispersión de masa contribuye a la eficiencia de consumo de combustible y reduce la cantidad del oxígeno en exceso.
4. *Efectos de dispersión térmica en el perfil de temperatura.* La dispersión térmica incrementa la temperatura en la zona de transferencia de calor y alarga la escala de la zona de combustión, sin tener efecto en la temperatura del frente.
5. *Efectos de dispersión de masa en perfiles de concentración de oxígeno.* La dispersión de masa tiene marcados efectos en la zona de combustión en el dominio $-\infty < \xi < 0^-$. Alarga la escala de la zona de combustión e incrementa el consumo de oxígeno. Por sí misma, la dispersión de masa no tiene efectos en la concentración de oxígeno no quemado.
6. *Efectos de la porosidad del medio.* La porosidad incrementa la velocidad de propagación del frente, disminuye la concentración de oxígeno no quemado e incrementa ligeramente la temperatura del frente. En el perfil completo de temperatura, la porosidad por sí misma (i.e., cuando $Pe_T = 0$) incrementa la temperatura del frente de manera proporcional, mientras que en el perfil de concentración de oxígeno, acorta ligeramente la escala de la zona de combustión. Cuando entra en juego el efecto dispersivo i.e., cuando $Pe_T = 5000$, $Pe_D > 100$, en el perfil de temperatura, el efecto combinado es de incremento de la temperatura del frente con alargamiento de la escala de la zona de combustión. Sujeta al ambiente dispersivo, la porosidad no tiene efectos en la concentración de oxígeno.
7. *Efectos de la concentración de oxígeno inyectado.* El incremento de la concentración de oxígeno inyectado se traduce en un aumento en la velocidad de propagación del frente, aumenta ligeramente la concentración de oxígeno no quemado y prácticamente no tiene efectos en la temperatura del frente. La variación de la concentración de oxígeno inyectado no afecta el perfil completo de temperatura en ninguno de los casos, i.e., cuando $Pe_T = 0$ y con $Pe_T > 5000$. Sin embargo, en el perfil de la concentración

de oxígeno hay serias consecuencias cuando se trabaja a concentraciones inferiores a $0,25 \text{ kg/kg}$.

8. *Efectos de temperatura inicial del medio.* Un aumento en la temperatura del medio ocasiona un incremento en la velocidad del frente, una disminución de la concentración de oxígeno no quemado y una ligera disminución en la temperatura del frente el cual también se manifiesta en el perfil completo de la temperatura. No se observaron efectos de la temperatura en el perfil de concentración de oxígeno debido a que las ecuaciones respectivas no estaban acopladas.
9. *Efectos de la concentración inicial de combustible.* Un aumento en la concentración inicial de combustible depositado ocasiona un agudo incremento en la velocidad del frente, una marcada disminución de la concentración de oxígeno no quemado y un aumento en la temperatura del frente. En el perfil completo de la temperatura un aumento en la concentración inicial del combustible, provoca un alargamiento de la zona de combustión y una elevación de la temperatura del frente. Mientras que en el perfil de la concentración de oxígeno, reduce la fracción de oxígeno no quemado.
10. *Efectos de velocidad de propagación del frente.* En el perfil de la temperatura, una variación creciente de la velocidad de propagación del frente, inducida por un aumento en la velocidad de inyección, provoca un ligero incremento en la temperatura del frente y un marcado alargamiento de la escala de la zona de combustión. Mientras que en el perfil de concentración de oxígeno ocasiona un aumento en su consumo y se agudiza la naturaleza exponencial del mismo en regiones alejadas de la zona de reacción.
11. De manera general, los efectos individuales de cada variable analizada, se ven favorecidos en un ambiente dispersivo i.e., con $Pe_T = 5000$ y $Pe_D > 100$. Mientras que el efecto únicamente por dispersión es el de alargamiento/acortamiento de la escala de la zona de combustión.

Apéndice A

APROXIMACIONES ASINTÓTICAS

En este apartado se resumen algunas definiciones básicas de la teoría de las expansiones asintóticas. Estas fueron omitidas en el desarrollo del análisis asintótico para darle fluidez. Sin embargo, es necesario retomarlas para mejorar el entendimiento del desarrollo del problema. En la referencia [28] se puede consultar el detalle y los ejemplos de cada una.

A.1. *Expansión de Taylor*

Dada una función $f(\varepsilon)$, suponiendo que su $(n+1)$ ésima derivada $f^{(n+1)}$ es continua para $\varepsilon_a < \varepsilon < \varepsilon_b$, si ε_0 y ε son puntos en el intervalo $(\varepsilon_a, \varepsilon_b)$, entonces:

$$f(\varepsilon) = f(\varepsilon_0) + (\varepsilon - \varepsilon_0) f'(\varepsilon_0) + \dots + \frac{1}{n!} (\varepsilon - \varepsilon_0)^n f^{(n)}(\varepsilon_0) + R_{n+1} \quad (246)$$

$$\text{donde} \quad : \quad R_{n+1} = \frac{1}{(n+1)!} (\varepsilon - \varepsilon_0)^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \xi \text{ es un punto entre } \varepsilon_0 \text{ y } \varepsilon. \quad (247)$$

A.2. *Símbolo de Orden (símbolos de Bachmann-Landau)*

1. $f = O(\phi)$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$ significa que hay constantes k_0 y ε_1 (independiente de ε), tales que,

$$|f(\varepsilon)| \leq k_0 |\phi(\varepsilon)| \text{ para } \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_1 \quad (248)$$

2. $f = o(\phi)$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$ significa que para cada δ positivo, existe un ε_2 independiente de ε , tal que,

$$|f(\varepsilon)| \leq \delta |\phi(\varepsilon)| \text{ para } \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_2 \quad (249)$$

Una forma simple de determinar entre el caso 1 el 2 es la siguiente: Si el límite

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)}{\phi(\varepsilon)} \quad (250)$$

existe y es finito, entonces $f = O(\phi)$ en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$. En el caso de que el límite se cero, entonces $f = o(\phi)$. Algunas de las principales propiedades de los símbolos de orden son las siguientes:

i) $f = o(1)$ en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$, $\Leftrightarrow f$ está delimitado en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$

ii) $f = o(1)$ en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$, $\Leftrightarrow f \rightarrow 0$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$.

Una explicación final, es la de los símbolos \ll y \approx . Cuando se escribe $f(\varepsilon) \ll \phi(\varepsilon)$, significa que $f(\varepsilon) = o(\phi)$. Pero cuando se usa $\varepsilon \ll 1$, o cuando se dice que ε es pequeño significa que $\varepsilon \rightarrow 0$. El símbolo \approx no tiene otro significado particular más que el de aproximación de un valor numérico.

A.3. Aproximación asintótica

Dado $f(\varepsilon)$ y $\phi(\varepsilon)$ se dice que $\phi(\varepsilon)$ es una aproximación a $f(\varepsilon)$ cuando $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$ para cualquier $f = \phi + o(\phi)$ en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$. En este caso $f \sim \phi$ cuando ε tiende a ε_0 si se cumple que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)}{\phi(\varepsilon)} = 1 \quad (251)$$

A.4. Expansión asintótica

Las funciones ϕ_1, ϕ_2, \dots forman una secuencia asintótica o están bien ordenadas en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$ si y solo si $\phi_n = o(\phi_m)$ en $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$ para todo m y n que satisfaga $m < n$. Si ϕ_1, ϕ_2, \dots es una secuencia asintótica, entonces $f(\varepsilon)$ tiene una expansión asintótica para n términos con respecto a esta secuencia, si y solo si

$$f = \sum_{k=1}^m a_k \phi_k(\varepsilon) + o(\phi_m) \text{ para } m = 1, \dots, n \text{ en } \varepsilon \rightarrow \varepsilon_0.$$

donde los términos a_k 's son independientes de ε . En este caso:

$$f = a_1 \phi_1(\varepsilon) + a_2 \phi_2(\varepsilon) + \dots + a_n \phi_n(\varepsilon) \text{ en } \varepsilon \rightarrow \varepsilon_0$$

Dada una función, el método más común para encontrar una expansión asintótica es utilizando el teorema de Taylor, la regla de l'Hospital, o por intuición guiado por la física del evento.

Apéndice B

COMBUSTIÓN IN SITU

El término Métodos Térmicos de Recuperación Mejorada engloba a todas aquellas técnicas en las cuales se introduce calor en la formación principalmente para reducir la viscosidad del aceite y consecuentemente mejorar la recuperación. El calor puede ser generado en el yacimiento por un proceso conocido como Combustión In Situ (CIS). Una de las principales ventajas de este método térmico con respecto a la inyección de agua caliente o a la inyección de vapor, es que dado que el calor se genera in situ, las pérdidas son mínimas.

La combustión in situ es un método térmico de recuperación de hidrocarburos en el cual se inyecta un gas oxidante como el O_2 o el aire, para generar calor por la ignición de los hidrocarburos ligeros del yacimiento. En este proceso se origina un frente de combustión por medios naturales o artificiales, el cual es mantenido y propagado hacia el pozo productor mediante la inyección continua del agente oxidante. Parte del petróleo es quemado en el proceso (aproximadamente el 15 % del petróleo en sitio) y una fracción importante es llevada hacia la zona de producción por una combinación de empuje con gas (de los gases de combustión), vapor y agua. El proceso CIS, también es conocido como inyección de calor ya que describe el movimiento del frente de combustión dentro del yacimiento [29].

Cuando el agente oxidante inyectado entra en contacto con el aceite de la formación ocurren reacciones exotérmicas locales de oxidación, adición, eliminación y pirolisis que son sumamente complejas; en la Figura 48 se resumen las diferentes modalidades de reacciones que se dan en el proceso y un estudio detallado al respecto, se puede consultar en la referencia [30]. Debido a que todas son fuertemente dependiente de la temperatura, en términos generales las reacciones que tienen lugar en el proceso se engloban en dos grupos: Reacciones de Oxidación a alta temperatura (HTO por sus siglas en inglés) y reacciones de oxidación a baja temperatura (LTO por siglas en inglés). Estas a su vez, son dependientes de la naturaleza del aceite y de las características del yacimiento. En las reacciones que

ocurren a temperaturas menores a 200°C (LTO), debido a que hay adición de oxígeno en las cadenas de hidrocarburos, hay una variación en las propiedades del crudo: se incrementa la viscosidad, la temperatura de ebullición y la densidad, i.e., se crea localmente un combustible semisólido. Mientras que en las reacciones a alta temperatura (superiores a 350°C), las cuales son propiamente reacciones de combustión y pirolisis, se consume el combustible semisólido y se libera una gran cantidad de calor con lo que se favorece el factor de movilidad del aceite no quemado al disminuir su viscosidad y consecuentemente esto impacta de manera directa en el factor de recuperación de hidrocarburos.

REACCIONES QUIMICAS

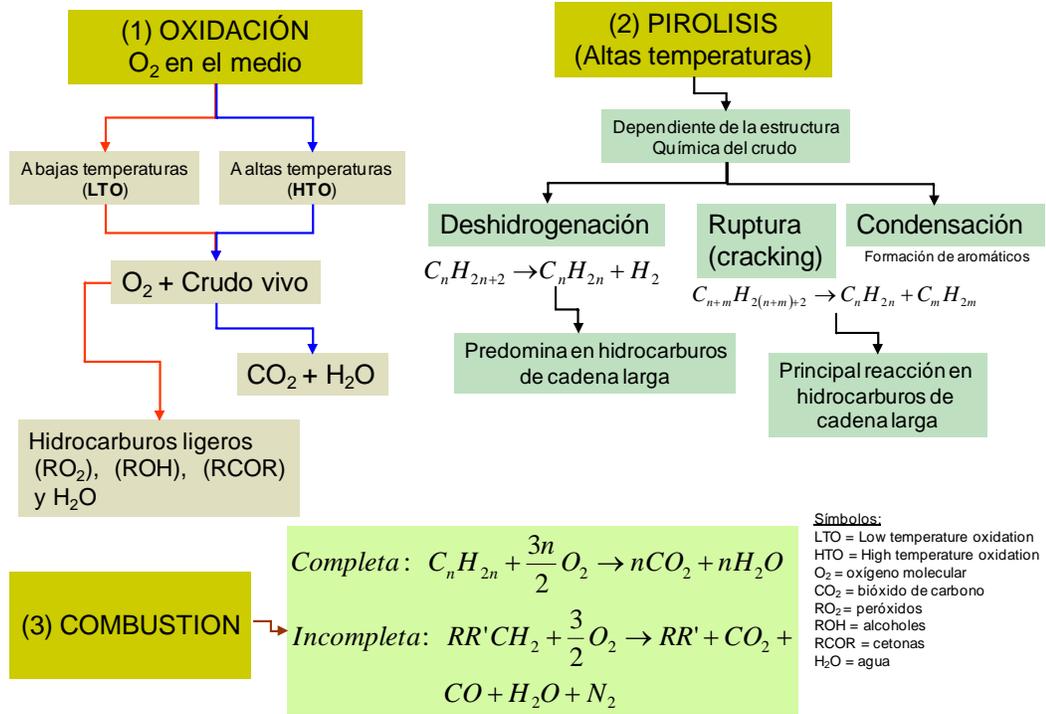


Figura 48: Grupo de reacciones químicas que ocurren en un proceso de combustión de aceite.

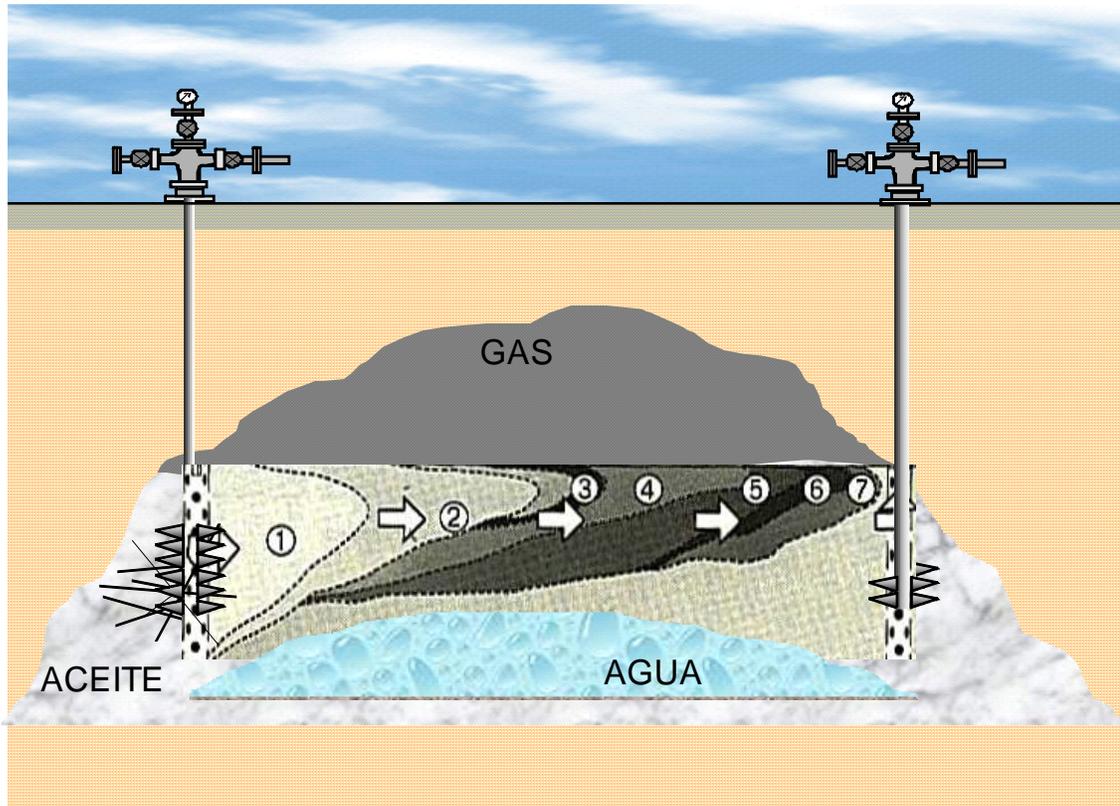
Una forma de caracterizar el proceso CIS es la que toma en cuenta la dirección en la que viajan tanto el frente como el aire inyectado. El proceso puede ser directo, cuando ambos viajan en la misma dirección del flujo, o inverso, cuando el frente se mueve en dirección opuesta al flujo de aire. Para fines de recuperación mejorada, la combustión directa es la más práctica. A su vez, la combustión directa también puede ser seca, cuando únicamente

se inyecta aire o aire enriquecido, o húmeda, cuando aire y agua son co-inyectados.

Este proceso de recuperación de hidrocarburos ha sido extensamente estudiado desde la década de los 50's, cuando un grupo de técnicos rusos iniciaron pruebas piloto de combustión in situ [31]. Para implementar este proceso, acondicionaron dos pozos, uno para la ignición e inyección del aire y otro para la producción. Para el acondicionamiento del pozo de ignición fueron instalados calentadores de fondo o ignitores, para iniciar la combustión y para posteriormente mantener uniforme el frente. Una vez creado el frente de combustión, inyectaron aire como agente oxidante con fines de mantener el frente y propagarlo hacia el pozo de producción. Durante esta etapa, después de la inyección de aire, el frente de combustión quema el petróleo crudo; la fracción pesada sirve como combustible para la combustión y la fracción ligera empuja al petróleo hacia el pozo productor (cf., Figura 49). El barrido del frente de combustión resulta en pulsos térmicos que localmente pueden exceder a los 600°C [31]. Actualmente, se sabe que son varios los mecanismos de recuperación los que se presentan en el proceso CIS. Pueden mencionarse el empuje por gas disuelto, el hinchamiento por efectos del CO₂, el barrido inmisible por CO₂, entre otros; sin embargo, el efecto dominante es la reducción de la viscosidad del petróleo no quemado..

En la evolución temporal y espacial del frente de combustión, pueden identificarse varias regiones características entre la zona de ignición y la de producción, esto como resultado del transporte de calor, masa y de las reacciones químicas que ocurren en el proceso. Estas regiones, identificables en función de la temperatura (cf. Figura 50) son: zona de quemado o ignición, zona de combustión, región de ruptura o cracking y evaporación, zona de condensación, zona del banco de agua caliente, zona del banco de aceite, y zona inicial [32]-[36]. Los productos de la combustión son petróleo no quemado (crudo), gases de combustión, hidrocarburos ligeros y agua. La variable que domina los límites entre las zonas, es la temperatura. El comportamiento de estas diferentes fases, se puede describir como sigue:

1. Zona de quemado: Esta zona contiene aire y posiblemente residuos sólidos del petróleo quemado. Es en esta zona donde ocurre la ignición, la cual puede ser iniciada por medios naturales o artificiales empleando quemadores de fondo de pozo, calentadores



- | | |
|--------------------------------|-------------------------------|
| 1 Zona de inyección | 5 Zona de condensación |
| 2 Zona de vapor de aire y agua | 6 Banco de aceite |
| 3 Zona del frente de reacción | 7 Zona de gases de combustión |
| 4 Zona de vaporización | |

Figura 49: Representación esquemática a escala de yacimiento de zonas identificables durante un proceso de combustión in situ.

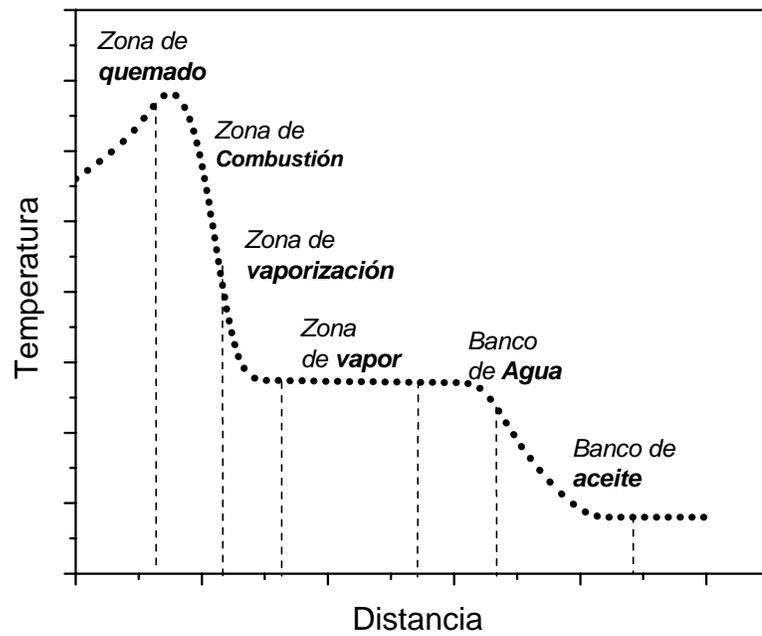


Figura 50: Perfil característico de la temperatura en función de la distancia, durante un proceso de combustión in situ en el cual el frente se desplaza en la misma dirección de flujo que el aire seco.

eléctricos o agentes químicos. Cuando el O_2 es inyectado en la formación, el petróleo crudo local se oxida exotérmicamente. Si la generación de calor es rápida y en cantidades suficientes como para compensar las pérdidas de calor, el banco de petróleo puede prenderse espontáneamente y a éste proceso se le conoce como auto ignición. En esta región la temperatura se incrementa monótonamente aguas arriba hasta alcanzar la zona de combustión.

2. Zona de combustión. En esta zona el combustible sólido y el oxidante inyectado reaccionan exotérmicamente para generar gases de combustión (óxidos de carbono y vapores súper calentados). En esta zona se pueden alcanzar temperaturas mayores a $600^\circ C$. A esta temperatura todos los fluidos líquidos se evaporan por completo.
3. Zona de evaporación. Es una región de ruptura o cracking y evaporación. Las altas temperaturas en la zona anterior causan que las fracciones más ligeras del petróleo se vaporicen, dejando un carbón residual formado por las fracciones más pesadas i.e., coque, el cual sirve como combustible para mantener el avance del frente.
4. Zona de condensación o de agua caliente. En esta zona debido a la distancia del frente de combustión, el enfriamiento causa que los hidrocarburos ligeros se condensen y que el vapor de agua se convierta en un banco de agua caliente, con esto el petróleo miscible es desplazado, mientras que el vapor condensado lo adelgaza, y los gases de combustión ayudan a que se desplace hacia el pozo productor.
5. Zona del banco de petróleo. En esta zona se genera un banco de petróleo que contiene petróleo crudo no modificado, agua y gases de combustión cuya temperatura es cercana a la temperatura de la formación.
6. Zona inicial. El banco de petróleo se enfría a medida que se mueve hacia los pozos productores y la temperatura disminuye hasta un valor muy cercano a la temperatura de la formación. El CO_2 contenido en los gases de combustión es benéfico debido a su disolución en el crudo, lo cual produce hinchamiento y reducción de su viscosidad.

En la literatura especializada el tema de la combustión in situ en el marco de los

métodos de recuperación mejorada, esta ampliamente tratado. Para aplicaciones prácticas, en los textos de Sarathi [34], Paris de Ferrer [29] y Baibakov [31], se encuentra resumida información sobre criterios de diseño e implementación de este método, parámetros favorables y desfavorables del yacimiento, equipamiento necesario para llevar el proceso a escala piloto, así como algunos casos experimentales de campo.

Apéndice C

DISPERSIÓN

En el flujo de fluidos en el medio poroso debe existir de manera adicional al transporte convectivo y a la difusión molecular, un mecanismo de transferencia generalmente conocido como dispersión causada por fluctuaciones espaciales del campo de velocidades del fluido, i.e., por la desviación de los valores locales de velocidad en el poro con respecto al valor promedio. Estas fluctuaciones en la velocidad parecen causar un tipo de mezclado difusivo, conocido como difusión convectiva (dispersión). El proceso de la dispersión es dominante con respecto al de la difusión molecular, cuando el espectro de heterogeneidades del medio es amplio [37], [38].

En el proceso de desplazamiento miscible entre dos fluidos, estos se mezclan debido a la estructura del poro por dispersión mecánica, a la difusión y a la dispersión hidrodinámica. Si hay diferencias de temperatura también se mezclan por convección difusiva o mezclado convectivo, también denominado dispersión térmica. La dispersión mecánica es el mezclado resultante del movimiento de las partículas del fluido a través de la trayectoria tortuosa del medio. La dispersión hidrodinámica es el mezclado resultante del perfil de velocidades del medio poroso ya que el fluido en las paredes se mueve más lentamente que el fluido en el centro de los poros, aún en ausencia de difusión molecular, el perfil de velocidades producido cambia con la adherencia del fluido en las paredes, esto ocasiona que las partículas del fluido estén en diferentes posiciones radiales y al moverse unas con otras causan zonas de mezclado.

Dado que algunos autores consideran a la dispersión como un mecanismo de mezclado macroscópico causado por el flujo en el medio poroso, a continuación se describen algunos de los factores que causan este mezclado macroscópico [39].

1. Difusión molecular. Si las escalas de tiempo son lo suficientemente grandes, la dispersión resulta de la difusión molecular.

2. Tortuosidad del medio. El hecho de que los canales de flujo en el medio poroso sean tortuosos significa que los elementos del fluido se mueven a diferentes distancias, y si vienen a la misma velocidad, no recorren la misma distancia.
3. Mojabilidad de las trayectorias de flujo. La dispersión puede resultar del hecho de que no todos los poros del medio son accesibles a un elemento de fluido después de que éste entró en alguna otra trayectoria de flujo ya que la conectividad del medio no es completa.
4. Recirculación causada por regiones locales de reducción de la presión. La conversión de energía mecánica en cinética, da lugar a una región local de baja presión, si esta región es accesible al fluido el cual ya ha pasado previamente por la misma, hay recirculación y con ello dispersión.
5. Heterogeneidades del medio.
6. Presencia de remolinos. Si el flujo dentro de los poros individuales, por alguna razón se vuelve turbulento, el mezclado resulta de la migración de los vórtices.
7. Hidrodinámica a nivel de poro i.e., estructura del poro, velocidad en el poro, flujo inverso, si es estructura ordenada o desordenada etc.

La dispersión depende de las no uniformidades (aún cuando la permeabilidad promedio es la misma) y es un efecto de heterogeneidad de segundo orden [40]-[43].

C.1. Dispersión de masa

Existen fundamentalmente dos tipos de dispersión de masa. El primero corresponde a la Dispersión longitudinal dada por la ec. (3), que va en dirección del movimiento del fluido y el otro es Dispersión transversal, esto es, en la dirección transversal. No necesariamente deben ser iguales. De acuerdo con Perkins et al. [40], estos coeficientes de dispersión pueden calcularse a partir de:

$$k_l = \frac{D_0}{F\phi} + 0,5(\sigma d_p)|U| \cong \alpha_l |U| , \quad (252)$$

$$k_t = \frac{D_0}{F\phi} + 0,0157(U\sigma d_p) , \quad (253)$$

donde U es la velocidad promedio, σ es una medida de no-homogeneidad, d_p es el diámetro promedio del poro, D_0 es el coeficiente molecular de difusión, F es el factor de resistividad eléctrica de formación, ϕ es la porosidad del medio y α_l es la dispersibilidad longitudinal del medio permeable.

C.2. Dispersión térmica

Durante la convección forzada o en la convección natural en medio poroso, puede ser significativa la transferencia de calor debido al mezclado hidrodinámico del fluido intersticial a escala de poro adicional a la difusión molecular del calor. A este efecto se le conoce como dispersión térmica [44]. La dispersión térmica resulta de un aparente incremento en la conductividad térmica en el medio poroso. Para tomar en cuenta la dispersión térmica, se asume que la conductividad térmica efectiva consta de dos términos: conductividad estacionaria y conductividad dispersiva. En un flujo en 2-D en un medio poroso isotrópico, se deben considerar los efectos de dispersión térmica en ambas direcciones: longitudinal y transversal. Basado en resultados experimentales, la conductividad térmica efectiva puede expresarse como:

$$\lambda_{eff} = \lambda_m + c\lambda_f \text{Pr} \left(\frac{\rho_f u_f d_p}{\eta_f} \right), \quad (254)$$

donde $\lambda_m = \phi\lambda_f + (1 - \phi)\lambda_s$ representa la conductividad térmica de la matriz porosa, c es una constante adimensional del diseño experimental (0.1 para dispersión transversal), d_p es el diámetro promedio de poro, λ_f es la conductividad térmica del fluido, λ_s es la conductividad térmica del sólido, Pr es el número de Prandtl $\left(\frac{\eta_f c_f}{\lambda_f} \right)$: c_f es el calor específico del fluido, ρ_f es la densidad volumétrica, u_f es la velocidad del fluido, ϕ es la porosidad, and η_f es la viscosidad dinámica del fluido. El segundo término de la ecuación (254) corresponde a la dispersión térmica.

Apéndice D

CONDICIONES DE ACOPLAMIENTO

Para conectar las regiones de transferencia de calor ($\xi \rightarrow 0^-$) y de combustión ($\xi \rightarrow 0^+$) con la zona de reacción ($\xi \sim 0$) se determinaron condiciones de acoplamiento, o de pegado. Estas fueron obtenidas de la siguiente manera.

Primero se hizo una expansión asintótica de las variables de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \theta &\sim \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{Z}\theta_1(\xi, t) + \dots; \xi < 0 \\ \Theta_0(X, t) + \frac{1}{Z}\Theta_1(X, t) + \dots; \xi \sim 0 \\ \theta_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}\theta_1(\xi, t) + \dots; \xi > 0 \end{array} \right\}, \\
 Y &\sim \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{Z}Y_1(\xi, t) + \dots; \xi < 0 \\ \mathbf{Y}_0(X, t) + \frac{1}{Z}\mathbf{Y}_1(X, t) + \dots; \xi \sim 0 \\ Y_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}Y_1(\xi, t) + \dots; \xi > 0 \end{array} \right\}, \\
 \eta &\sim \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{Z}\eta_1(\xi, t) + \dots; \xi < 0 \\ \boldsymbol{\eta}_0(X, t) + \frac{1}{Z}\boldsymbol{\eta}_1(X, t) + \dots; \xi \sim 0 \\ \eta_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}\eta_1(\xi, t) + \dots; \xi > 0 \end{array} \right\}, \\
 p &\sim \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{Z}p_1(\xi, t) + \dots; \xi < 0 \\ \mathbf{p}_0(X, t) + \frac{1}{Z}\mathbf{p}_1(X, t) + \dots; \xi \sim 0 \\ p_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}p_1(\xi, t) + \dots; \xi > 0 \end{array} \right\}, \\
 \rho &\sim \left\{ \begin{array}{l} 1 + \frac{1}{Z}\rho_1(\xi, t) + \dots; \xi < 0 \\ \boldsymbol{\rho}_0(X, t) + \frac{1}{Z}\boldsymbol{\rho}_1(X, t) + \dots; \xi \sim 0 \\ \rho_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}\rho_1(\xi, t) + \dots; \xi > 0 \end{array} \right\}, \\
 u &\sim \left\{ \begin{array}{l} u_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}u_1(\xi, t) + \dots; \xi < 0 \\ \mathbf{u}_0(X, t) + \frac{1}{Z}\mathbf{u}_1(X, t) + \dots; \xi \sim 0 \\ u_0(\xi, t) + \frac{1}{Z}u_1(\xi, t) + \dots; \xi > 0 \end{array} \right\}, \\
 f_t &\sim \{ \mathbf{f}_{t0}(t) + \dots; \xi \sim 0 \}.
 \end{aligned} \tag{255}$$

El procedimiento se explica para la temperatura θ . Primero se tomaron las soluciones expandidas para cada zona y se les hizo una nueva expansión en series de Taylor alrededor de $\xi = 0$, expresado en términos de X . Para la zona externa y hasta el segundo orden, se tiene:

$$O(0) : \theta_0(\xi, t) = \theta_0(0^\pm) + \frac{X}{Z} \frac{\partial \theta_0}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} + \frac{X^2}{2Z^2} \frac{\partial^2 \theta_0}{\partial \xi^2} \Big|_{0^\pm}, \quad (256)$$

$$O(1) : \theta_1(\xi, t) = \frac{1}{Z} \theta_1(0^\pm) + \frac{X}{Z^2} \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} + \frac{X^2}{2Z^3} \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \xi^2} \Big|_{0^\pm}, \quad (257)$$

$$O(2) : \theta_2(\xi, t) = \frac{1}{Z^2} \theta_2(0^\pm) + \frac{X}{Z^3} \frac{\partial \theta_2}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} + \frac{X^2}{2Z^4} \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \xi^2} \Big|_{0^\pm}, \quad (258)$$

y para la zona de reacción:

$$\Theta_0(X) = \Theta_0(X) + \frac{1}{Z} \Theta_1(X) + \frac{1}{Z^2} \Theta_2(X). \quad (259)$$

Para cumplir con una de las restricciones básicas del método de las expansiones asintóticas acopladas, la cual no permite variaciones de temperatura en el orden principal detrás del frente de reacción, se tiene que $\theta_0(0^-) = 1$; $Y_0(0^-) = 1$, $\eta_0(0^-) = 1$, $\rho_0(0^-) = 1$; consecuentemente las derivadas de esas funciones son $\frac{\partial \theta_0}{\partial \xi} \Big|_{0^-} = \frac{\partial Y_0}{\partial \xi} \Big|_{0^-} = \frac{\partial \eta_0}{\partial \xi} \Big|_{0^-} = \frac{\partial \rho_0}{\partial \xi} \Big|_{0^-} = 0$.

Aplicando el límite cuando $X \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \lim_{X \rightarrow \pm\infty} \left[\theta_0(0^\pm) + \frac{X}{Z} \frac{\partial \theta_0}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} + \frac{X^2}{2Z^2} \frac{\partial^2 \theta_0}{\partial \xi^2} \Big|_{0^\pm} + \frac{1}{Z} \theta_1(0^\pm) + \frac{X}{Z^2} \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} + \frac{1}{Z^2} \theta_2(0^\pm) \right. \\ \left. - \left(\Theta_0(X) + \frac{1}{Z} \Theta_1(X) + \frac{1}{Z^2} \Theta_2(X) \right) \right] = 0, \quad (260) \end{aligned}$$

y reuniendo términos en potencias de Z , se tiene que:

$$\lim_{X \rightarrow \pm\infty} [\theta_0(0^\pm) - \Theta_0(X)] = 0, \quad (261)$$

$$\lim_{X \rightarrow \pm\infty} \left[\theta_1(0^\pm) + X \frac{\partial \theta_0}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} - \Theta_1(X) \right] = 0, \quad (262)$$

$$\text{y } \lim_{X \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{Z^2} \left[\theta_2(0^\pm) + X \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} \Big|_{0^\pm} + \frac{X^2}{2} \frac{\partial^2 \theta_0}{\partial \xi^2} \Big|_{0^\pm} - \Theta_2(X) \right] = 0. \quad (263)$$

De la continuidad de la expansión de la solución para la temperatura, i.e., $\frac{1}{2}\theta_1(0^-) + 1 = \Theta_0(X) + \frac{1}{2}\Theta_0(X) = \theta_0(0^+) + \frac{1}{2}\theta_1(0^+)$, se observa que $\theta_0(0^-) = 1$, y con ello se cumple con la condición de temperatura constante en el orden principal, detrás de la zona de reacción, i.e., $\left. \frac{\partial\theta_0}{\partial\xi} \right|_{\xi \rightarrow 0^-} = 0$. Por otra parte, como se demostró en la ec. (??), dentro de la zona de reacción y en el orden principal $\frac{\partial\Theta_0}{\partial X} = 0$, esto es, tampoco hay variación de la temperatura. Entonces, de la ecuación (262) y comparando las derivadas de las soluciones externas se tienen que:

$$\lim_{X \rightarrow -\infty} [\theta_1(0^-) - \Theta_1(X)] = 0, \quad (264)$$

y en $\lim_{X \rightarrow \infty}: \theta_1(0^+) = \Theta_1(X)$ por lo tanto:

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \left[\left. \frac{\partial\theta_0}{\partial\xi} \right|_{0^+} - \frac{\partial\Theta_1}{\partial X} \right] = 0. \quad (265)$$

Las ecs. (261,264 y 265), constituyen las condiciones de acoplamiento de la temperatura entre las zonas. Procediendo de igual manera, se pueden definir las respectivas condiciones para las demás variables. Haciendo esto, se tiene para la concentración de oxígeno, y grado de conversión, respectivamente:

$$\lim_{X \rightarrow \pm\infty} [Y_0(0^\pm) - \mathbf{Y}_0(X)] = 0, \quad (266)$$

$$\lim_{X \rightarrow -\infty} [Y_1(0^-) - \mathbf{Y}_1(X)] = 0, \quad (267)$$

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \left[\left. \frac{\partial Y_0}{\partial\xi} \right|_{0^+} - \frac{\partial \mathbf{Y}_1}{\partial X} \right] = 0, \quad (268)$$

$$\lim_{X \rightarrow -\infty} [\eta_0(0^\pm) - \boldsymbol{\eta}_0(X)] = 0, \quad (269)$$

$$\lim_{X \rightarrow -\infty} [\eta_1(0^-) - \boldsymbol{\eta}_1(X)] = 0, \quad (270)$$

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \left[\left. \frac{\partial\eta_0}{\partial\xi} \right|_{0^+} - \frac{\partial\boldsymbol{\eta}_1}{\partial X} \right] = 0, \quad (271)$$

y para la presión, densidad y velocidad se tiene, respectivamente:

$$\lim_{X \rightarrow \pm\infty} [p_0(0^\pm) - \mathbf{p}_0(X)] = 0, \quad (272)$$

$$\lim_{X \rightarrow \pm\infty} [\rho_0(0^\pm) - \boldsymbol{\rho}_0(X)] = 0, \quad (273)$$

$$\text{y} \quad \lim_{X \rightarrow \pm\infty} [u_0(0^\pm) - \mathbf{u}_0(X)] = 0. \quad (274)$$

Puede observarse que entre las variables, el acoplamiento es directo, i.e., orden principal de la variable externa con orden principal de su par interna. Igual en la corrección de primer orden. Mientras que entre las derivadas de las variables, el orden principal de la zona externa se acopla con la corrección de primer orden de la zona interna.

REFERENCIAS

- [1] Babadagli, T., 2003. Evaluation of EOR methods for heavy-oil recovery in naturally fractured reservoirs. *J. Pet. Sci. Eng.* 39,25-37.
- [2] Turta, A.T., and Singhal, A.K., 2001. Reservoir engineering aspects of light-oil recovery by air injection. *SPE* 8, 336-344.
- [3] Lore, J.S., Eichhubl, P., Aydin, A., 2002. Alteration and fracturing of siliceous mudstone during in situ combustion, Orcutt, California, *J. Pet. Sci. Eng.* 36, 169-182.
- [4] Akkutlu, I.Y., Yortsos, Y.C., 2003. The dynamics of in situ combustion fronts in porous media. *Combustion and flame* 134, 229-247.
- [5] Armento, M.E., Miller, C.A., Mellon, C., 1977. Stability of moving combustion fronts in porous media. *SPE* 6168.
- [6] Matalon, M., Matkowsky, B.J., 1982. Flames as gasdynamic discontinuities. *J. Fluid Mech.* 124, 239-240.
- [7] Britten, J.A., Krantz, W.B., 1985. Linear stability of planar reverse combustion in porous media. *Combustion and flame* 65,151-161.
- [8] Britten, J.A., Krantz, W.B., 1986. Asymptotic structure of plane nonadiabatic reverse combustion fronts in porous media. *Combustion and flame* 65, 151-161.
- [9] Schult, D.A., Matkowsky, B.J., Volpert, V.A., Fernandez-Pello, A.C., 1995. Propagation and extinction of forced opposed flow smolder waves. *Combustion and flame* 101, 471-490.
- [10] Schult, D.A., Matkowsky, B.J., Volpert, V.A., Fernandez-Pello, A.C., 1996. Forced forward smolder combustion. *Combustion and flame* 104,1-26.
- [11] Schult, D.A., Bayliss, A., Matkowsky, B.J., 1998. Traveling waves in natural counterflow filtration combustion and their stability. *SIAM J. Appl. Math.* 58 (3), 806-852.
- [12] Schult, D.A., 1999. Matched asymptotic expansions and the closure problem for combustion waves. *SIAM J. Appl. Math.* 60 (1), 135-165.
- [13] Decker, M.A., Schult, D.A., 2004. Dynamics of smolder waves near extinction. *Combustion theory and modelling* 8, 494-512.
- [14] Aldushin, A. P., Matkowsky, B.J., Volpert, V.A., 1995. Stoichiometric flames and their stability. *Combustion and flame* 101, 15-25.
- [15] Aldushin, A.P., Matkowsky, B.J., 1998. Instabilities, fingering, and the Saffman-Taylor problem in filtration combustion. *Combust. Sci. Tech.* 133, 293-341.

- [16] Xin, J., Front propagation in heterogeneous media, 2000. SIAM Review 42, 161-230.
- [17] Gubernov, V., Mercer, G.N., Sidhu, H.S., Weber, R.O., 2003. Evans function stability of combustion waves. SIAM J. Appl. Math. 63 (4), 1259-1275.
- [18] Agca, C., Yortsos, Y.C., 1985. Steady-state analysis of in situ combustion. SPE California meeting. Bakersfield, California, March 27-29. SPE 13624.
- [19] Da-Mota, J.C., Dantas, W.B., Marchesin, D., 2002. Combustion front in porous media. SIAM J. Appl. Math. 62 (6), 2175.
- [20] Akkutlu, I.Y., Yortsos, Y.C., 2000. The dynamics of in situ combustion fronts in porous media. Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas, Texas, October 1-4. SPE 63225.
- [21] Akkutlu, I.Y., Yortsos, Y.C., 2002. The effect of heterogeneity on in situ combustion: the propagation of combustion front in layered porous media. SPE/DOE Improved Oil Recovery Symposium. Tulsa, Oklahoma, April 13-17. SPE 75128.
- [22] Akkutlu, I.Y., Marchesin, D., De Douza, A.J., Yortsos, Y.C., 2004. Wave sequences for solid fuel in situ combustion in porous media. Notas de Matematica. Universidad Federal de Campina Grande Paraiba-Brasil. 25 pp.
- [23] Lu, C., Yortsos, Y.C., 2001. A pore network model of in situ combustion in porous media. SPE International Thermal Operations and Heavy Oil Symposium. Margarita, Venezuela, March 12-14. SPE 69705.
- [24] Williams F.A., 1985. Combustion theory. Benjamin Cummings Publishing Company Inc, California, 680 pp.
- [25] Informe Anual de Recuperación Secundaria y Mejorada en México, 2007. Gerencia de Exploración de Yacimientos, GEY, Petróleos Mexicanos, PEMEX.
- [26] Bender, C.M., Orszag, S.A., 1999. Advanced mathematical methods for scientific and engineers I. Springer-Verlag, New York, 593 pp.
- [27] Sahimi, M., 1995. Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock. VHC Verlagsgesellschaft mbH, Germany, 482 pp.
- [28] Holmes, M.H., 1995. Introduction to perturbation methods. Springer-Verlag, New York, 337 pp.
- [29] Paris de Ferrer, M., 2001. Inyección de agua y gas en yacimientos petrolíferos. Astro Delta, Maracaibo, Venezuela, 390 pp.
- [30] Burger, J.C., and Sauquet, B.C., 1972. Chemical aspects of in situ combustion - heat of combustion and kinetics. Soc. Pet. Eng. J. 54-66.
- [31] Baibakov, N.K., Garushev, A.R., 1989. Thermal methods of petroleum production, developments in petroleum sciences 25. Elsevier, New York.
- [32] Donaldson, E.C., Chilingarian, G.V., Yen, T.F., 1985. Enhanced Oil Recovery, I Fundamentals and analysis. Elsevier, New York, 357 pp.

- [33] Butler, R.M., 1991. Thermal Recovery of Oil and Bitumen, Prentice Hall, New Jersey, 496 pp.
- [34] Sarathi, S.P., 1999. In situ combustion handbook, principles and practices. DOE/PC/91008-0374, 403 pp.
- [35] Prats, M.,1992. Thermal recovery. SPE monograph series. SPE of AIME.
- [36] Boberg, T.C., 1998. Thermal methods of oil recovery. An Exxon monograph series, John Wiley and Sons, New York,411 pp.
- [37] Barrenblat, G.I., Entov, V.M., Ryzhik, V.M., 1990. Theory of fluids flows through natural rocks. Kluwer Academic Publishers, Netherlands. 395 pp.
- [38] Arya, A., Hewett, T.A., Larson, R.G., Lake, L.W., 1988. Dispersion and reservoir heterogeneity. SPERE, 2, 139-148.
- [39] Greenkorn A., 1983. Flow phenomena in porous media. Mercel Dekker, New York.
- [40] Perkins, T.K., Johnston, O.C., 1963. A review of diffusion and dispersion in porous media. Soc. Pet. Eng. J. 70-84.
- [41] Niemann, E.H., Greenkonr, R.A., Eckert, R.E., 1971. Dispersion during flow in nonuniform heterogeneous porous media. SPE 3365.
- [42] Kelkar, B.G., Gupta, S.P.,1988. The effects of small-scale heterogeneities on the effective dispersivity of porous media. SPE Enhanced Oil Recovery Symposium, Tulsa, Oklahoma, April 16-21. SPE 17339.
- [43] Lake, L.W.,1989. Enhanced oil recovery. Prentice Hall, New York, 550 pp.
- [44] Kuznetzov, A.V., 2001. Influence of thermal dispersion on forced convection in a composite parallel-plate channel. Angew Math, Phys. 52, 135-150.