



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

PROGRAMA DE MESTRIA Y DOCTORADO EN INGENIERIA

UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE
MEXICO

FACULTAD DE INGENIERIA

**“DINAMICA DE FLUJO DE FLUIDOS EN UN PROCESO DE
DESPLAZAMIENTO INMISCIBLE DE DOS FASES EN MEDIOS
POROSOS”**

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERIA

INGENIERIA PETROLERA Y GAS NATURAL - YACIMIENTOS

P R E S E N T A:

ING. FRANCISCO JAVIER ROSADO VAZQUEZ



TUTOR:
DR. FERNANDO RODRIGUEZ DE LA GARZA

COTUTOR:
DR. EDGAR R. RANGEL GERMAN

MEXICO, D.F.

SEPTIEMBRE DE 2007

JURADO ASIGNADO

Presidente: Dr. Fernando Samaniego Verduzco.
Secretario: Dr. Fernando Rodríguez de la Garza.
Vocal: Dr. Edgar R. Rangel Germán.
1^{er}. Suplente: Dr. Jesús Rivera Rodríguez.
2^{do}. Suplente: Dr. Víctor H. Arana Ortiz.

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

CIUDAD UNIVERSITARIA, MEXICO D. F.

TUTOR DE TESIS:

Dr. Fernando Rodríguez de la Garza.

FIRMA

COTUTOR DE TESIS:

Dr. Edgar R. Rangel Germán.

FIRMA

Dedicatoria

Este trabajo de tesis esta dedicado a mi amada hijita, Danielita que es mi motivo principal para salir adelante en la vida. Y a pesar que estemos separados siempre la tengo en mis pensamientos. También se la dedico a mi madre, por darme la vida, amor y la formación académica que me permitió cursar esta maestría con éxito y seguir adelante con mis proyectos de vida futuros.

Agradecimientos

Le agradezco de todo corazón a mi familia, que han sido mi apoyo fundamental para vencer las adversidades que he tenido durante el curso de esta maestría. A mi madre por darme su amor incondicional y comprensión. A mi hermano Memo que ha sido como un padre para mí, aconsejándome y apoyándome en todos los aspectos. A mi hermano Eduardo del cual he aprendido mucho, por las múltiples discusiones que solemos tener acerca de diferentes temas. A mi hermanita Esther por todo el apoyo que me ha dado desde que inicié la maestría. A todos les agradezco mucho la comprensión que han tenido conmigo.

Agradezco la oportunidad que me brindó el Posgrado de Ingeniería Petrolera y Gas Natural, al permitirme ser parte de su programa de maestría, y así conocer a mis profesores que me guiaron en el curso de la maestría: Dr. Fernando Rodríguez de la Garza, Dr. Edgar Rangel Germán, Dr. Fernando Samaniego Verduzco, Dr. Jesús Rivera Rodríguez, Dr. Héber Cinco Ley, y el Dr. Víctor Arana Ortíz.

Principalmente agradezco al Dr. Fernando Rodríguez de la Garza y al Dr. Edgar Rangel Germán por ser mis tutores de tesis, dedicarme el tiempo necesario para aclarar mis dudas, su paciencia al explicarme sus ideas y conceptos. También, por ayudarme a realizar mi tesis, mis publicaciones en la SPE y presentación en la SPE; que sin sus intervenciones ni lo hubiera imaginado.

Estoy agradecido con el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo brindado que me permitió cursar mis estudios de maestría. También agradezco el apoyo que me proporcionó GLOBAL INDUSTRIES, Ltd. para finalizar mis cursos de maestría y mi tesis.

Le agradezco a mi grupo de sinodales el tiempo requerido para la revisión de mi tesis, enriqueciéndola con sus observaciones y correcciones.

Índice

Índice	V
Lista de tablas	VIII
Lista de figuras	IX
Resumen	XIV
Abstract	XVI
Objetivo	XVII
Alcances	XVII
Introducción	XVIII
1. Capítulo 1. Factores que influyen en el desplazamiento de aceite por agua	1
1.1. Tensión interfacial.....	1
1.2. Mojabilidad.....	2
1.3. Presión capilar.....	4
1.4. Densidad.....	5
1.5. Peso específico.....	5
1.6. Permeabilidades relativas.....	6
1.7. Movilidad.....	6
1.8. Relación de movilidades.....	7
2. Capítulo 2. Revisión bibliográfica	9
2.1. Modelo de permeabilidades relativas.....	9
2.2. Modelos lineales de flujo.....	11
2.3. Modelos no-lineales de flujo.....	15
3. Capítulo 3. Modelo analítico del desplazamiento de aceite por agua	19
3.1. Ecuación de conservación.....	20
3.2. Ecuación de movimiento.....	23
3.3. Modelo analítico de flujo.....	25
3.3.1. Ecuación general de flujo de dos fases.....	25
3.3.2. Ecuación no-lineal de tipo difusivo-convectivo.....	28

3.4. Efecto de las propiedades del sistema roca-fluidos en el modelo analítico.....	32
3.4.1. Números adimensionales.....	32
3.4.2. Permeabilidades relativas.....	33
4. Capítulo 4. Solución numérica de la ecuación de difusión-convección.....	47
4.1. Aproximación en diferencias finitas.....	48
4.2. Método de elemento finito (MEF).....	50
4.2.1. Método de elemento finito de Galerkin.....	50
4.2.2. Aproximación en elemento finito con polinomios lineales.....	52
4.2.3. Aproximación en elemento finito con polinomios cuadráticos.....	55
4.3. Comparación de los esquemas numéricos.....	58
4.4. Dispersión numérica.....	69
5. Capítulo 5. Solución numérica de la ecuación no-lineal de tipo difusivo-convectivo.....	76
5.1. Manejo de los coeficientes no-lineales.....	77
5.2. Método de iteración newtoniana o totalmente implícito.....	81
5.3. Aproximación del modelo de flujo no-lineal.....	83
5.3.1. Diferencias finitas.....	83
5.3.2. Elemento finito de Galerkin función base lineal.....	85
5.3.3. Elemento finito de Galerkin función base cuadrática.....	88
5.4. Validación de las soluciones numéricas.....	94
5.4.1. Solución analítica de la ecuación de difusión-convección.....	94
5.4.2. Solución analítica de Buckley y Leverett.....	98
5.5. Análisis numérico del término difusivo en el modelo no-lineal de flujo.	103
5.6. Efectos de las propiedades del sistema roca-fluido en la solución numérica.....	107
6. Capítulo 6. Efectos capilares, gravitacionales y viscosos en el desplazamiento de aceite por agua.....	114
6.1. Propiedades de flujo.....	115
6.2. Efectos viscosos.....	117
6.3. Efectos convectivos.....	120
6.4. Efectos capilares y viscosos.....	129

6.5. Efectos capilares, gravitacionales y viscosos.....	137
7. Capítulo 7. Conclusiones y recomendaciones.....	147
7.1. Conclusiones.....	147
7.2. Recomendaciones.....	151
Nomenclatura.....	152
Referencias.....	155
Apéndice A. Solución analítica de la “EDC” para el caso semi-infinito.....	158
Apéndice B. Desarrollo del modelo analítico del desplazamiento de aceite por agua.....	162
Apéndice C. Teoría de aproximación polinomial.....	172
Apéndice D. Aproximación en diferencias finitas.....	176
Apéndice E. Aproximación en elemento finito con funciones base lineal.....	181
Apéndice F. Aproximación en elemento finito con funciones base cuadrática.....	186
Apéndice G. Aproximación del modelo no-lineal en diferencias finitas.....	195
Apéndice H. Aproximación del modelo no-lineal en EFG con funciones base lineal.....	199
Apéndice I. Aproximación del modelo no-lineal en EFG con funciones base cuadrática.....	206
Apéndice J. Solución analítica por el método de Buckley y Leverett.....	223

Lista de Tablas

5.1	Datos correspondientes a los graficados en la figura 5.1.....	95
5.2	Datos correspondientes a los graficados en la figura 5.3.....	97
5.3	Áreas bajo los perfiles de la figura 5.15 para cada t_D	107
6.1	Propiedades de flujo.....	114
6.2	Datos de la figura 6.13. La última fila es \bar{S} de la ecuación (6.2).....	129
6.3a	Datos de la figura 6.14, para $L = 1m$	130
6.3b	Datos de la figura 6.14, para $L = 5m$	131
6.4a	Datos de la figura 6.19, para $L = 1m$ y $N_{CG} = 0.3924$	137
6.4b	Datos de la figura 6.19, para $L = 5m$ y $N_{CG} = 1.9620$	138

Lista de Figuras

1.1	Histéresis del ángulo de contacto, (a) fase mojante incrementa (imbibición); (b) fase mojante decrementa (drene). Figura tomada de referencia 7.....	3
3.1	Curvas típicas de permeabilidades relativas por el modelo de Corey.....	34
3.2	Función de viscosidad para $M=1$, variando $no=nw=n$	35
3.3	Función de gravedad para $M=1$, variando $no=nw=n$	36
3.4	Función de capilaridad para $M=1$, variando $no=nw=n$	36
3.5	Velocidad adimensional de agua para $M=1$, variando $no=nw=n$, considerando sólo fuerzas viscosas y gravitacionales.....	37
3.6	Función de viscosidad para $M=1$, $no=2$, variando nw	38
3.7	Función de gravedad para $M=1$, $no=2$, variando nw	39
3.8	Función de capilaridad para $M=1$, $no=2$, variando nw	39
3.9	Velocidad adimensional del agua con las fuerzas viscosas y gravitacionales, para $M=1$, $no=2$, variando nw	40
3.10	Función de viscosidad para $M=1$, $nw=2$, variando no	41
3.11	Función de gravedad para $M=1$, $nw=2$, variando no	41
3.12	Función de capilaridad para $M=1$, $nw=2$, variando no	42
3.13	Velocidad adimensional del agua con las fuerzas viscosas y gravitacionales, para $M=1$, $nw=2$, variando no	43
3.14	Función de viscosidad con $no=nw=2$, variando M	44
3.15	Función de gravedad con $no=nw=2$, variando M	44
3.16	Función de capilaridad con $no=nw=2$, variando M	45
3.17	Velocidad adimensional del agua con las fuerzas viscosas y gravitacionales, con $no=nw=2$, variando M	46
4.1	Función base lineal del método de EFG y la solución numérica por EFG con funciones base lineal (EFL).....	53
4.2	Función base cuadrática del método de EFG y la solución numérica por EFG con funciones base cuadrática.....	56

4.3	Área comprendida entre las curvas analítica y numérica que representa una medida del error en la aproximación.....	60
4.4	Comportamiento del error, E_A para varios números de Peclet, en función del número de nodos y tamaños del paso de tiempo, usados en la simulación con DF, EFL y EFC.....	61
4.5	Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 10$ empleando 25 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.001$	62
4.6	Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 100$ empleando 101 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.001$	64
4.7	Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 1000$ empleando 201 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.0001$	65
4.8	Perfil de $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 10000$ empleando 201 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.0001$	66
4.9	Evolución temporal del error, E_A para varios números de Peclet, con barridos en el tamaño del paso de tiempo, usados en las simulaciones con DF, EFL y EFC.....	67
4.10	Histograma del error $Abs[S_{i,n} - S(z_D, t_D)]$, para el caso de $N_{PE} = 100$, descrito para 25, 51, 101 y 201 nodos y $\Delta t_D = 0.001$	69
4.11	Presencia de dispersión numérica en perfiles de saturación $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 100$ y $t_D = 0.6$ empleando 101 nodos para la simulación.....	70
4.12	Eliminación de la dispersión numérica en perfiles de saturación $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 100$ empleando 101 nodos para la simulación.....	74
4.13	Gráfica del error máximo obtenido a medida que el tiempo transcurre en simulaciones para aproximaciones en DF con $N_{PE} = 100$ y $N_{PET} = 200$	75
5.1	Gráfica del error por áreas obtenido para $N_{PE} = 10$ y $t_D = 0.3$ cuando se varía el número de nodos empleados en la validación de los modelos no-lineales con la EDC.....	94
5.2	Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 10$ empleando 25 nodos y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.001$ en modelo numérico no-lineal.....	95

5.3	Gráfica del error por áreas obtenido para $N_{PE} = 1000$ y $t_D = 0.8$ cuando se varía el número de nodos empleados en la validación de los modelos no-lineales con la EDC.....	96
5.4	Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 1000$ empleando 201 nodos y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.0001$ en modelo numérico no-lineal.....	97
5.5	Perfil de saturaciones para el problema de B-L donde se muestra la necesidad de emplear el criterio de corriente arriba.....	99
5.6	Gráfica del área entra las curvas analítica y numérica cuando se varía el número de nodos en el problema de flujo viscoso de B-L.....	100
5.7	Perfil de saturaciones para el problema de B-L donde se comparan las soluciones analíticas y numéricas.....	100
5.8	Gráfica del error por áreas entre las curvas analítica y numérica cuando se varía el número de nodos en el problema de flujo viscoso con gravedad de B-L.....	102
5.9	Perfil de saturaciones para el problema de B-L con gravedad, donde se comparan las soluciones analítica y numérica.....	102
5.10	Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 1$ calculado por los modelos numéricos clásicos.....	104
5.11	Comparación de los perfiles de saturaciones para $N_{PE} = 1$ calculado por los modelos numéricos clásicos y con el criterio de corriente arriba en EFL.....	104
5.12	Comparación de los perfiles de saturaciones para $N_{PE} = 1$, calculado por los modelos numéricos clásicos y con el criterio de corriente arriba en EFC.....	106
5.13	Comparación de los perfiles de saturaciones para $N_{PE} = 1$, calculado por los modelos numéricos clásicos y con el criterio de corriente arriba en DF.....	106
5.14	Caso I, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nW = 2$, $no = 2$	109
5.15	Caso II, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nW = 4$, $no = 4$	109
5.16	Caso III, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nW = 4$, $no = 2$	110
5.17	Caso IV, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nW = 2$, $no = 4$	111

5.18:	Caso V, solución numérica en t_{DR} , para $M = 0.5$, $n_w = 2$, $n_o = 2$	112
6.1	Curvas de permeabilidades relativas para agua y aceite.....	116
6.2	de presión capilar entre agua y aceite.....	116
6.3	Curva de flujo fraccional para flujo viscoso.....	118
6.4	Relación analítica de \bar{S} con M para el flujo viscoso.....	119
6.5	Perfiles de saturaciones para flujo viscoso.....	120
6.6	Curva de flujo fraccional para flujo convectivo a $\mu_w = 1$ cp.....	121
6.7	Perfiles de saturaciones para flujo convectivo con $\mu_w = 1.0$ cp a $t_D = 0.5$	123
6.8	Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con, $N_G = 2.32$	124
6.9	Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con, $N_G = 1.16$	125
6.10	Curva de flujo fraccional para flujo convectivo con $u_i = 2.5 \cdot 10^{-5}$ cm/s.....	126
6.11	Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con $\mu_w = 1.0$ cp.....	126
6.12	Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con $\mu_w = 0.5$ cp.....	127
6.13	Tiempo adimensional en el momento del rompimiento, t_{DR} , para varias velocidades de inyección.....	128
6.14	Tiempo adimensional en el momento de irrupción, t_{DR} , para varias velocidades de inyección, ver tabla 6.3.....	132
6.15	Perfiles de saturaciones que compara desplazamiento viscoso con desplazamiento viscoso/capilar.....	133
6.16	Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento viscoso/capilar.....	134
6.17	Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento viscoso/capilar dominado por capilaridad.....	135
6.18	Transición de perfiles de saturaciones capilares hasta viscosos.....	135

6.19	Recuperación de aceite en el momento de la irrupción, t_{DR} , para varios escenarios de μ_w , L y u_t , en el flujo capilar/gravitacional/viscoso.....	138
6.20	Recuperación de aceite en el momento de la irrupción, t_{DR} , para varios escenarios de μ_w , u_t , en el flujo capilar/gravitacional/viscoso y capilar/viscoso.....	140
6.21	Incremento en t_{DR} por la presencia de fuerzas gravitacionales, en los escenarios de la figura 6.18.....	140
6.22	Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 3.944$, $N_G = 0.099$ y $M = 0.75$	142
6.23	Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 1.753$, $N_G = 0.244$ y $M = 0.75$	142
6.24	Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 8.764$, $N_G = 0.244$ y $M = 0.75$	144
6.25	Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 4.382$, $N_G = 0.448$ y $M = 1.5$	144
6.26	Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 9.86$, $N_G = 0.199$ y $M = 1.5$	145

Resumen:

Conocer el comportamiento de un yacimiento durante el proceso de desplazamiento de aceite por la inyección de agua es importante para la ingeniería de yacimientos, por lo que se emplea un modelo de flujo para predecir y evaluar los escenarios de recuperación posibles. El modelo de flujo, al tratar de representar fielmente el desplazamiento de los fluidos y su interacción con el medio poroso, resulta en ecuaciones no-lineales imposibles de resolver por métodos analítica, pero con suposiciones que simplifican el modelo, algunos autores han desarrollado modelos analíticos y semi-analíticos para describir al proceso de desplazamiento. La mayoría de los modelos asumen que uno de los términos de flujo, típicamente el correspondiente a fuerzas capilares, puede despreciarse o considerarse constante, y así la ecuación no-lineal simplificada puede ser resulta por métodos analíticos o numéricos. Obtener una solución analítica o semi-analítica a la ecuación no-lineal de flujo de tipo difusivo-convectivo, que considere simultáneamente las contribuciones de las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas ha sido un reto para el modelado del flujo de fluidos a través de medios porosos.

En este trabajo de tesis se presenta una investigación teórica de los efectos que tienen los parámetros de flujo sobre la recuperación de aceite, al aplicar el proceso de desplazamiento de aceite por agua. También se estudian los efectos de dichos parámetros de flujo sobre el perfil de saturaciones, el perfil de velocidades del agua, y las contribuciones capilares, gravitacionales y viscosas a la velocidad del agua. Considerando principalmente, un sistema agua-aceite inmiscible, un medio poroso homogéneo, se desarrolla un modelo no-lineal de flujo, de tipo difusivo-convectivo, que considera a las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas. El modelo no-lineal de flujo es resuelto numéricamente empleando los métodos de diferencias finitas y elemento finito, con el esquema totalmente implícito en tiempo y diferencias centrales en espacio.

Cambiando a variables adimensionales al modelo no-lineal de flujo, se investiga independientemente las contribuciones capilares y gravitacionales, “activando o desactivando” alguna de ellas. Los efectos al variar la viscosidad del fluido inyectado, el gasto de inyección y la longitud del medio pueden entenderse completamente. Debido a que

el modelo de flujo es lo suficientemente versátil como para variar la forma de las curvas de permeabilidades relativas y presión capilar; los efectos de la mojabilidad en la recuperación de aceite se analizan.

El análisis de las contribuciones de cada fuerza al desplazamiento de los fluidos, y de la recuperación de aceite fue estudiado en los cuatro casos de flujo posibles: viscoso, viscoso-gravitacional, viscoso-capilar y viscoso-gravitacional-capilar.

Abstract:

Oil reservoir performance during waterflooding has been an important problem to reservoir engineers for decades. A number of flow models with different assumptions have been presented and used widely. Most of them assume that one of the terms, typically capillary forces, can be neglected or consider constant diffusion coefficients, so the flow equation can be solved analytically or by simple numerical methods. It is clear that obtaining solutions for a flow equation including capillary, gravity and viscous forces simultaneously has been a challenge. Solutions for this problem can be found for general cases and by numerical simulation.

This dissertation presents a theoretical investigation of the effects that controlling flow parameters have on saturation profiles and breakthrough time during oil recovery by waterflooding. A mathematical non-linear diffusive-convective type model for immiscible oil-water displacement in one-dimensional vertical homogeneous porous media considering the three chief forces (capillary, gravity and viscous) is derived and solved numerically by using a finite-difference and finite-element formulations with fully implicit scheme in time and central differences in space.

Dimensionless equations are written so that any of the three forces can be investigated independently; capillary and gravity forces can be “turned on or off.” The effects of varying fluid viscosity, injection flow rate, system length or wettability, for both displacing and displaced fluids, can be understood thoroughly. The flow model is versatile enough that it allows for variations of the shape of the relative permeability and capillary pressure functions. The impact of these functions in the driving forces and on oil recovery is analyzed.

The contribution of each of the forces to the dimensionless water velocity and its impact on oil recovery was studied in four flow cases: viscous, viscous-gravity, viscous-capillary and viscous-gravity-capillary; all possible flow cases in water injection problems were considered. Graphical results are discussed.

Objetivo:

Estudiar la interacción entre las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas en el proceso de desplazamiento de dos fases inmiscibles en un medio poroso lineal, y emplear como herramienta la simulación numérica de yacimientos con los métodos de diferencias finitas y elemento finito.

Alcances:

- Con base en los conceptos de la dinámica del flujo multifásico, formular un modelo de flujo que describa el proceso de desplazamiento de dos fases inmiscibles en un medio poroso lineal, que considere a las tres fuerzas (capilares, gravitacionales y viscosas) que principalmente influyen en todos los problemas de flujo de fluido en medios porosos.
- Como el modelo de flujo es no-lineal y no puede ser resuelto por la matemática clásica, entonces la simulación numérica es usada para resolver dicho modelo. Los métodos de Diferencias Finitas (DF) y Elemento Finito (EF) son empleados en la simulación, de modo que los resultados numéricos de cada método se comparen entre sí, y así estudiar el desempeño de ambos esquemas numéricos en problemas difusivos-convectivos.
- Una vez elaborado el simulador numérico, se estudia la dinámica del flujo de fluidos en el proceso de desplazamiento, con la intervención de las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas.

Introducción:

Durante la producción de hidrocarburos, llega un momento en el cual la energía natural del yacimiento es insuficiente para producir eficientemente su reserva de aceite remanente, por lo que surge la necesidad de implementar algún proceso que transfiera energía adicional al yacimiento, como es el caso de la inyección de gas y/o agua. Por otro lado, la presencia de una capa de gas y/o de un acuífero activo, proporciona mecanismos de producción que generalmente aumentan el factor de recuperación de aceite, por el empuje natural proporcionado al yacimiento.

Recuperación primaria se define como la producción de aceite por medio de la energía natural del yacimiento. La energía del yacimiento se debe a la existencia de altas presiones en los poros de la roca con respecto a la presión en el fondo del pozo. Esta diferencia de presiones permite que el aceite fluya a través del yacimiento hacia el pozo. A la producción de aceite por medio de la inyección de gas en condiciones inmiscibles y/o agua, bien sea para mantener la presión del yacimiento y su capacidad productiva o para desplazar aceite y con ello incrementar la recuperación de aceite, se le conoce como recuperación secundaria.

La mayoría de los métodos de recuperación secundaria proveen energía mecánica al yacimiento, por la inyección de un fluido, el cual desplaza al que se encuentra en el yacimiento. Hay que recalcar que, a pesar de que en algunos de estos métodos ocurren pequeñas variaciones de temperatura, se considera, para fines prácticos, que ocurren en condiciones isotérmicas. Ahora bien, también hay métodos de recuperación mejorada de aceite en los que se agrega calor al yacimiento, conocidos como métodos de recuperación térmica, en los cuales el fluido inyectado, fluido que desplaza, modifica directamente la energía térmica del yacimiento para incrementar la recuperación de aceite.

La eficiencia de un método de recuperación secundaria o mejorada se mide por su capacidad de recuperar más hidrocarburos del yacimiento que el producido por recuperación primaria. En la referencia 1 se mencionan algunos factores que comúnmente influyen en la eficiencia de un método de recuperación secundaria o mejorada de aceite:

a) *Profundidad*: La profundidad del yacimiento influye en los aspectos técnicos y económicos; por ejemplo, en yacimientos profundos hay restricciones en la presión de inyección. Para el aspecto económico, los costos del proyecto están directamente relacionados con los costos de perforación.

b) *Inclinación del Yacimiento*: Para ver la influencia de este factor, se puede prestar atención a el comportamiento de la ecuación de flujo fraccional [2], y se puede observar que el término gravitacional depende del echado de la formación, así como del peso específico de los fluidos, permeabilidades efectivas y gasto de inyección. El grado de inclinación es determinado por el seno del ángulo comprendido entre la dirección de flujo y el eje horizontal, y determina si la inyección es en contra o a favor de la gravedad, por lo que el ángulo de inclinación influye considerablemente en el comportamiento de los perfiles de saturaciones, para flujo asistido por gravedad o en forma contraria.

c) *Grado de Homogeneidad*: Considérese el caso en el cual se desplaza aceite por agua y flujo horizontal a través de capas (horizontales) con diferentes permeabilidades. En las capas de mayor permeabilidad el movimiento del agua hacia el pozo productor será más rápido, resultando en la irrupción temprana del agua en dicho pozo, comparada con las capas de menor permeabilidad, y en un desplazamiento vertical no uniforme. En la medida que el grado de homogeneidad disminuye, o bien que la heterogeneidad de las capas aumenta, la eficiencia del desplazamiento de aceite a la irrupción del agua será menor.

d) *Propiedades Petrofísicas*: Para implantar un proyecto de recuperación mejorada, es importante que dicho proyecto tenga una eficiencia que proporcione la cantidad de hidrocarburos necesaria para que el proyecto de recuperación sea rentable. Por lo que se realizan estudios previos, en los cuales se estima el comportamiento del proyecto de recuperación. Para esto se establecen modelos que describan el flujo de los fluidos a través del yacimiento.

Las leyes básicas que describen el flujo de los fluidos en un medio poroso son la ley de la continuidad y ley de Darcy. En estas ecuaciones se requiere el conocimiento de la permeabilidad absoluta, las permeabilidades relativas, presiones capilares, porosidad, viscosidad de los fluidos, mojabilidad de la roca, y otros parámetros que también pueden ser función de la saturación de los fluidos.

Cabe mencionar que la competencia entre las fuerzas capilares y convectivas (viscosas y gravitacionales) es lo que gobierna el entrapamiento de las fases y la movilización de los fluidos a través del medio poroso [3]. Por lo que es importante conocer la magnitud de las contribuciones de cada fuerza a la velocidad de los fluidos. Este es el propósito del presente trabajo, que está dividido en los siguientes capítulos:

Capítulo 1: Se establecen los conceptos fundamentales que afectan el proceso de desplazamiento de fluidos inmiscibles en un medio poroso, de modo que se tengan las bases teóricas para entender las diversas investigaciones sobre el problema de desplazamiento, y explicar las observaciones realizadas a lo largo del presente trabajo.

Capítulo 2: Se revisan documentos de investigación publicados sobre el tema de desplazamiento lineal de fluidos inmiscibles, principalmente el método de Buckley y Leverett que desarrolla una solución analítica para flujo viscoso y predice la recuperación de aceite durante el proceso de inyección de agua en yacimientos. A modo de considerar a las fuerzas capilares y/o gravitacionales, se revisan una gran variedad de trabajos en los cuales, con algunas simplificaciones, se cuenta con soluciones analíticas, semi-analíticas y numéricas que ayudan a comprender el flujo bifásico de fluidos inmiscibles en medios porosos.

Capítulo 3: Para predecir el comportamiento del proceso de desplazamiento bifásico, se desarrolla un modelo analítico no-lineal, adimensional que considera a las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas, a partir de las ecuaciones fundamentales de “Continuidad” y Darcy, seguidas por la definición de presión capilar, y por modelos analíticos para permeabilidades relativas y presión capilar. Con ayuda de los números adimensionales definidos en este capítulo y considerando los principios fundamentales de la teoría del método de Buckley-Leverett y la extensión de Welge, se determinan las condiciones que tienden a favorecer la acción de cada fuerza, así como el escenario que proporciona la mayor recuperación de aceite.

Capítulo 4: Debido a que el modelo de flujo propuesto busca apegarse lo más posible a la realidad, las ecuaciones diferenciales correspondientes son no-lineales e imposibles de resolverse por medios analíticos, por lo que se recurre a una solución numérica. En este capítulo se exponen los conceptos básicos de los métodos numéricos de diferencias finitas y

elemento finito requeridos en el proceso de modelado del problema de difusión-convección; entonces el modelo no-lineal de tipo difusivo-convectivo es simplificado al modelo lineal de difusión-convección, el cual cuenta con solución analítica conocida, permitiendo que se realice un estudio exhaustivo del error en la aproximación numérica y determinar el método más efectivo de solución en diferentes escenarios. Por último, se investiga la naturaleza de la dispersión numérica y el modo de minimizar su impacto en la solución numérica por diferencias finitas del problema de difusión-convección.

Capítulo 5: Con los fundamentos de los métodos numéricos asentados en el capítulo anterior, la incorporación del criterio de corriente arriba y del método totalmente implícito para linealizar el sistema de ecuaciones, se desarrollan los modelos no-lineales numéricos en diferencias finitas, elemento finito con función base lineal y elemento finito con función base cuadrática. Dichos modelo numéricos son validados frente a los problemas de difusión-convección y de Buckley-Leverett.

Capítulo 6: Una vez elaborado y validado, el simulador es empleado para estudiar el efecto de las fuerzas viscosas, gravitacionales y capilares en la magnitud de la recuperación de aceite. A lo largo de todo este capítulo se analiza la influencia de la viscosidad del agua, gasto de inyección de agua y longitud del medio poroso, en los diversos números adimensionales y por consiguientes en las tres fuerzas y la recuperación final. También se estudia el comportamiento de la contribución de cada fuerza a la velocidad adimensional del agua, determinando los casos en las que cada fuerza tiene más influencia.

Capítulo 1

FACTORES QUE INFLUYEN EN EL DESPLAZAMIENTO DE ACEITE POR AGUA

Introducción.

Los procesos de recuperación mejorada dependen de muchos parámetros, tanto del medio poroso como de los fluidos, así como de los fenómenos físicos entre las superficies de los fluidos y la roca. En este capítulo se abordan de forma conceptual algunos de los factores principales que afectan el proceso de desplazamiento de fluidos inmiscibles, de modo que establezcan las bases teóricas para los análisis posteriores del proceso de inyección de agua, en un medio poroso inicialmente saturado con aceite y agua.

1.1 Tensión interfacial.

Cuando dos fases inmiscibles coexisten en un medio poroso, existe una energía libre interfacial entre las dos fases, que depende de la saturación, distribución de fluidos, temperatura, y desplazamiento de las fases. La energía interfacial es debida a la diferencia entre las fuerzas de atracción de las moléculas de cada fase con las que se encuentran en la superficie de contacto. Debido a que la superficie de contacto posee energía libre, esta energía se manifiesta como la *tensión interfacial* (TI), σ , la cual es una constante para cualquier par de fases y es definida como la cantidad de trabajo que se debe realizar para separar una unidad de área entre las dos fases [4, 5]. La tensión interfacial entre una sustancia (fase) y su propio vapor o aire es conocida como *tensión superficial*.

En los procesos de recuperación mejorada es muy importante conocer la magnitud de la tensión interfacial, y así determinar los valores de las fuerzas capilares, que son las responsables de que el aceite se quede atrás del frente de barrido en los procesos de invasión de agua en yacimientos. En procesos de invasión de agua, las fuerzas viscosas

tratan de poner a los fluidos en movimiento pero las fuerzas capilares se oponen a las viscosas ocasionando que el barrido de agua pase, dejando atrás del frente al aceite remanente [2]. Debido a esto es importante que para desplazar al aceite por agua, se debe disminuir la tensión interfacial entre el aceite y al agua. La técnica que tiene mejores resultados para disminuir la tensión interfacial es la de inyección de productos químicos surfactantes [2].

1.2 Mojabilidad.

La distribución de fluidos en un medio poroso no sólo es controlada por las fuerzas interfaciales entre los fluidos, sino también por las fuerzas interfaciales entre los fluidos y el sólido (roca). Por lo que se introduce el concepto de *mojabilidad*, y puede ser definida como la tendencia de un fluido a adherirse a la superficie de un sólido en presencia de otros fluidos inmiscibles.

Cuando dos fluidos o fases inmiscibles (como aceite y agua) son puestos en contacto con un sólido (roca), generalmente una de las fases tiende a adherirse más hacia la superficie del sólido que la otra fase. A la fase que es fuertemente atraída hacia la superficie del sólido se le denomina *fase mojante* y a la otra *fase no mojante*. De los fluidos que generalmente coexisten en el espacio poroso durante un proceso de invasión de agua son el aceite, el agua y el gas. Como las condiciones para que el gas sea la fase mojante en el yacimiento son imposibles [6], entonces sólo el aceite y el agua pueden ser consideradas como la posible fase mojante.

La figura 1.1 muestra un sistema de dos fases inmiscibles (mojante y no mojante) en contacto con un sólido. En esta figura, θ define al ángulo entre la interfase y la superficie del sólido. Por convención θ ($0^\circ < \theta < 180^\circ$) es medido a través del fluido más denso [5], se le conoce como *ángulo de contacto* y determina qué fase es preferentemente mojante al sólido. Cuando $\theta < 90^\circ$ se dice que el fluidos más denso es la fase mojante y cuando $\theta > 90^\circ$ se dice que el fluidos más denso es la fase no-mojante.

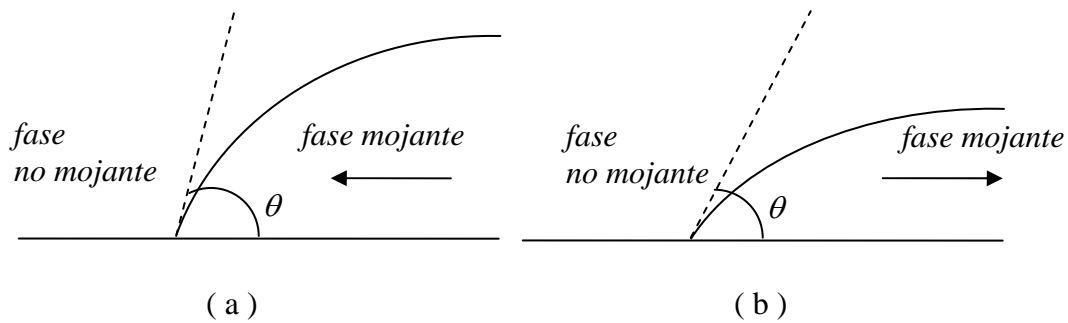


Figura 1.1: Histéresis del ángulo de contacto, (a) fase mojantera incremental (imbibición); (b) fase mojantera decremanta (drene). Figura tomada de referencia 7.

La figura 1.1 también muestra dos procesos en los cuales la fase mojantera incremental (a) o decremanta (b). Se ha determinado experimentalmente [7] que el ángulo de contacto es más grande cuando la fase mojantera avanza sobre la superficie del sólido, que cuando ésta retrocede y a este fenómeno se le conoce como *Histéresis*.

Una vez expuestos brevemente los conceptos relacionados con la mojabilidad, se podrían distinguir tres tipos de saturación de fluidos que están entre los límites de 0% a 100% [5]. A saturaciones muy bajas de la fase mojantera, se forma una película muy delgada que rodea al grano, de modo tal que las películas de cada grano están aisladas unas de otras y así la fase mojantera no forma una fase continua, prácticamente ninguna presión será transmitida de una película a otra a través de la fase mojantera y así será poco probable que ésta fluya. A medida que la saturación de la fase mojantera aumenta, las películas se expandirán hasta formar una fase continua, a la saturación en este punto se la conoce como *saturación de equilibrio a la fase mojantera*. Arriba de esta saturación crítica, a la saturación se le conoce como *funicular* y el flujo de la fase mojantera es posible. Cabe mencionar que a medida que la saturación de la fase mojantera incremental, la no-mojante forma una fase discontinua, formando glóbulos de dicha fase en el medio poroso. En este punto se dice que la fase no mojantera está en un estado de *saturación insular*, y los glóbulos sólo pueden moverse si el potencial de presiones es lo suficiente grande para vencer las restricciones capilares aplicadas a través de la fase mojantera.

1.3 Presión Capilar.

Cuando dos fluidos inmiscibles están en contacto en un medio poroso, existe una discontinuidad en la presión sobre la interfase que los separa. La magnitud de esta diferencia de presión depende de la curvatura de la interfase. Esta diferencia de presiones es conocida como “presión capilar”. La presión capilar es una medida de la tendencia de un medio poroso para absorber al fluido mojante, o repeler al no mojante. Es importante mencionar que la presión capilar depende de la geometría del espacio poroso, de las propiedades del sistema roca-fluidos, y del grado de saturación del espacio poroso.

La presión capilar, al igual que el ángulo de contacto, está sujeta al fenómeno de *histéresis*; es decir, es función de la dirección del desplazamiento. Debido a este fenómeno de histéresis se pueden obtener diferentes curvas de presión capilar, dependiendo si la muestra está inicialmente saturada con el fluido mojante o con el fluido no mojante. En cada caso el fluido que inicialmente satura a la muestra es lentamente desplazado por el otro fluido.

Cuando una muestra está inicialmente saturada con la fase mojante, el proceso de desplazamiento de esta fase por la fase no-mojante es conocido como *drene* y la curva de presión capilar es conocida como *curva de drene*. El proceso por el cual la fase mojante desplaza a la fase no mojante que inicialmente satura al espacio poroso es conocido como *imbibición* y la curva que relaciona a la presión capilar con la saturación del fluido mojante es conocida como *curva de imbibición*.

Al final del fenómeno de drene una cantidad de fluido mojante permanece en el espacio poroso incluso a altos valores de presión capilar, al valor de la saturación de la fase mojante en este punto es conocido como *Saturación irreducible del fluido mojante*. Por otro lado, en un fenómeno de imbibición cuando se alcanza el valor de presión capilar igual a cero, una cierta cantidad de fluido no mojante permanece en el espacio poroso. En este punto, la saturación del fluido no-mojante recibe el nombre de *saturación residual*.

Es muy importante mencionar que las curvas de presión capilar dependen no sólo de las saturaciones en ese instante, sino también de la historia de saturaciones de la muestra de espacio poroso.

1.4 Densidad.

La densidad es una propiedad que típicamente se usa para caracterizar un sistema de fluidos, y está definida por la masa del fluido por unidad de volumen.

El valor de la densidad puede variar ampliamente entre fluidos diferentes, pero para los líquidos las variaciones debidas a la presión y temperatura generalmente tiene un pequeño efecto sobre el valor de la densidad. Por otro lado la densidad de los gases es fuertemente influenciada por ambas propiedades físicas; presión y temperatura. De manera general cuando la densidad de un fluido depende de la presión y temperatura, a la ecuación que relaciona a las tres propiedades se le conoce como ecuación de estado, y cuando el fluido es homogéneo a la densidad se le considera constante.

1.5 Peso específico.

El peso específico de un fluido está definido como el peso del fluido por unidad de volumen y se relaciona con la densidad por medio de la siguiente ecuación:

$$\gamma = \rho g \quad (1.1)$$

Donde g es la aceleración local de la gravedad. Al igual que la densidad el peso específico es una propiedad usada para caracterizar a los fluidos.

El peso específico tiene una influencia muy importante en la aportación de las fuerzas gravitacionales en el proceso de flujo, y como ejemplo se comenta el caso de segregación de fluidos en un yacimiento de aceite que se encuentra por encima de su punto de burbujeo. A medida que se explota el yacimiento de aceite, el gas disuelto puede ayudar a la explotación del aceite si se permite que las burbujas de gas se acumulen en la cima del yacimiento y se expandan. Analizando este proceso a un nivel de burbuja, desde el punto de vista de la intervención de las fuerzas gravitacionales: Moléculas de gas son liberadas del aceite y se agrupan hasta formar burbujas de gas. Si el gasto de producción lo permite, las burbujas de gas tienden a moverse hacia la cima del yacimiento, este movimiento vertical

depende de las propiedades de los fluidos, principalmente de la densidad, y de las permeabilidades relativas de los fluidos. La fuerza principal que origina este movimiento vertical es la fuerza resultante de la diferencia entre las fuerzas de atracción gravitacional de las moléculas de aceite y gas.

1.6 Permeabilidades Relativas.

Por medio de estudios experimentales se ha determinado que, cuando se tiene dos fases inmiscibles fluyendo a través de un medio poroso, cada fase establece su propia tortuosidad, es decir se establecen caminos o canales de flujo, los cuales dependen del grado de saturación del medio poroso. Cuando se tiene un sistema con un fluido mojante y uno no-mojante, se observa que a medida que se reduce la saturación del fluido no-mojante, los canales de flujo de dicho fluido tienden a desaparecer quedando como resultado regiones residuales con fluido no-mojante. Algo similar ocurre para el caso del fluido mojante. Por lo que se puede decir que; para cualquiera de estos fluidos que se conviertan en fases discontinuas alrededor del dominio de flujo, el movimiento de fluidos no podrá realizarse. Así, el concepto de *permeabilidad* establece el flujo de una sola fase en un medio poroso. Para extender las ecuaciones de movimiento de flujo de una sola fase al flujo simultáneo de dos o más fases, se desarrolló el concepto de *permeabilidades relativas*.

Debido a la importancia de la mojabilidad en la distribución de los fluidos en el espacio poroso, y considerando que el grado de mojabilidad influye sobre la creación de los canales de flujo, es lógico pensar que el fenómeno de histéresis afecta a las permeabilidades relativas, por lo que las curvas de permeabilidades relativas dependen de la historia de saturaciones del medio poroso.

1.7 Movilidad.

Para predecir el comportamiento de un fluido en el espacio y tiempo se requiere de una ecuación de movimiento que relacione el gasto o velocidad del fluido con las propiedades del sistema roca-fluido. La ecuación de movimiento que comúnmente es usado en el flujo de fluido a través de medios porosos fue establecida por Darcy, y relaciona la velocidad (conocida como velocidad de Darcy) con el gradiente de presiones del fluido. El factor que

relaciona a estos parámetros es la movilidad, λ_f , del fluido f y es una propiedad de flujo que está integrada por una propiedad del sistema roca-fluido (permeabilidad relativa), de la roca (permeabilidad) y del fluido (viscosidad), por la siguiente expresión matemática:

$$\lambda_f = k \left(\frac{k_{rf}}{\mu_f} \right) \quad (1.2)$$

donde k es la permeabilidad del medio poroso, μ_f es la viscosidad del fluido f y k_{rf} es la permeabilidad relativa del fluido f .

Análogamente a la permeabilidad relativa del un fluido f hay una definición para la movilidad relativa del fluido f y es una medida de la resistencia del medio poroso al flujo multifásico, y es definida cómo sigue:

$$\lambda_{rf} = \frac{k_{rf}}{\mu_f}. \quad (1.3)$$

1.8 Relación de Movilidades.

Para los problemas de inyección de agua se manejan las movilidades de cada fluido, de forma que se define una relación de movilidades, M , entre los fluidos que fluyen, siendo esta relación la característica más importante en un proceso de invasión de fluidos [3,6].

Algunos autores definieron a la relación de movilidades como la movilidad del aceite entre la movilidad del fluido desplazante, mientras que otros lo definen de forma inversa. Pero por lo general se adopta a la segunda opción y puede escribirse como:

$$M = \frac{\lambda_D}{\lambda_d} \quad (1.4)$$

donde λ_D es la movilidad del fluido desplazante y λ_d es la movilidad del fluido desplazado, de modo que la relación de movilidades es un número adimensional que afecta la

estabilidad de un proceso de desplazamiento cuando el flujo es inestable, es decir, cuando el frente de desplazamiento no es uniforme y esto se ocurre en $M > 1$ [3,6], de hecho al flujo inestable se le conoce como flujo viscoso con digitación. Entonces, relaciones de movilidades menores a uno resultan en procesos favorables y mayores a uno en no favorables. De forma general, a medida que la relación de movilidades disminuye la eficiencia del barrido aumenta, debido a que la movilidad del fluido desplazante disminuye o la del fluido desplazado aumenta. Comúnmente el rango de valores encontrados en procesos de invasión de agua va desde 0.02 hasta 2.0 [6].

La relación de movilidades puede definirse de diferentes formas dependiendo de las condiciones de flujo y del proceso en específico. Algunos autores al considerar que el flujo de los fluidos en el proceso de inyección de agua es de tipo pistón, donde sólo agua fluye detrás del frente y sólo aceite delante de este, definen de forma sencilla y particular a la relación de movilidades como sigue [3]:

$$M = \left(\frac{k_{rw}}{\mu_w} \right)_{S_{or}} \left(\frac{k_{ro}}{\mu_o} \right)_{S_{iw}} \quad (1.5)$$

donde k_{rw} y k_{ro} están medidas a la saturación de aceite residual, S_{or} , y a la saturación de agua intersticial o irreducible, S_{iw} , respectivamente.

Capítulo 2

REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Introducción.

El problema de flujo de dos fases homogéneas e inmiscibles en un medio poroso homogéneo y lineal ha sido estudiado desde hace más de 50 años, con algunas suposiciones o simplificaciones como en el famoso trabajo sobre el proceso de inyección de agua elaborado en 1942 por Buckley y Leverett (BL) en el cual se desarrolla una teoría que hasta la fecha sigue siendo usada para las predicciones de las recuperaciones de aceite en los procesos de invasión de agua. A pesar de la importancia de dicho trabajo, cabe mencionar que sólo considera a las fuerzas viscosas, por lo que existen una variedad de trabajos que tratan de simplificar lo menos posible el modelo no-lineal de flujo para desplazamiento bifásico y así obtienen soluciones analíticas, semi-analíticas y numéricas, que ayuden en el entendimiento del flujo bifásico, inmiscible en un yacimiento lineal.

2.1 Modelo de Permeabilidades Relativas.

El concepto de permeabilidad relativa fue establecido para extender la teoría de flujo de una sola fase, al flujo multifásico por medio de la ley de Darcy. Las permeabilidades relativas de un sistema de fluidos dependen de varios factores, pero hay evidencias experimentales que afirman que las permeabilidades relativas pueden considerarse como función de las saturaciones solamente, y así simplificar el manejo de las permeabilidades relativas en los estudios de flujo con resultados que muestran buenas aproximaciones para fines prácticos [5, 8, 9]. Las permeabilidades relativas se determinan experimentalmente con pruebas de flujo, pero como no siempre se cuenta con laboratorios para realizar las pruebas, existen métodos empíricos que proporcionan modelos matemáticos que cubren una amplia variedad de permeabilidades relativas para describir diferentes sistemas de rocas y fluidos con la aproximación suficiente para ser incorporados como modelos analíticos de permeabilidades relativas en los simuladores de flujo.

En la literatura [5, 8] hay varios autores que establecieron relaciones matemáticas de permeabilidades relativas, siendo las de Corey las más populares. Corey definió a la relación (2.1) como la saturación efectiva, la cual es la variable independiente en las correlaciones de las permeabilidades relativas para las fases mojantes y no-mojantes. Las correlaciones de Corey contienen un parámetro ψ que depende, de alguna manera del tamaño y de la distribución de los poros.

$$S = \frac{S_w - S_{wi}}{1 - S_{wi}} \quad (2.1)$$

$$k_{rw} = S^{\frac{2+3\psi}{\psi}} \quad (2.2a)$$

$$k_{ro} = (1 - S)^2 \left(1 - S^{\frac{2+\psi}{\psi}} \right) \quad (2.2b)$$

donde k_{rw} y k_{ro} son las permeabilidades relativas al agua y al aceite respectivamente, y ψ es el índice de distribución de tamaños de poro.

Para el estudio de los procesos de flujo multifásico mediante la simulación numérica de yacimientos, algunas veces son requeridas expresiones analíticas para representar a las permeabilidades relativas en el desarrollo de los modelos numéricos, en donde se requiere de la manipulación matemática de las ecuaciones de flujo. En general las expresiones algebraicas más sencillas que pueden ajustarse a una cantidad grande de datos de laboratorio son [2, 8]:

$$k_{rw} = k_{rw}^* S^{nw} \quad (2.3a)$$

$$k_{ro} = k_{ro}^* (1 - S)^{no} \quad (2.3b)$$

Estos modelos de potencias para las permeabilidades relativas son relaciones algebraicas sencillas para ser manipuladas matemáticamente en los modelos no-lineales de flujo. Fijando valores para los parámetros en las ecuaciones (2.3) se establece el grado de

mojabilidad de un sistema de roca y fluidos. Las relaciones anteriores han sido empleadas en investigaciones [¹⁰⁻¹⁵] para representar comportamientos de permeabilidades relativas.

2.2 Modelos Lineales de Flujo.

Debido a la complejidad del medio poroso y de los diversos factores involucrados en el flujo multifásico, los modelos de flujo incluyen ecuaciones diferenciales parciales no-lineales, sin embargo con algunas suposiciones se pueden obtener modelos lineales de flujo como el caso de modelos con ecuaciones de tipo difusivo-convectivo [^{16, 17}] para estudios de inyección de agua o ecuaciones de tipo difusivo [^{18,19}] para estudios de imbibición.

En la formulación de los modelos difusivo-convectivo se supone que el proceso puede dividirse en dos componentes que actúan de manera simultánea. Por un lado hay un desplazamiento frontal conocido como convección y por otro lado hay un movimiento dispersivo de naturaleza estocástica que genera una zona en la que las fases inmiscibles coexisten. Además se considera que el movimiento dispersivo obedece a la ley de Fick. La densidad de flujo (gasto por unidad de área) por convección está dada por la ecuación (2.4), mientras que la ley de Fick establece la densidad de flujo por difusión (2.5).

$$J_c = uS \quad (2.4)$$

$$J_D = -D \frac{\partial S}{\partial z} \quad (2.5)$$

donde u es la velocidad de Darcy, D es el coeficiente de dispersión.

Superponiendo ambas componentes del proceso de flujo, y considerando el principio de conservación de la materia se obtiene la ecuación lineal de difusivo-convectivo para una dimensión.

$$D \frac{\partial^2 S}{\partial z^2} - u \frac{\partial S}{\partial z} = \frac{\partial S}{\partial t} \quad (2.6)$$

La ecuación (2.6) se puede escribir en variables adimensionales para generalizar las soluciones obtenidas de esta ecuación.

$$\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} - \frac{\partial S}{\partial z_D} = \frac{\partial S}{\partial t_D}, \quad (2.7)$$

con las siguientes definiciones de variables adimensionales:

$$z_D = \frac{z}{L} \quad (2.8)$$

$$t_D = \frac{u}{L} t \quad (2.9)$$

$$N_{PE} = \frac{uL}{D}. \quad (2.10)$$

Donde N_{PE} es el número de Peclet adimensional que refleja la importancia relativa entre la convección y la difusión [^{5,20}].

Considerando que la ecuación (2.7) es aplicada a un medio semi-infinito inicialmente saturado con aceite y agua irreducible, con condición de frontera que indica inyección en $z_D = 0$, se tienen las condiciones de frontera e inicial mostradas a continuación:

$$S(z_D, t_D = 0) = 0 \quad (2.11a)$$

$$S(z_D = 0, t_D) = 1 \quad (2.11b)$$

$$\begin{aligned} \text{Lím}_{z_D \rightarrow \infty} [S(z_D, t_D)] &= 0 \\ 0 < z_D < \infty \end{aligned} \quad (2.11c)$$

La solución analítica del problema de flujo dado por las ecuaciones (2.7) y (2.11) es la siguiente:

$$S(z_D, t_D) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{N_{Pe}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D - t_D] \right) + \exp(N_{Pe} z_D) \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{N_{Pe}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D + t_D] \right) \right]. \quad (2.12)$$

En el Apéndice A se muestra el desarrollo de la solución analítica, basado en la referencia 3.

Se ha observado que los datos experimentales y los resultados teóricos muestran una concordancia cuando se visualiza un proceso de inyección de agua como un proceso difusivo-convectivo [16].

Para el caso de imbibición espontánea se realiza un procedimiento análogo en donde se visualiza, con base en datos experimentales, que el proceso de imbibición es un proceso predominantemente difusivo [18,19].

El problema modelado en la referencia 18 consiste en un medio poroso lineal mojado por agua, inicialmente saturado con aceite, y al poner a las dos fronteras del medio en contacto con agua el proceso de imbibición ocurre hasta que la saturación de agua alcanza un valor final. Considerando un comportamiento difusivo, la siguiente relación se satisface:

$$D \frac{\partial^2 S}{\partial z^2} = \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (2.13)$$

$$z_D = \frac{z}{L}, \quad (2.14)$$

$$t_D = \frac{\pi^2 D}{L^2} t, \quad (2.15)$$

y con los cambios de variables (2.14) y (2.15) se tiene un modelo lineal adimensional que junto con las condiciones de fronteras e inicial describen matemáticamente el problema de flujo siguiente:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} = \pi^2 \frac{\partial S}{\partial t_D} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} S(z_D, t_D = 0) &= 0 \\ S(z_D = 0, t_D) &= S(z_D = 1, t_D) = 1 \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$S(z_D, t_D) = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+1} \pi \sin(2n+1)z_D \exp[-(2n+1)^2 t_D]. \quad (2.18)$$

El problema descrito arriba tiene la solución analítica (2.18), que proporciona resultados que concuerdan con experimentos de imbibición [18].

En la referencia 19 se propone un modelo analítico para describir la cantidad de agua transferida a la matriz en un proceso de invasión de agua en un medio fracturado, para el comportamiento a tiempos tempranos. El proceso de imbibición capilar es aproximado por una ecuación de tipo difusivo con la difusividad hidráulica, α_h , basada en la presión capilar, donde $\alpha_h = k k_{rw} / \mu_w (dp_c / dS_w)$.

Entonces el proceso de imbibición es descrito por:

$$\alpha_h \frac{\partial^2 S_w}{\partial z^2} - u \frac{\partial S_w}{\partial z} = \phi \frac{\partial S_w}{\partial t}, \quad (2.19)$$

con S_w como la saturación de agua y ϕ la porosidad.

Las condiciones de frontera e inicial son:

$$S_w(z, t = 0) = 0 \quad (2.20a)$$

$$S_w(z = 0, t) = 1 \quad (2.20b)$$

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \infty} [S_w(z, t)] &= 0 \\ 0 < z < \infty \end{aligned} \quad (2.20c)$$

donde la condición de frontera (2.20c) implica que la saturación de agua en la matriz tendiendo al infinito alejado de la fractura permanece constante.

Eliminando el término convectivo de la ecuación (2.19), $u = 0$, el modelo analítico tiene la siguiente solución analítica:

$$S_w(z, t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{\alpha_h t}}\right) \quad (2.21)$$

La ecuación (2.21) muestra buen ajuste entre cálculos y experimentos [19].

2.3 Modelos no-lineales de flujo.

Para la descripción matemática del problema de flujo de fases inmiscibles en un medio lineal homogéneo, es importante el principio de conservación de la masa, en donde la velocidad juega un papel muy importante, por lo que se requieren ecuaciones de movimiento que son descritas por las permeabilidades relativas y propiedades de las fases fluyentes. Entonces, para poder modelar matemáticamente el desplazamiento de fluidos se requiere de un conjunto de ecuaciones que dependen de varios parámetros.

Uno de los trabajos más importantes en la descripción del flujo de fases inmiscibles fue el célebre artículo de Buckley y Leverett [21], BL, el cual aborda el problema de inyección de agua en un medio saturado inicialmente con aceite y agua irreducible; en este modelo se ignoran los efectos de las fuerzas capilares y gravitacionales. La teoría de BL es tan importante que hasta la fecha es empleada en los cálculos de invasión de agua debido a que las fuerzas viscosas son las que predominan en las aplicaciones. Diez años más tarde Rapoport y Leas [22] extendieron el modelo de BL, al aumentar el término capilar en el

modelo de flujo para la descripción del comportamiento del proceso de inyección de agua en un sistema lineal y horizontal. Posteriormente en base a la teoría de flujo fraccional, Handly y Hadley [23] muestran una ecuación de flujo que considera a las tres fuerzas que principalmente intervienen en el flujo de fluidos para un medio poroso lineal y homogéneo.

La ecuación de flujo que considera a las tres fuerzas principales puede escribirse de diferentes formas dependiendo de las aplicaciones, de los modelos de presión capilar y permeabilidades relativas empleados, entre otras cosas. Pero de forma general la ecuación diferencial parcial que contiene la influencia de las tres fuerzas principales en los problemas de flujo es [13]:

$$f_w = \left(\frac{k}{u_i L} \frac{\lambda_{ro} \lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS} \right) \frac{\partial S}{\partial z_D} - \left(\frac{k \Delta \gamma}{u_i} \frac{\lambda_{ro} \lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \right) \frac{\partial H_D}{\partial z_D} + \left(\frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \right) \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t_D} + \frac{\partial f_w}{\partial z_D} = 0 \quad (2.23)$$

El desarrollo completo de la ecuación general anterior se aborda en el Capítulo 3, así como los cambios de variables necesarios.

Claramente se observa de la ecuación (2.22), que la función de flujo fraccional para el agua, f_w , es la superposición de tres funciones relacionadas cada una con las influencias capilares, gravitacionales y viscosas respectivamente. Es importante mencionar que el flujo fraccional de agua, es el parámetro que describe el perfil del corte de agua en el yacimiento a un tiempo dado. Cuando el agua y el aceite fluyen simultáneamente en el yacimiento, el flujo fraccional de agua se define matemáticamente por la siguiente ecuación:

$$f_w = \frac{q_w}{q_o + q_w}, \quad (2.24)$$

donde q_w y q_o son el gasto de agua y aceite respectivamente, en el yacimiento.

Haciendo una revisión acerca de los estudios matemáticos relacionados con el desplazamiento de fases inmiscibles y homogéneas, en un medio poroso lineal y homogéneo, se tiene principalmente al trabajo pionero de Buckley y Leverett en el cual se desarrolla una solución analítica para el flujo viscoso y básicamente establece que la velocidad de avance de un plano de saturación dado es proporcional al cambio en el flujo fraccional de agua causado por el cambio en la saturación de agua. El perfil de saturaciones calculado con esta teoría es de forma implícita, es decir, en vez de tener a la saturación en función del tiempo y posición, $S = S(z, t)$, se tiene la posición en función de la saturación y del tiempo, $z = z(S, t)$, obteniéndose un perfil de saturaciones con una región en la cual, a una posición dada le corresponden tres valores de saturación resultando en una solución físicamente imposible, este problema es resuelto al determinar la saturación en el frente de desplazamiento mediante una ecuación de balance. Años más tarde Welge [24] implementó un método gráfico para determinar, de forma más simple la saturación en el frente y así emplear la saturación del frente de agua en la teoría de BL. Como ya se mencionó, la teoría de BL ignora al término capilar [2, 5-7, 9, 21] en la ecuación de flujo, por lo que se pueden obtener perfiles de saturación en desplazamientos convectivos con influencia de las fuerzas viscosas y gravitacionales [25].

Como la ecuación general de flujo que contiene a los tres términos que principalmente afectan al flujo en medios porosos, es imposible resolverla por las técnicas matemáticas clásicas, entonces es necesario emplear métodos numéricos para obtener soluciones aproximadas a la solución exacta del problema de flujo. Douglas, Blair y Wagner [26] emplean en su trabajo a la ecuación del modelo de flujo implementado por Rapoport y Leas, el cual es una extensión del modelo de BL (flujo viscoso) por la incorporación del término capilar, dicha ecuación es aproximada por la técnica de diferencias finitas con Crank-Nicholson modificado. Cabe mencionar que en esta aproximación se emplean expresiones analíticas para las permeabilidades relativas y presión capilar. Posteriormente Fayers y Sheldon [27] con un modelo de flujo fraccional mostrado por Handy y Hadley incorporaron al término gravitacional en la ecuación de flujo con una ecuación parecida a la de Rapoport y Leas. La aproximación numérica es realizada por la técnica de diferencias finitas y con un esquema implícito con iteraciones de Newton para linealizar el sistema de ecuaciones. En sus resultados encontraron que la presencia del término capilar elimina la

zona irrealista que se observa con BL y que el término gravitacional influye ampliamente en la segregación de los fluidos. Los autores en este trabajo comparan los resultados obtenidos cuando el modelo matemático es resuelto con los puntos de vista Euleriano y Lagrangiano, y concluyeron que el punto de vista Euleriano es mejor para cálculo de perfil después del rompimiento o en problemas de flujo para gastos de inyección lentos en los cuales se requiere exactitud en la frontera de inyección. El punto de vista Lagrangiano es mejor para perfiles de frentes de desplazamiento. Hovanessian y Fayers [28] extendieron el trabajo de Douglas, Blair y Wagner, incluyendo al término gravitacional en el modelo de flujo, y resolviendo numéricamente dicho modelo por el método de diferencias finitas se obtiene el perfil de saturaciones, distribución de presiones y perfiles de flujo fraccional para el medio poroso. Empleando los mismos datos para las permeabilidades relativas y la presión capilar que en la referencia 25, determinaron que para un gasto constante de inyección el flujo es más lento cuando el movimiento es hacia arriba y viceversa, también mencionan que se obtiene la mayor caída de presión cuando el flujo es hacia arriba o a gasto de inyección altos.

Como se ha mencionado, la ecuación no-lineal de flujo no se puede resolver analíticamente, sin embargo se pueden hacer algunas suposiciones para simplificar la forma funcional de los coeficientes no-lineales de la ecuación de flujo, como es el caso de Yortsos y Fokas [29] que desarrollaron una solución analítica para el problema de inyección de agua en un yacimiento homogéneo, lineal y semi-infinito. Estos autores simplifican el modelo no-lineal de flujo ignorando sólo el término gravitacional y particularizando fuertemente la forma funcional de las permeabilidades relativas (relación lineal con la saturación) y la presión capilar. La solución obtenida en este trabajo es comparada de forma satisfactoria con la solución al problema de BL. Chen [30] muestra una solución analítica derivada por la transformada de Boltzmann en la cual se consideran los efectos viscosos, gravitacionales y capilares de forma simultánea. Este desarrollo matemático tiene la particularidad de que la velocidad y la diferencia de los pesos específicos son dependientes del tiempo. Otra alternativa para obtener una solución, es el método de Boltzmann, que es presentada por Chen, Bodvarsson y Witherspoon [31] en la que se ignoran los efectos gravitacionales y formulan una ecuación integral que puede ser resuelta por métodos iterativos. Kashchiev y Firoozabadi [12] desarrollan una solución analítica para el problema de flujo que sólo considera a las fuerzas capilares para el flujo estacionario.

Capítulo 3

MODELO ANALÍTICO DEL DESPLAZAMIENTO DE ACEITE POR AGUA

Introducción.

En los capítulos anteriores se mencionó la importancia de modelar los procesos de recuperación mejorada, por lo que en este capítulo se desarrolla un modelo matemático que describe el proceso de desplazamiento de aceite por agua. Primero se establece el problema especificando que los fluidos y el medio poroso son homogéneos e incompresibles, además el medio poroso se considera isotrópico. También se define el tipo de interacción entre los fluidos, es decir, cuando dos fluidos fluyen simultáneamente en un medio poroso hay dos tipos de flujo [5] que dependen del grado de solubilidad entre los fluidos. Cuando los fluidos son completamente solubles y la tensión interfacial entre los fluidos es cero se dice que el flujo es miscible, y por otro lado, cuando la tensión interfacial entre los fluidos no es cero, y una interfase separa a los fluidos dentro de cada poro, el flujo es inmisible. Ahora como en los procesos de inyección de agua en medios porosos saturados inicialmente con aceite y agua, se busca que se forme un frente de desplazamiento bien definido que separe al agua y al aceite, entonces el flujo debe ser inmisible.

El modelo de flujo debe cumplir la ley de conservación de la masa mediante la ecuación conocida como “ecuación de la continuidad” aplicada a cada fluido, posteriormente se requiere de una ecuación de movimiento que relacione el flujo de masa con el potencial de flujo o gradiente de presiones, dicha ecuación es la denominada “ley de Darcy”. Combinando las ecuaciones anteriores e introduciendo la definición de presión capilar por tener flujo inmisible, se llega a una ecuación general para el flujo bifásico, la cual muestra que para un volumen diferencial, el término de gasto por acumulación de agua es el resultado de sumar tres gastos, donde cada gasto está relacionado con una de las tres fuerzas (capilares, gravitacionales y viscosas) que principalmente actúan en el flujo de fluidos en medios porosos. Este modelo es general por que permite el uso de cualquier

forma de permeabilidades relativas y de presión capilar, y admite el análisis de estas fuerzas de forma conjunta o individual.

Usando las funciones de tipo Corey para describir a las permeabilidades relativas y una función logarítmica para la presión capilar, varios números adimensionales son definidos, sobresaliendo el número de Peclet que para este trabajo relaciona a los términos viscoso con el capilar debido a que la presión capilar forma (al igual que la dispersión, difusión, compresibilidad y conductividad térmica) parte del término dispersivo en una ecuación flujo, por lo que el flujo aportado por las fuerzas capilares puede modelarse como un término difusivo [¹⁷⁻²⁰], y así aprovechar las definiciones y conceptos ya establecidos para estos procesos como el número adimensional de Peclet que relaciona a la difusión con la convección.

3.1 Ecuación de conservación.

En esta sección se presentan los fundamentos básicos que permiten la formulación de la ley de conservación, la cual puede aplicarse a la conservación de cualquier cantidad física como masa, momento, energía y carga eléctrica.

De manera general todos los problemas de flujo en la naturaleza están sujetos a las siguientes leyes y condiciones, que tienen asociadas relaciones analíticas que permiten el desarrollo de modelos matemáticos:

1. Las leyes de movimiento de Newton.
2. Leyes de conservación (de masa, calor y carga eléctrica).
3. Las leyes de la termodinámica.
4. Las condiciones de frontera e iniciales.

Los fenómenos de flujo, ya sea de fluidos, calor o electricidad se basan en un principio de conservación que establece, que *“La energía no se crea, ni se destruye, sólo se transforma”* en el caso de la energía y análogamente para la masa se establece que *“La masa no se crea, ni se destruye, sólo se transforma”*.

Es importante mencionar que en la formulación de los problemas de flujo, comúnmente las leyes de la naturaleza se aplican a un nivel macroscópico, es decir, que para una propiedad física determinada se toma un valor representativo de las fluctuaciones de tal propiedad en un elemento de volumen contenido en el medio, en el cual se estudia el comportamiento de la propiedad física. Por ejemplo la carga eléctrica se genera debido a los electrones y por lo tanto es discontinua, pero al estudiarla a un nivel macroscópico se emplea una densidad de carga por unidad de volumen que describa el estado eléctrico del cuerpo, esta densidad de carga se puede definir para cada punto y es la relación entre la carga eléctrica total de un volumen representativo en la vecindad de un punto del medio y la carga total del medio. El volumen representativo debe ser lo suficientemente pequeño de modo que permita la obtención del efecto promedio de la magnitud física en estudio, y para el caso de medios porosos este volumen debe ser grande comparado con las dimensiones de los poros, pero pequeño comparado con las dimensiones del medio poroso.

Considere un volumen de control V , el cual contiene un área superficial, A , la cual está integrada por partes elementales de áreas ΔA . A medida que ΔA se aproxima a cero, la suma de las áreas elementales se convierte en una integral de superficie. Ahora estableciendo el principio de conservación de alguna propiedad física η (como masa) dentro del volumen de control V . Es decir:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de } \eta \text{ en } V \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo Neto} \\ \text{de } \eta \text{ que} \\ \text{entra a } V \end{array} \right\} \pm \left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo de} \\ \text{producción} \\ \text{de } \eta \text{ en } V \end{array} \right\} \quad (3.1)$$

Estableciendo la ecuación anterior en un lenguaje matemático y definiendo a W como la cantidad total de η en V por unidad de volumen de fluido en V ; el término de acumulación se puede expresar como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de } \eta \text{ en } V \end{array} \right\} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \begin{array}{l} \text{Cantidad} \\ \text{Total de} \\ \eta \text{ en } V \end{array} \right\} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_V W dV \right\} \quad (3.2)$$

Y si el volumen de control V no varía con el tiempo se tiene que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_V W dV \right\} = \int_V \frac{\partial W}{\partial t} dV. \quad (3.3)$$

Siguiendo con el término de flujo neto en V y estableciendo que \vec{N} es el vector de flujo de η evaluado en el centro del área elemental ΔA en unidades de η por área-tiempo. Tomando a la componente normal de \vec{N} que atraviesa a ΔA , se tiene que el ritmo de transporte de a través de ΔA es

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo de} \\ \text{transporte} \\ \text{de } \eta \text{ a través } \Delta A \end{array} \right\} = -\vec{n} \cdot \vec{N} \Delta A \quad (3.4)$$

Sumando todos los elementos de superficie se tiene

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo Neto de} \\ \text{transporte de } \eta \\ \text{a través } \Delta A \end{array} \right\} = -\int_A \vec{n} \cdot \vec{N} dA \quad (3.5)$$

Aplicando el teorema de la divergencia a este último término para convertir a la integral de área en integral de volumen.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo Neto de} \\ \text{transporte de } \eta \\ \text{a través } \Delta A \end{array} \right\} = -\int_A \vec{n} \cdot \vec{N} dA = -\int_V \nabla \cdot \vec{N} dV \quad (3.6)$$

Para el término neto de producción η en V se define a R como el ritmo de producción de η por unidad de volumen-tiempo. En este término si $R > 0$ se refiere a creación (fuente) y si $R < 0$ a destrucción (sumidero).

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ritmo Neto} \\ \text{de producción} \\ \text{de } \eta \text{ en } V \end{array} \right\} = \int_V R dV \quad (3.7)$$

Combinando todos los términos del principio de conservación se llega a la siguiente ecuación escalar, en donde el volumen V es arbitrario, por lo que la ecuación de conservación no depende del volumen V :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{N} = R \quad (3.8)$$

3.2 Ecuación de Movimiento.

Henry Darcy en 1856 realizó experimentos en los cuales colocaba un cilindro lleno de arena, de aproximadamente un metro de alto. En su experimento tenía dos posiciones que limitaban al medio poroso contenido en el cilindro, por las cuales entraba y salía el flujo de agua, cada altura estaba relacionada con una altura manométrica ($h_{Entrada}$ y h_{Salida}), de modo que el agua fluía a través del medio poroso contenido dentro del cilindro a causa de la diferencia entre las alturas manométricas de entrada y salida del cilindro. El área del cilindro permanecía constante por lo que las trayectorias de flujo en el medio poroso se podían considerar como líneas rectas. Darcy dejaba fluir a un fluido incompresible (agua) y cambiando al medio poroso durante varios experimentos encontró que la ecuación (3.9) se cumple para describir el flujo en medios porosos, donde la velocidad de filtración de agua es proporcional al gradiente hidráulico local (cambio en la altura manométrica sobre una posición de referencia); y a la constante de proporcionalidad le llamó conductividad hidráulica K , la cual varía dependiendo del medio poroso y el fluido usado. La influencia de la densidad y la viscosidad del fluido no se investigó [7].

$$u = K \frac{h_{Entrada} - h_{Salida}}{L} \quad (3.9)$$

donde

- L : la longitud del medio poroso.
 K : es la conductividad hidráulica.
 u : es la velocidad de filtración o de Darcy.

La velocidad de Darcy es el gasto volumétrico dividido por el área macroscópica normal al flujo. Cabe mencionar que la velocidad de Darcy no es la velocidad real del fluido, ya que no considera la porosidad del medio. A la velocidad de Darcy dividida entre la porosidad del medio se le denomina velocidad intersticial, la cual es la velocidad real de un elemento de fluido que atraviesa un medio poroso.

La ley de Darcy se puede escribir en función de la presión en la entrada y la salida del medio poroso, como sigue:

$$u = \frac{K}{g} \frac{[(p_{Entrada} - p_{Salida}) / \rho + Lg]}{L} \quad (3.10)$$

El valor de la constante K depende de las propiedades del medio y del fluido. Antes de los años 1930 a la constante K se le llamaba constante de permeabilidad. Pero Nutting (1930) y Wyckoff (1933), con experimentos en los que variaba el tipo de líquido, lograron separar las propiedades del medio y las del líquido, contenidas en K [4], por lo que la ecuación (3.10) se reescribe de la siguiente manera:

$$u = \frac{k}{\mu} \frac{[(p_{Entrada} - p_{Salida}) / \rho + Lg]}{L} \quad (3.11)$$

Donde μ es la viscosidad del fluido y k es la permeabilidad del medio. En forma diferencial la ley de Darcy se escribe de la siguiente forma [2, 4, 5, 7].

$$\vec{u} = -\left(\frac{k}{\mu}\right) [\vec{\nabla}p + \rho g \vec{\nabla}H] \quad (3.12)$$

Donde H es una distancia positiva.

Para extender la ley de Darcy al flujo multifásico se hace uso del concepto de permeabilidades relativas comentado en el capítulo anterior, y se establecen ecuaciones de movimiento para cada fase. Las ecuaciones para agua y aceite se muestran a continuación respectivamente:

$$\vec{u}_w = -\left(\frac{kk_{rw}}{\mu_w}\right)\left[\vec{\nabla}p_w + \rho_w g \vec{\nabla}H\right] \quad (3.13)$$

$$\vec{u}_o = -\left(\frac{kk_{ro}}{\mu_o}\right)\left[\vec{\nabla}p_o + \rho_o g \vec{\nabla}H\right] \quad (3.14)$$

donde \vec{u}_w y \vec{u}_o son vectores que representan a las velocidades vectoriales de Darcy para agua y aceite respectivamente.

De las ecuaciones (3.13) y (3.14) se observa que la velocidad de una fase depende principalmente de la saturación de dicha fase, ya que la permeabilidad relativa es el parámetro más importante en el flujo multifásico. Si en el flujo bifásico la presión capilar se considera, entonces los gradientes de presiones en cada fase deben cumplir la definición de presión capilar citada en el capítulo 1, por lo que $\vec{\nabla}p_o \neq \vec{\nabla}p_w$, en caso contrario las variaciones de presiones en los fluidos son las misma haciendo que $\vec{\nabla}p_o = \vec{\nabla}p_w$. Para la componente de la velocidad paralela al vector de gravedad, además del gradiente de presiones se adiciona el peso por unidad de volumen del fluido, haciendo importante la contribución gravitacional para fluidos con densidades diferentes.

3.3 Modelo Analítico de Flujo.

3.3.1 Ecuación general de flujo de dos fases

Para simular el flujo simultáneo de dos fluidos inmiscibles en un yacimiento homogéneo y lineal, inicialmente saturado con agua y aceite, durante un proceso de invasión de agua, dos ecuaciones básicas son utilizadas: la ecuación de conservación de la masa y la ecuación de

movimiento. La velocidad de cada fase es descrita por la extensión de la ley de Darcy al flujo de dos fases, como sigue:

$$u_w = -\frac{k}{\mu_w} k_{rw}(S_w) \left[\frac{\partial p_w}{\partial z} + \gamma_w \frac{\partial H}{\partial z} \right] = -k \lambda_{rw}(S_w) \left[\frac{\partial p_w}{\partial z} + \gamma_w \frac{\partial H}{\partial z} \right] \quad (3.15)$$

$$u_o = -\frac{k}{\mu_o} k_{ro}(S_w) \left[\frac{\partial p_o}{\partial z} + \gamma_o \frac{\partial H}{\partial z} \right] = -k \lambda_{ro}(S_w) \left[\frac{\partial p_o}{\partial z} + \gamma_o \frac{\partial H}{\partial z} \right] \quad (3.16)$$

Donde u_w y u_o son las velocidades de Darcy del agua y aceite respectivamente, λ_{rw} y λ_{ro} son las movilidades relativas de cada fase respectivamente. En el proceso en consideración la saturación de agua en cada punto siempre se incrementa por lo que el fenómeno de histéresis no ocurre, entonces las permeabilidades relativas y la función de presión capilar sólo dependen de la saturación del fluido, las cuales suelen ser determinadas por experimentos de laboratorio. Las saturaciones deben cumplir la siguiente relación de restricción:

$$S_w + S_o = 1 \quad (3.17)$$

y la presión capilar es definida como:

$$p_{cow}(S_w) = p_o - p_w \quad (3.18)$$

La presión capilar está relacionada con la tensión interfacial por lo que si el medio poroso es mojado por aceite se cumple que $p_{cow} < 0$ y lo contrario si el medio es mojado por agua. Asumiendo que los fluidos son incompresibles y que la velocidad total por unidad de área transversal es constante, se establece que:

$$u_t = u_o + u_w \quad (3.19)$$

La distribución de saturaciones de cada fase en el medio poroso durante el flujo multifásico es descrita por la ecuación de continuidad, la cual es la forma matemática del principio de la conservación de la masa.

$$\phi \frac{\partial S_o}{\partial t} + \frac{\partial u_o}{\partial z} = 0 \quad (3.20)$$

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial u_w}{\partial z} = 0 \quad (3.21)$$

Combinando a las ecuaciones de (3.15) a (3.21), la ecuación de la velocidad del agua se expresa de la siguiente manera:

$$u_w = k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \left[\frac{dp_{cow}}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial z} - \Delta\gamma \frac{\partial H}{\partial z} \right] + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t, \quad (3.22a)$$

$$f_w = u_{wD} = \frac{u_w}{u_t} \quad (3.22b)$$

donde $\lambda_{rt} = \lambda_{rw} + \lambda_{ro}$ es la movilidad relativa total, la cual es una medida de la resistencia del medio al flujo multifásico, y $\Delta\gamma = \gamma_w - \gamma_o$ es la diferencia de los pesos específicos del agua y aceite, cabe mencionar que se si normaliza la ecuación de la velocidad del agua a la velocidad total de inyección se obtiene la ecuación de flujo fraccional (3.22b). Insertando la ecuación (3.22a) en la (3.21) el conjunto de ecuaciones se reduce a:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_{cow}}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial z} - k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \Delta\gamma \frac{\partial H}{\partial z} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t \right) = 0 \quad (3.23)$$

donde

$k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_{cow}}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial z}$: Contribución de las fuerzas capilares a la velocidad del agua.

$k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \Delta\gamma \frac{\partial H}{\partial z} :$ Contribución de las fuerzas gravitacionales a la velocidad de agua.

$\frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t :$ Contribución de las fuerzas viscosas a la velocidad del agua.

La ecuación (3.23) es la ecuación general de flujo que incluye a las tres fuerzas principales que actúan en proceso de desplazamiento de dos fases inmiscible en un medio poroso lineal y puede ser usada para describir una variedad de problemas transitorios relacionados con los problemas en una dimensión de flujo bifásico inmiscible, incompresible en un medio lineal. Estableciendo condiciones de frontera e iniciales apropiadas en la ecuación (3.23) se puede resolver un problema específico de flujo multifásico.

La ecuación (3.23) es una ecuación de segundo orden, no-lineal, parabólica la cual no tiene solución analítica posible. Algunos autores [12, 29-31] han eliminado la no-linealidad de esta ecuación, ignorando algunas de las fuerzas o restringiendo fuertemente la forma de las funciones capilares y de las permeabilidades relativas, y así han encontrado soluciones analíticas a casos más simples. La única forma de resolver a la ecuación (3.23) incluyendo a las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas, y una amplia variedad de curvas de presión capilar y de permeabilidades relativas, es con aplicación de técnicas de modelado numérico como: diferencias finitas o elemento finito.

3.3.2 Ecuación no-lineal de tipo difusivo-convectivo.

Con el propósito de obtener soluciones generales al problema de desplazamiento de aceite por agua, en esta sección se trata matemáticamente a la ecuación (3.23) para convertirla en la ecuación adimensional (3.33), por lo que parámetros de flujo y variables reales son agrupados para formar variables adimensionales. Posteriormente expresiones matemáticas para las permeabilidades relativas y presión capilar son incorporadas en la ecuación de flujo permitiendo establecer varios números adimensionales que determinan el comportamiento del proceso de desplazamiento bifásico e inmiscible.

El modelo de desplazamiento en desarrollo, supone que hay una cantidad de fluido que no participa en el movimiento. Por lo que la saturación normalizada de agua, S , asociada con la cantidad de fluido movable es representada por la siguiente expresión:

$$S = \frac{S_w - S_{wi}}{1 - S_{or} - S_{wi}} \quad (3.24)$$

donde S_w y S_{wi} son la saturación de agua total e inicial respectivamente, mientras que S_{or} es la saturación de aceite residual. El volumen de fluido inmóvil repercute en la porosidad efectiva, disminuyéndola por el factor de $(1 - S_{or} - S_{wi})$, entonces la porosidad efectiva se reescribe como:

$$\phi^* = \phi(1 - S_{or} - S_{wi}) \quad (3.25)$$

Introduciendo la saturación normalizada de agua y la porosidad efectiva en la ecuación (3.23), y escribiendo en variables adimensionales a dicha ecuación, se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial S}{\partial t_D} + \frac{\partial}{\partial z_D} \left(\frac{k}{u_t L} \frac{\lambda_{ro} \lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_{cow}}{dS} \frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{k \Delta \gamma}{u_t} \frac{\lambda_{ro} \lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{\partial H_D}{\partial z_D} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \right) = 0 \quad (3.26)$$

donde

$$H_D = \frac{H}{L} \quad \text{Variable adimensional de posición} \quad (3.27)$$

$$z_D = \frac{z}{L} \quad \text{Variable adimensional proporcional a } z \quad (3.28)$$

$$t_D = \frac{u_t}{\phi^* L} t \quad \text{Variable adimensional proporcional a } t \quad (3.29)$$

Es importante mencionar que las variables adimensionales son usadas para escalar resultados de laboratorio a campo, siendo t_D la variable adimensional más importante para los estudios de escalamiento [2].

Con una ecuación similar a la (3.26) pero ignorando a los efectos gravitacionales, Rapoport y Leas [22] concluyeron que el comportamiento del proceso de inyección de agua en un medio lineal es controlado no sólo por la naturaleza del medio poroso y por los fluidos del sistema, también por la longitud a invadirse por agua en el sistema y por el gasto de inyección. Ellos mostraron que el producto de longitud del medio poroso, velocidad de inyección de agua y viscosidad de agua, $(Lu_i\mu_w)$, es un coeficiente que influye en el proceso de inyección. Determinaron que para valores pequeños de este coeficiente las fuerzas capilares son relativamente grandes comparadas con las fuerzas viscosas y el proceso de flujo está controlado principalmente por capilaridad, también que el proceso depende fuertemente del gasto de inyección, longitud del sistema poroso y de la viscosidad del fluido inyectado. Por el contrario, a medida que este coeficiente incrementa, las fuerzas capilares decrecen hasta hacerse eventualmente despreciables.

Para determinar la influencia de las curvas de movilidades relativas en la ecuación general de flujo (3.24), se necesitan expresiones analíticas para las permeabilidades relativas que sean función de la saturación, y para esto usamos la forma potencial, de tipo Corey, para flujo de agua y aceite [2, 8, 10-15].

$$\lambda_{rw} = \lambda_{rw}^* (S)^{nw} = \frac{k_{rw}^*}{\mu_w} (S)^{nw} \quad (3.30)$$

$$\lambda_{ro} = \lambda_{ro}^* (1-S)^{no} = \frac{k_{ro}^*}{\mu_o} (1-S)^{no} \quad (3.31)$$

donde nw y no son los exponentes de Corey para el agua y aceite respectivamente, k_{rw}^* y k_{ro}^* son las permeabilidades relativas en sus puntos finales para el agua y aceite respectivamente.

La función de capilaridad es representada por la función logaritmo natural [11-14].

$$p_{cow} = -p_c^* \ln(S) \quad (3.32)$$

Introduciendo las relaciones (3.30) a (3.32) en la ecuación de flujo (3.24), la ecuación no-lineal de tipo difusivo-convectivo puede ser escrita como sigue:

$$\frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{Pe}} D_c(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} + N_G G(S) - V(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (3.33)$$

donde

$$N_{Pe} = \frac{u_t L}{k \lambda_{rw}^* p_c^*}, \quad \text{Número adimensional de Peclet.} \quad (3.34)$$

$$N_G = \frac{k \lambda_{rw}^* \Delta \gamma}{u_t} \frac{\partial H_D}{\partial z_D}, \quad \text{Número adimensional de gravedad.} \quad (3.35)$$

$$D_c(S) = \frac{(1-S)^{no} S^{nw-1}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}}, \quad \text{Función capilar.} \quad (3.36)$$

$$G(S) = \frac{(1-S)^{no} S^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}}, \quad \text{Función de gravedad.} \quad (3.37)$$

$$V(S) = \frac{MS^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}}, \quad \text{Función de viscosidad.} \quad (3.38)$$

$$M = \frac{\lambda_{rw}^*}{\lambda_{ro}^*}, \quad \text{Relación de movilidades en sus puntos finales} \quad (3.39)$$

$$N_{CG} = N_{Pe} N_G = \frac{L \Delta \gamma}{p_c^*} \frac{\partial H_D}{\partial z_D}. \quad \text{Número adimensional capilar/gravedad.} \quad (3.40)$$

El modelo de flujo en variables adimensionales tiene la flexibilidad de resolver varios problemas dimensionales al resolver uno adimensional, es análogo con otros procesos de flujo y facilita el escalamiento de problemas de flujo en laboratorio a problemas de campo.

Con el desarrollo matemático elaborado se puede establecer una ecuación en variables adimensionales para determinar la contribución de cada fuerza a la velocidad del agua en el proceso de desplazamiento y permitir así el análisis por separado de las contribuciones de cada fuerza.

$$u_{wD} = -\frac{1}{N_{Pe}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} - N_G G(S) + V(S) \quad (3.41)$$

donde

$$u_{wDC} = -\frac{1}{N_{Pe}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} \quad \text{Contribución capilar a la } u_{wD} \cdot \quad (3.42a)$$

$$u_{wDG} = -N_G G(S) \quad \text{Contribución gravitacional a la } u_{wD} \cdot \quad (3.42b)$$

$$u_{wDV} = V(S) \quad \text{Contribución viscosa a la } u_{wD} \cdot \quad (3.42c)$$

$$u_{wD} = u_{wDC} + u_{wDG} + u_{wDV} \quad (3.43)$$

La ecuación (3.43) ilustra que la suma de las contribuciones de cada fuerza (capilar, gravitacional y viscosa) resulta en la velocidad adimensional de agua.

3.4 Efecto de las propiedades del sistema roca-fluidos en el modelo analítico

3.4.1 Números adimensionales

Para hacer un análisis cualitativo de la influencia de las tres fuerzas en el proceso de inyección de agua se consideran primero a las fuerzas viscosas como en el caso de B-L donde el proceso depende principalmente de la relación de movilidades en sus puntos finales. Así, cuando $M \leq 1$ el proceso de desplazamiento es favorable lo que significa que el aceite es capaz de viajar más rápido que el agua. Por otro lado, si $M > 1$, el agua se mueve a mayor velocidad que el aceite y puede desarrollar digitación de agua en el proceso de flujo, permitiendo perfiles de saturación de agua desfavorables, como se ha reportado en la literatura [2, 6, 7].

Considerando a las fuerzas capilares y viscosas como en el estudio realizado por Rapoport y Leas en 1953 [22]. De acuerdo con la relación (3.34), el número de Peclet relaciona a las fuerzas capilares con las viscosas, y muestra que el comportamiento del coeficiente ($Lu_t\mu_w$) está en acuerdo con lo mencionado por Rapoport y Leas. Las fuerzas capilares toman importancia a medida que el número de Peclet disminuye.

De las tres fuerzas en consideración, el siguiente caso ignora los efectos de las fuerzas capilares en la ecuación de flujo, en el cual el N_G es una medida de la relación entre las fuerzas gravitacionales y las viscosas, y determina la dirección de flujo, de modo que cuando el número gravitacional es negativo la dirección de flujo es hacia abajo, como puede verse en la ecuación (3.41), en donde se puede observar que los términos viscoso y gravitacional tendrían el mismo signo bajo dicha condición. Y por lo contrario cuando el número gravitacional adimensional es positivo el flujo es hacia arriba. La definición de N_G también muestra que en el desplazamiento vertical, las fuerzas gravitacionales incrementan cuando el medio poroso tiene alta permeabilidad y cuando la diferencia de densidades entre los fluidos incrementa. También se puede deducir que cuando el gasto de inyección y la viscosidad del fluido aumentan dicho número adimensional disminuye.

Finalmente, considerando a las tres fuerzas simultáneamente, lo anteriormente mencionado sigue siendo aplicable. Un nuevo número adimensional es definido si se multiplican a los números de Peclet y gravitacional adimensionales, dicho número es definido como el número *capilar/gravedad* adimensional [13], N_{CG} y está dado por la relación (3.40). Este número muestra la relación entre las fuerzas gravitacionales y las capilares. En desplazamientos que interviene la gravedad, las fuerzas gravitacionales son relativamente más grandes que las capilares cuando el flujo es vertical, la diferencia entre los pesos específicos del agua y aceite es grande, y el medio poroso es largo.

3.4.2 Permeabilidades relativas.

El concepto de permeabilidades relativas es fundamental en los estudios sobre flujo de fluidos en medios porosos ya que este concepto proporciona información acerca de la

facilidad del medio para permitir el flujo de fluidos. Las permeabilidades relativas dependen de varias propiedades del sistema roca-fluido, siendo la más importante la mojabilidad del medio, que se refiere a la afinidad de un medio por una fase o fluido. Considerando los modelos analíticos (3.30) y (3.31) para las permeabilidades relativas, se puede observar que los modelos dependen de los exponentes de Corey y de las movilidades relativas en sus puntos finales. En la presente sección se analiza la influencia de los exponentes de Corey y de las movilidades relativas en sus puntos finales.

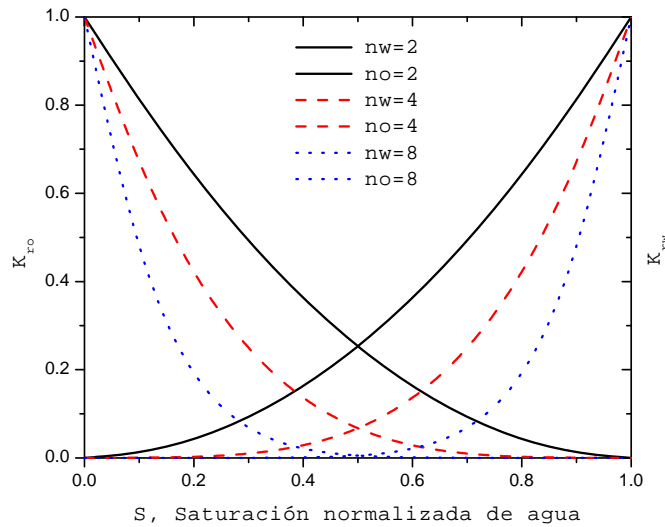


Figura 3.1: Curvas típicas de permeabilidades relativas por el modelo de Corey.

Fijando el valor de $M = 1$, entonces los exponentes de Corey son los que determinan el grado de mojabilidad de cada fase en el medio poroso. En la figura 3.1 se observa que a medida que los exponentes de Corey se incrementan, las permeabilidades relativas se hacen más cóncavas, aumentando la afinidad del medio por los fluidos y reduciendo la capacidad de flujo de los fluidos a través del medio poroso.

En esta sección se analizan tres casos en los cuales se asumen que $M = 1$, por lo que la mojabilidad depende sólo de los exponentes de Corey y se analiza el comportamiento de los coeficientes no-lineales del modelo analítico de flujo en tres casos: En el primero el sistema tiene fluidos con la misma mojabilidad $n_w = n_o = n$; en el segundo se fija el valor de $n_o = 2$ y se varia el exponente de Corey para el agua; en el tercero se fija $n_w = 2$ y se varia el exponente de Corey para el aceite.

En la figura 3.2 se observa sólo el efecto de “ n ” en la función de viscosidad, $V(S)$, la cual es igual a la función de flujo fraccional para flujo viscoso. Aplicando los conceptos básicos de la teoría de BL y de Welge para determinar la saturación promedio detrás del frente de desplazamiento, \bar{S} , en las curvas de la figura 3.2, se puede determinar la curva que proporciona la recuperación más alta. Por lo que de la figura 3.2 se puede observar que a medida que n aumenta la saturación promedio de tras del frente de desplazamiento disminuye, y que para fluidos con el mismo grado de mojabilidad las áreas bajo las curvas de la función viscosa son iguales en todos los casos de n , y las curvas toman al punto en $S = 0.5$ como pivote. Entonces a medida que las permeabilidades relativas al agua y aceite disminuyen, las recuperaciones obtenidas disminuyen debido a las fuerzas interfaciales entre el medio poroso y los fluidos que impiden que la mayor parte de los fluidos se mueva.

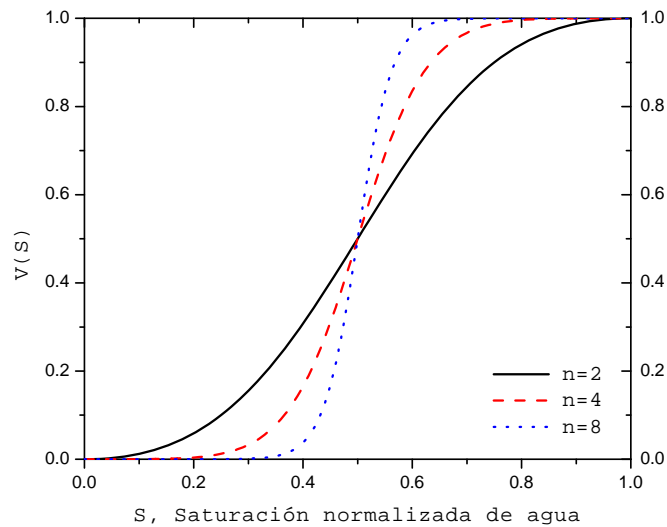


Figura 3.2: Función de viscosidad para $M = 1$, variando $n_o = n_w = n$.

Las figuras 3.3 y 3.4 muestran el comportamiento de las funciones de gravedad y capilaridad para diferentes valores de n . Se observa que ambos coeficientes no-lineales tienden a minimizar sus efectos en la ecuación de flujo en la medida que n aumenta, por lo que al aumentar la mojabilidad del medio poroso por ambos fluidos, el flujo por efectos gravitacionales y capilares se reduce. De la función de gravedad en las condiciones de

mojabilidades iguales de los fluidos se puede ver que las curvas muestran simetría en $S = 0.5$, sin embargo la función de capilaridad no muestra dicha simetría.

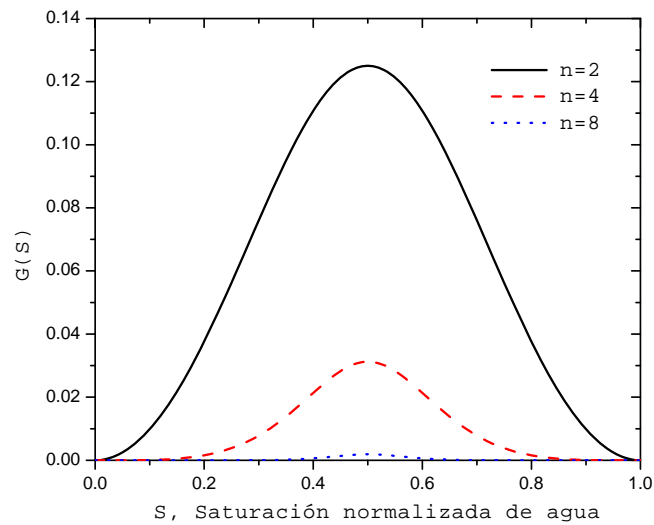


Figura 3.3: Función de gravedad para $M = 1$, variando $no = nw = n$.

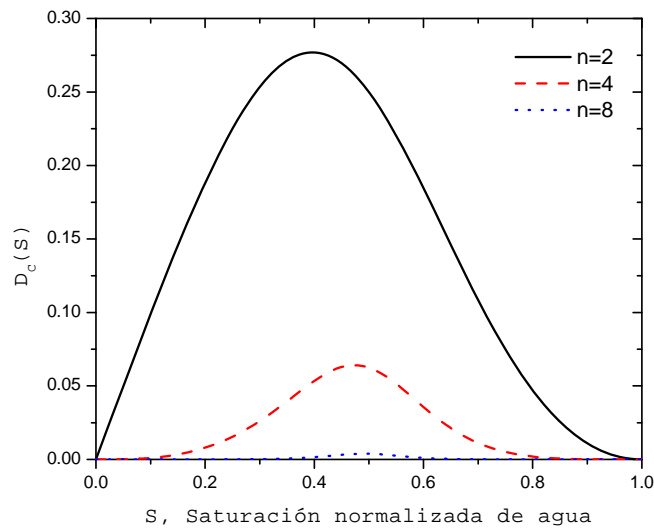


Figura 3.4: Función de capilaridad para $M = 1$, variando $no = nw = n$.

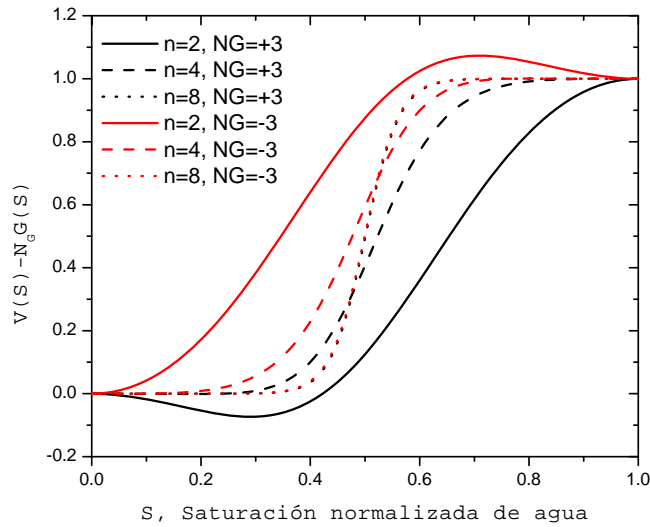


Figura 3.5: Velocidad adimensional de agua para $M = 1$, variando $no = nw = n$, considerando sólo fuerzas viscosas y gravitacionales

Los efectos de las fuerzas viscosas y gravitacionales se pueden observar en la figura 3.5 donde se grafican las curvas de flujo fracción de la ecuación (3.41). La dirección de flujo es tomada en cuenta al variar el número de gravedad de $N_G = +3$ para el flujo hacia arriba y $N_G = -3$ para el flujo hacia abajo. De la figura 3.5 se puede notar que la saturación promedio del perfil de saturaciones es mayor cuando las fuerzas gravitacionales no asisten al flujo de los fluidos. Examinando la influencia del exponente de Corey se observa que a medida que n disminuye, la recuperación al momento del rompimiento se incrementa para N_G positivos. Como se mencionó anteriormente: a medida que n incrementa los efectos gravitacionales se disipan y esto se puede ver en las curvas para $n = 8$, con $N_G = +3$ y $N_G = -3$ que son prácticamente iguales a pesar que las direcciones de flujo sean opuestas. Lo anterior se explica con el concepto de mojabilidad, que incrementa cuando n aumenta, disminuyendo las permeabilidades relativas de ambas fases, e impidiendo el flujo de los fluidos hasta el punto en el cual la diferencia de pesos específicos entre los fluidos y la dirección de flujo sean despreciables.

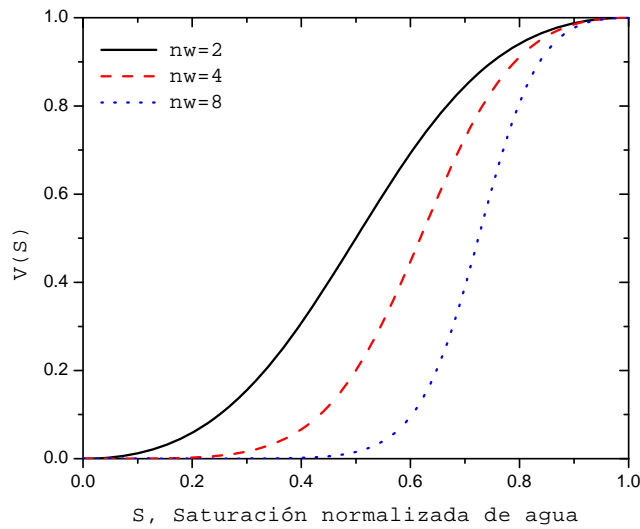


Figura 3.6: Función de viscosidad para $M = 1$, $no = 2$, variando nw .

En el segundo caso de análisis el exponente de Corey para el aceite se fija a $no=2$ y nw es variado. La figura 3.6 muestra el efecto de cambiar el grado de mojabilidad del medio poroso por el agua, al variar el exponente de Corey para el agua en la función de viscosidad, y se observa que para curvas con nw mayores se obtienen saturaciones promedio, \bar{S} , mayores. Debido a que el agua se transporta con mayor dificultad que el aceite por la baja permeabilidad al agua del medio poroso, entonces el aceite es barrido eficientemente por el frente de agua.

Bajo las mismas condiciones de bajas permeabilidades al agua la influencia en las funciones de gravedad y capilaridad, figuras 3.7 y 3.8 respectivamente, muestran que el aumento de nw minimiza los valores tomados por los coeficientes de gravedad y capilaridad en el modelo de flujo no-lineal, además las curvas de estas figuras sesgan sus valores hacia saturaciones de agua altas en la medida que nw aumenta. Por lo que las contribuciones gravitacionales y capilares requieren mayor grado de saturación de agua en el poro a medida que la mojabilidad al agua aumenta, para que los movimientos debidos a fuerzas gravitacionales y capilares ocurran. Si el poro está completamente saturado con agua, las contribuciones gravitacionales y capilares son nulas.

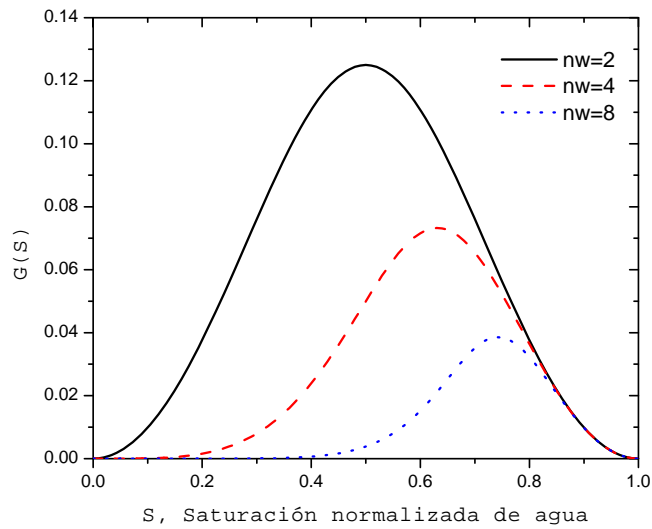


Figura 3.7: Función de gravedad para $M = 1$, $no = 2$, variando nw .

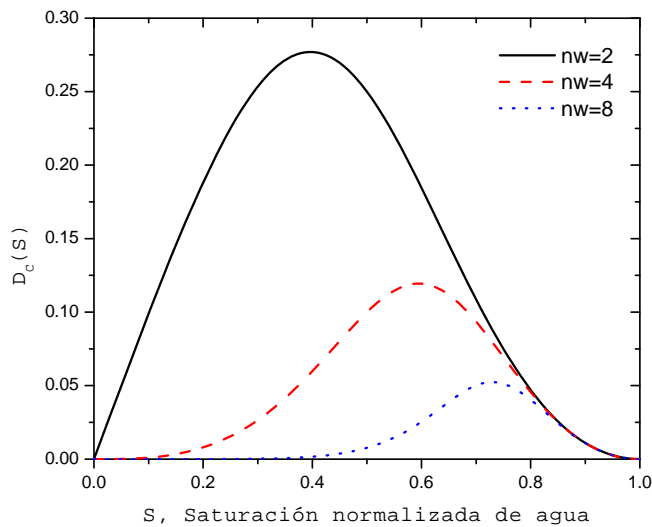


Figura 3.8: Función de capilaridad para $M = 1$, $no = 2$, variando nw .

Los efectos de la gravedad y del grado de mojabilidad descrito por nw , en la velocidad adimensional del agua son ilustrados en la figura 3.9 donde claramente se observa que las curvas que proporcionan mejores recuperaciones son las que corresponden al flujo en dirección contraria a la gravedad o N_G positivas, ya que las fuerzas gravitacionales tienden

a colocar al agua debajo del aceite, permitiendo la segregación de fluidos. También se observa que cuando el grado de mojabilidad al agua aumenta, los procesos para $nw=8$ con $N_G = +3$ y $N_G = -3$ se aproximan, minimizando sus diferencias originadas por la dirección de flujo, afirmando que las fuerzas gravitacionales son disminuidas en la medida que el flujo de agua es restringido por las bajas permeabilidades relativas al agua.

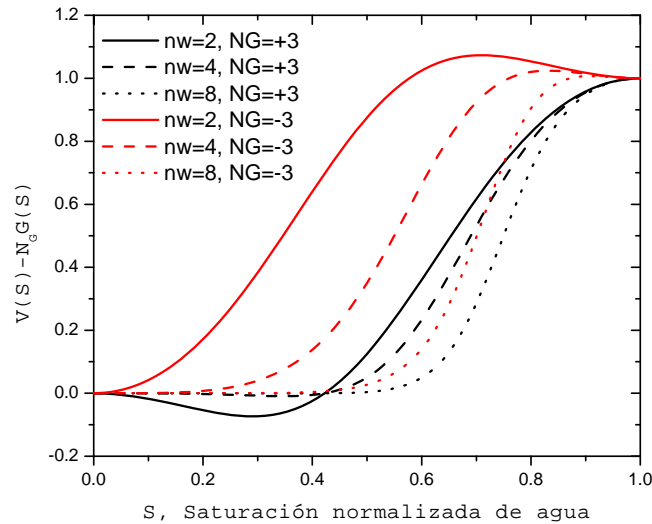


Figura 3.9: Velocidad adimensional del agua con las fuerzas viscosas y gravitacionales, para $M = 1$, $no = 2$, variando nw .

En el tercer caso de análisis es en donde el exponente de Corey para el agua se fija a $nw = 2$ y no se varia. La figura 3.10 muestra el efecto de variar el grado de mojabilidad del medio poroso al aceite sobre la función de viscosidad y se observa que a medida que la mojabilidad al aceite incrementa, al aumentar no , la eficiencia del desplazamiento por agua disminuye debido a que las fuerzas interfaciales entre la roca y aceite reducen el movimiento del aceite, permitiendo que el agua avance con mayor facilidad que el aceite dejando aceite residual detrás del barrido por agua.

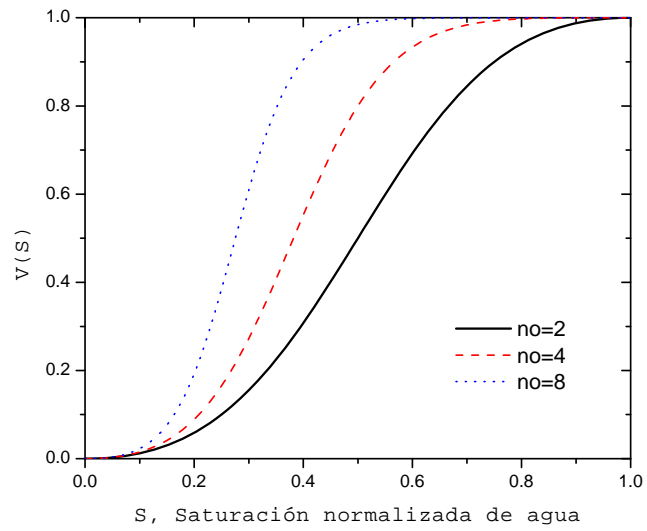


Figura 3.10: Función de viscosidad para $M = 1$, $n_w = 2$, variando no .

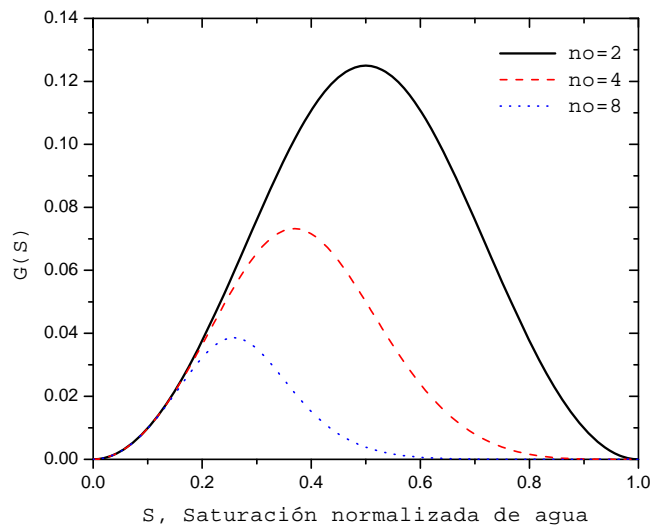


Figura 3.11: Función de gravedad para $M = 1$, $n_w = 2$, variando no .

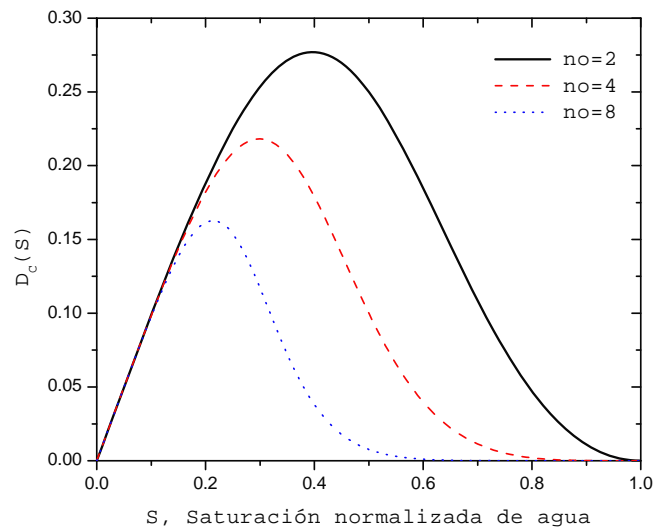


Figura 3.12: Función de capilaridad para $M = 1$, $nw = 2$, variando no .

Las figuras 3.11 y 3.12 muestran el comportamiento de los coeficientes de gravedad y capilar para diferentes valores de no . De este par de gráficas se puede observar que en la medida que el sistema se hace más mojante al aceite los efectos gravitacionales y capilares se minimizan, y se observa que las curvas en forma de campana se sesgan hacia la izquierda o hacia valores bajos de saturación de agua. Para medios mojados por aceite las contribuciones máximas por las funciones gravitacionales y capilares son cuando el poro está mayormente saturado con aceite.

Finalmente en la figura 3.13 muestra la influencia de las fuerzas gravitacionales en las curvas de velocidad adimensional del agua; y se observa que cuando la inyección de agua es en dirección contraria a la gravedad se obtienen mejores recuperaciones que en el caso contrario. Y que los escenarios favorables se presentan cuando la permeabilidad relativa al aceite toma valores altos, $no=2$, permitiendo que el aceite fluya lo más rápido posible.

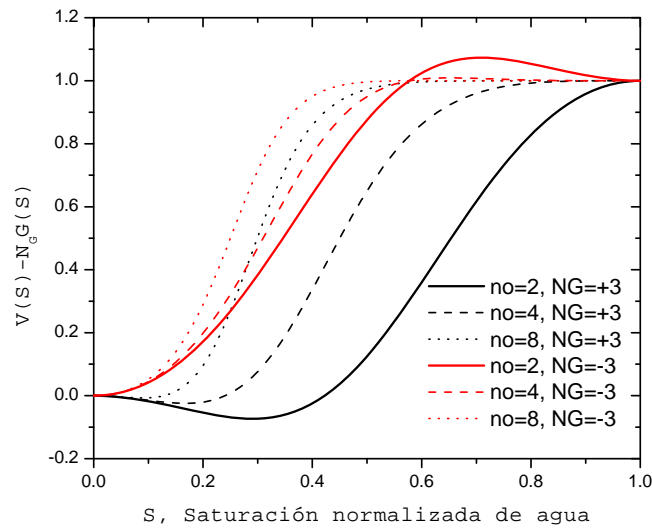


Figura 3.13: Velocidad adimensional del agua con las fuerzas viscosas y gravitacionales, para $M = 1$, $n_w = 2$, variando no .

Otro parámetro de interés que afecta a los coeficientes no-lineales es la relación de las movilidades relativas en sus puntos finales, M . Es bien conocido que para casos en los que $M \leq 1$ se obtienen escenarios favorables para flujos viscosos y que $M > 1$ es un caso no favorable. La relación de movilidades en sus puntos finales también es un parámetro que depende de las permeabilidades relativas, ver ecuación (3.39), pero se agrega la influencia de las viscosidades de los fluidos. Relación de las movilidades relativas en sus puntos finales mayores a la unidad indica que el agua tiene mayor movilidad que el aceite, por lo que el agua tenderá a moverse más rápido que el aceite resultando en procesos desfavorables, entonces, en los procesos de inyección de agua se busca que la relación de movilidades en sus puntos finales sea lo más pequeña posible.

A continuación se analiza la influencia de M en los tres coeficientes no-lineales que se relacionan con las tres fuerzas principales en problemas de flujo de fluidos.

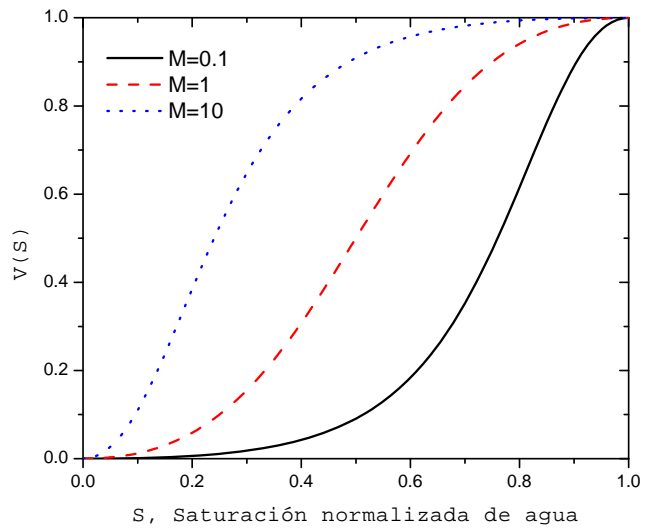


Figura 3.14: Función de viscosidad con $no = nw = 2$, variando M .

La influencia de M en el flujo viscoso es observada en la figura 3.14, que muestra estar en acuerdo con la teoría de avance frontal: la cual indica que a medida que M disminuye el proceso de inyección resulta en recuperaciones finales altas.

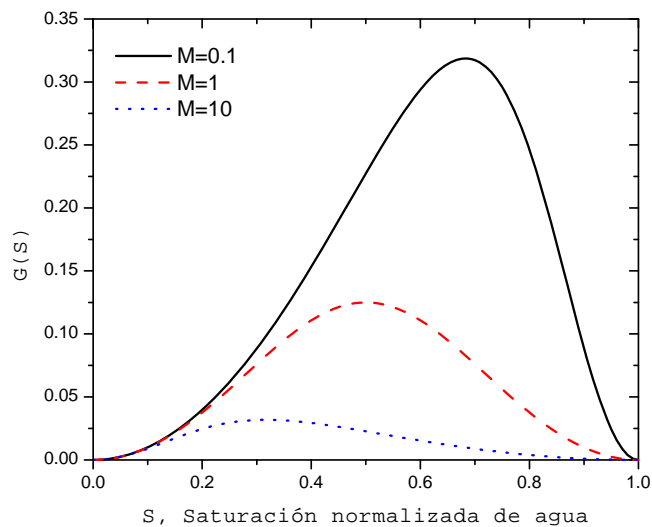


Figura 3.15: Función de gravedad con $no = nw = 2$, variando M .

El comportamiento de los coeficientes gravitacional y capilar son ilustrados en las figuras 3.15 y 3.16, y ambos coeficientes manifiestan similares comportamientos a los cambios de M , consistiendo en que al aumentar M , los valores de los coeficientes no-lineales disminuyen y las curvas en forma de campana se sesgan hacia la izquierda. Por lo que en escenarios favorables los valores tomados por las funciones gravitacionales y capilares son mayores en comparación con las correspondientes a los casos no favorables.

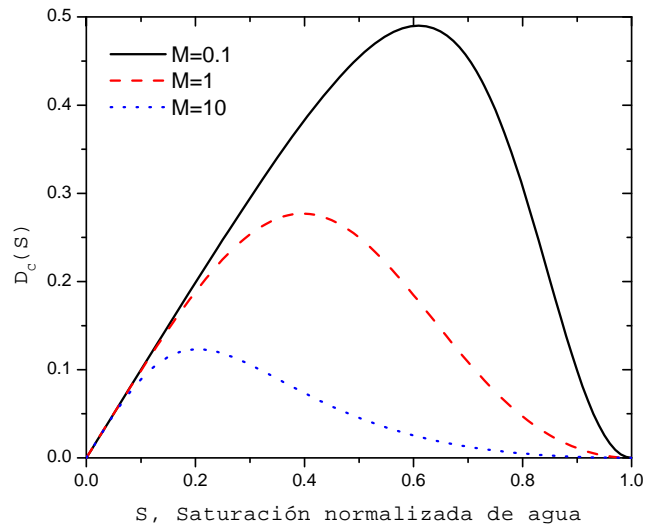


Figura 3.16: Función de capilaridad con $no = nw = 2$, variando M .

Incorporando las fuerzas gravitacionales con las viscosas en el proceso de desplazamiento, la figura 3.17 muestra que los procesos que no son asistidos por las fuerzas gravitacionales proporcionan mejores recuperaciones y se observa que a medida que M disminuye la saturación promedio detrás del frente al tiempo del rompimiento incrementa, debido a que la movilidad del agua es menor que la del aceite, permitiendo que el aceite se traslade más rápido que el agua y así el barrido por agua reduce la cantidad de aceite residual.

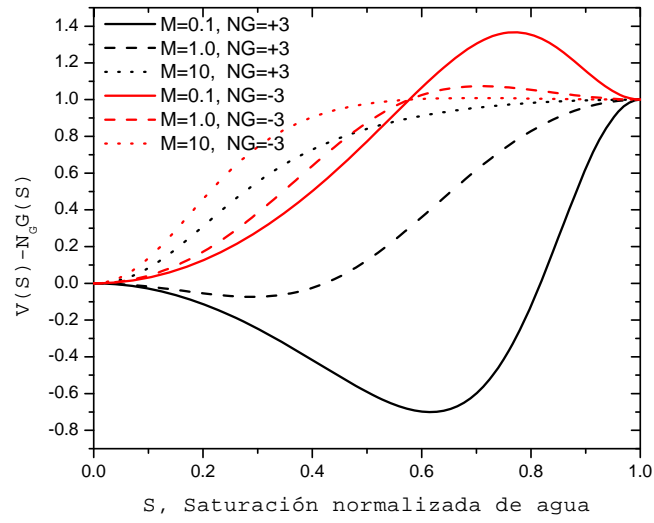


Figura 3.17: Velocidad adimensional del agua con las fuerzas viscosas y gravitacionales, con $no = nw = 2$, variando M .

Capítulo 4.

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN- CONVECCIÓN

Introducción.

En esta sección se muestran los conceptos básicos para modelar numéricamente los fenómenos de flujo de fluidos en medios porosos. Como técnicas del modelado numérico se emplean los métodos de diferencias finitas y elemento finito, siendo el primer método mencionado, el más popular en el área de la simulación numérica de yacimientos, por lo que en este capítulo se estudia la aplicación del método de elemento finito y sus posibles ventajas, así como las desventajas en las soluciones numéricas de problemas convectivos.

Para mostrar los conceptos básicos de las técnicas numéricas, se simplifica a continuación el modelo no-lineal de flujo derivado en el capítulo anterior, ecuación (3.33), a una ecuación lineal de flujo conocida como la ecuación de difusión-convección, que tiene solución analítica para el caso semi-infinito:

$$\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} - \frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (4.1)$$

Las condiciones inicial y de frontera aplicables al caso son:

$$S(z_D, t_D = 0) = 0 \quad (4.2a)$$

$$S(z_D = 0, t_D) = 1 \quad (4.2b)$$

$$\begin{aligned} \lim_{z_{DR} \rightarrow \infty} [S(z_D = z_{DR}, t_D)] &= 0 \\ 0 < z_D < \infty \end{aligned} \quad (4.2c)$$

El problema de dominio semi-infinito en espacio es descrito por las ecuaciones anteriores y consiste en una ecuación parabólica, diferencial parcial de segundo orden, con una condición de inicial y dos condiciones de frontera de tipo Dirichlet.

La solución del problema descrito por las ecuaciones (4.1) y (4.2) es:

$$S(z_D, t_D) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{N_{Pe}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D - t_D] \right) + \exp(N_{PE} z_D) \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{N_{Pe}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D + t_D] \right) \right] \quad (4.3)$$

En el Apéndice A se muestra el desarrollo de la solución analítica, basado en la referencia 9.

La teoría de aproximación polinomial es el fundamento de los métodos de diferencias finitas (DF) y elemento finito (EF), y consiste en encontrar un polinomio de grado m que funcione como un interpolador para calcular los valores aproximados a una función S en un segmento discretizado. El grado del polinomio de interpolación y el número de nodos requeridos determinan el grado de la aproximación. Entre los polinomios que se pueden aplicar, los de Lagrange lineal y cuadrático son los de interés para este trabajo en el desarrollo de las aproximaciones en diferencias finitas y elemento finito. Por lo que, si la variable que describe el comportamiento de los fluidos en el medio poroso es la saturación, entonces la función S es aproximada por una combinación linealmente independiente de polinomios que al ser introducido en las técnicas de DF y EF permiten la elaboración de los modelos numéricos para el cómputo de las soluciones aproximadas S_i^{n+1} , a la solución exacta $S(z_{Di}, t_{Dn})$ en los nodos correspondientes espaciales y temporales. En el apéndice C se describen los conceptos básicos y las expresiones matemáticas de dichos polinomios.

4.1 Aproximación en Diferencias Finitas.

Como ya se mencionó, esta formulación es la más común en el área de la simulación numérica de yacimientos, por lo que se omite la explicación de los conceptos básicos de esta técnica, sin embargo en el apéndice D se explican a detalle. En esta sección se emplea

el método de diferencias finitas y se desarrolla el sistema lineal de ecuaciones que proporcionan la solución aproximada a la solución analítica (4.3).

El método de diferencias finitas se basa en reemplazar las derivadas de una ecuación por aproximaciones en diferencias finitas a dichas derivadas. La ecuación (4.1) cuenta con dos variables; la espacial z_D y la temporal t_D . Se empieza por discretizar la ecuación en la coordenada espacial alrededor del nodo i en diferencias centrales.

$$\frac{1}{N_{Pe}} \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} \Big|_i - \frac{\partial S}{\partial z_D} \Big|_i \approx \frac{1}{N_{Pe}} \frac{S_{i+1} - 2S_i + S_{i-1}}{(\Delta z_D)^2} - \frac{S_{i+1} - S_{i-1}}{2\Delta z_D} \quad (4.4)$$

Para discretizar la variable temporal se puede emplear el método general [33, 34] que asigna un factor de peso β el cual abarca desde el esquema explícito ($\beta = 0$) hasta el implícito ($\beta = 1$), pasando por el Crank-Nicholson ($\beta = 1/2$). El error en la aproximación temporal, así como la estabilidad numérica dependen del valor que tome β , y el error puede ser de primer o segundo orden. Aplicando esta discretización a la ecuación (4.1) y agregando la aproximación (4.4) se tiene que:

$$\beta \left\{ \frac{1}{N_{Pe}} \frac{S_{i+1} - 2S_i + S_{i-1}}{(\Delta z_D)^2} - \frac{S_{i+1} - S_{i-1}}{2\Delta z_D} \right\}^{n+1} + (1 - \beta) \left\{ \frac{1}{N_{Pe}} \frac{S_{i+1} - 2S_i + S_{i-1}}{(\Delta z_D)^2} - \frac{S_{i+1} - S_{i-1}}{2\Delta z_D} \right\}^n - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \quad (4.5)$$

Donde $i=1,2,3,\dots,I$; siendo I el número total de nodos de la malla que discretiza el dominio en espacio, y n se refiere al nivel de tiempo en la discretización temporal, donde $n+1$ es el nivel incógnita.

El método explícito, que se obtiene a partir de la aproximación de diferencias progresivas en tiempo, generalmente requiere un esfuerzo computacional mínimo, pero es condicionalmente estable. Con este método las ecuaciones se resuelven explícitamente punto a punto, de ahí el nombre de *método explícito*. Por otro lado, el método implícito, que

se obtiene a partir de la aproximación de diferencias regresivas en tiempo, es incondicionalmente estable. Con este método se obtiene un sistema simultáneo de ecuaciones que se resuelve en cada paso de tiempo, también se requiere más capacidad de almacenamiento de memoria en la computadora comparado con la formulación explícita. Estos dos métodos tienen un error de truncamiento de primer orden en la aproximación, a diferencia del método de Crank-Nicholson (CN) que tiene un error en la aproximación de segundo orden, y se basa en un esquema de diferencias centrales en tiempo, y también es incondicionalmente estable [34]. El método de CN requiere más esfuerzo computacional que el implícito, pero esto se compensa con la exactitud de la solución. Sin embargo en este estudio se emplea el método totalmente implícito, por lo que la ecuación (4.5) puede escribirse de la siguiente forma:

$$\left[\frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} + \frac{1}{2\Delta z_D} \right] S_{i-1}^{n+1} - \frac{2}{N_{pe} \Delta z_D^2} S_i^{n+1} + \left[\frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} - \frac{1}{2\Delta z_D} \right] S_{i+1}^{n+1} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \quad (i= 2, 3, \dots, I-1) \quad (4.6)$$

4.2 Método de Elemento Finito (MEF).

4.2.1 Método de Elemento Finito de Galerkin.

El Método de Residuos Ponderados (MRP) es la base fundamental de varios métodos en el modelado numérico, algunos de los métodos son: El Método de Elemento Finito de Galerkin (EFG), Método de Colocación, Método de Elementos en las Fronteras. Por lo que primero se describe el MRP, y para ello considérese la existencia de una ecuación diferencial escrita en forma del siguiente operador diferencial definido sobre el dominio B :

$$L[S(z)] = f(z) \quad z \in B \quad (4.7)$$

Donde L es el operador diferencial y f es la función impulsora.

El método propone que la función $S(z)$ sea aproximada por una función $\hat{S}(z)$ la cual consiste en una combinación lineal de funciones linealmente independientes, que satisface a la ecuación diferencial, las condiciones de fronteras e inicial. La función aproximada tiene matemáticamente la siguiente forma:

$$\hat{S}(z) = \sum_{i=1}^I S_i \varphi_i(z). \quad (4.8)$$

Donde I se refiere al número de elementos empleados, y las funciones φ_i son conocidas como funciones base y son usadas como función de interpolación polinomial y empleadas en cada elemento de la discretización del dominio B . Lo que restaría para obtener la función aproximada es la determinación de los valores de S_i en todo el dominio. La ecuación (4.8) es una sumatoria de un número de términos I finitos y en general $\hat{S}(z)$ difiere de $S(z)$, por lo que se define una función de residuos $R(z, A)$, donde A establece al vector de términos desconocidos S_i . Lo anterior se expresa matemáticamente como:

$$L[\hat{S}(z)] - f(z) = R(z, A). \quad (4.9)$$

El objetivo del MRP es determinar una A tal que minimice a la función de residuos $R(z, A)$; y para lograr esto, el método multiplica a la función de residuos por una función de pesos $w_i(z)$, $i=1, 2, \dots, I$. La función resultante del producto es integrada sobre el dominio B e igualada a cero, haciendo que la función integrada sea forzada a cero en una forma ponderada por la función de peso.

$$\int_B R(z, A) w_i(z) dz = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, I). \quad (4.10)$$

Si consideramos al producto de funciones como un producto de vectores la ecuación anterior puede verse como un producto interno, por lo que la ecuación anterior se puede escribir en la siguiente notación; que obliga a que el residuo sea ortogonal a la función de peso.

$$\langle R(z, A), w_i(z) \rangle = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, D). \quad (4.11)$$

La ecuación anterior puede escribirse más explícitamente de la siguiente forma:

$$\sum_{i=1}^N [\langle L[S_i \varphi_i(z)], w_i(z) \rangle - \langle f(z), w_i(z) \rangle] = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, D). \quad (4.12)$$

De esta ecuación se obtiene un conjunto de I ecuaciones, y con las condiciones de frontera se determinan los valores de S_i .

Hay varios métodos de residuos pesados que difieren solo en la selección de la función de peso $w_i(z)$. El método empleado en este trabajo es el propuesto por Galerkin, el cual consiste en emplear a las funciones base φ_i como las funciones de peso w_i . Aplicando el método de Galerkin a la ecuación (4.12) se tiene el siguiente sistema de ecuaciones.

$$\sum_{i=1}^N [\langle L[S_i \varphi_i(z)], \varphi_i(z) \rangle - \langle f(z), \varphi_i(z) \rangle] = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, D). \quad (4.13)$$

Lo que resta por hacer es seleccionar la función base; por mencionar algunas, se tienen a los polinomios Lagrangianos y Hermitianos.

Para emplear la técnica de EF es necesario hacer la selección en la función base a emplear como polinomio de interpolación. Para el desarrollo de las soluciones aproximadas de este capítulo se emplean dos tipos de funciones base de interpolación: la lineal y cuadrática (ver Apéndice C).

4.2.2 Aproximación en elemento finito con polinomios lineales.

En la sección anterior se fijaron los conceptos básicos del MEFG y en esta sección se realiza la aplicación de dicho método al problema descrito por el conjunto de ecuaciones (4.1) – (4.2). El problema a resolver contiene una variable espacial y una temporal, las

derivadas espaciales son aproximadas por el método de elemento finito, mientras que el esquema de diferencias finitas es usado para la derivada temporal.

La solución aproximada por el método de EFG que emplea funciones base de interpolación lineal, luce como muestra la figura 4.1, donde se observa que el método numérico determina valores aproximados a la solución exacta y proporciona un interpolador lineal entre los nodos. El desarrollo detallado de esta aproximación se describe en el apéndice E.

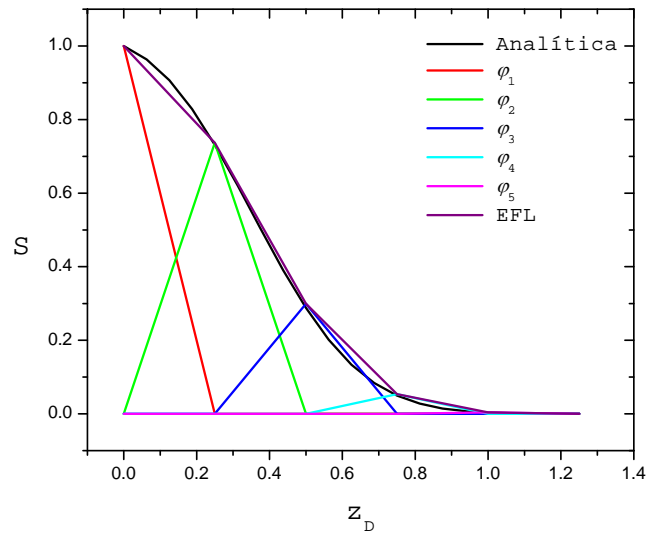


Figura 4.1: Función base lineal del método de EFG y la solución numérica por EFG con funciones base lineal (EFL).

Considerando el problema a resolver, descrito en la sección de introducción, se procede a definir el operador diferencial empleado por el método de Galerkin que actúa sobre la ecuación (4.1).

$$L[S] = \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (4.14)$$

Una vez definido el operador diferencial se usa la ecuación (4.11) que formula a una ecuación integral que aproxima a la función de residuo a cero.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] - \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i(z_D) \right\rangle = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, I). \quad (4.15)$$

Aplicando la integración por partes se tiene que:

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle + \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] \varphi_i \Big|_{z_D=0}^{z_D=z_{DR}} = 0 \quad (4.16)$$

(i=1, 2, 3, ..., I)

Debido a que se cuentan con condiciones de frontera de tipo Dirichlet (4.2b) y (4.2c), el tercer término de la ecuación anterior se anula.

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (4.17)$$

Seleccionando a los polinomios de interpolación lineal como las funciones base a aplicar, se determina la expresión de la función aproximada.

$$\hat{S}(z_D, t_D) = \sum_{j=1}^I S_j(t_D) \varphi_j(z_D) \quad (4.18)$$

Combinando el par de ecuaciones anteriores y tomando en cuenta que las funciones base lineales toman el valor de cero en todo el dominio que no pertenezca al elemento finito involucrado con i , entonces:

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left\{ -S_j \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_j}{dz_D} - \varphi_j \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (4.19)$$

(i= 2, 3, ..., I-1)

Discretizando a la variable temporal con el esquema general que se emplea en diferencias finitas, que consiste en un factor β de peso que abarca a los esquemas explícitos, Crank-Nicholson e implícito.

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left\{ -[\beta S_j^{n+1} - (\beta-1)S_j^n] \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_j}{dz_D} - \varphi_j \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (4.20)$$

(i = 2, 3, ..., I-1)

Resolviendo las integrales de la ecuación anterior y tomando el esquema implícito se obtiene el sistema de $I-2$ ecuaciones lineales con $I-2$ incógnitas, derivado por el método de elemento finito de Galerkin.

$$\left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} + \frac{1}{2\Delta z_D} \right] S_{i-1}^{n+1} - \frac{2}{N_{PE} \Delta z_D^2} S_i^{n+1} + \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} - \frac{1}{2\Delta z_D} \right] S_{i+1}^{n+1} - \frac{1}{6} \left[\frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 4 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} \right] = 0 \quad (i = 2, 3, \dots, I-1) \quad (4.21)$$

De esta última ecuación se observa que las aproximaciones de *diferencias finitas* (4.6) y *elemento finito de Galerkin* (4.21) proporcionan la misma expresión algebraica para la discretización espacial, variando sólo la correspondiente a la discretización en tiempo, por lo que se podría esperar que las soluciones numéricas obtenidas por ambos métodos sean más parecidas a medida que la discretización temporal tenga poco peso. El desarrollo detallado de la ecuación (4.21) se muestra en el apéndice E.

4.2.3 Aproximación en elemento finito con polinomios cuadráticos.

En la sección anterior el método por el cual se resolvió el problema citado en la sección introductoria, fue el método de EFG donde se emplearon las funciones lineales como funciones base y se obtuvo un sistema de ecuaciones para calcular los valores aproximados de la función $S(z_D, t_D)$. En esta sección se emplea la misma técnica numérica pero se utilizan funciones base de mayor orden en la aproximación, siendo éstas las funciones de

interpolación cuadráticas. El desarrollo detallado de esta aproximación se describe en el apéndice F.

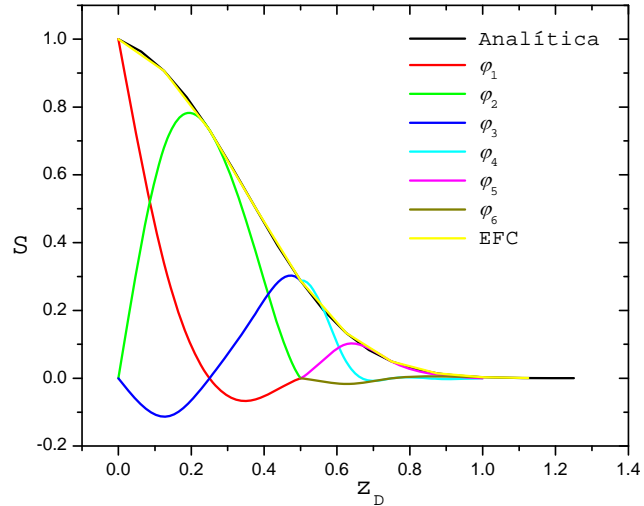


Figura 4.2: Función base cuadrática del método de EFG y la solución numérica por EFG con funciones base cuadrática (EFC).

La figura 4.2 muestra la aplicación de las funciones bases cuadráticas y se observa que los valores EFC entre los nodos se aproximan mejor que los correspondientes al caso lineal EFL, ver figura 4.1. Es importante notar que a diferencia del caso de interpolación lineal, en la interpolación cuadrática la configuración de los elementos cuadráticos indica que por cada elemento se requieren tres nodos en vez de dos como en el caso lineal, por lo que se requieren dos ecuaciones para determinar la información por elemento finito, es decir, una para el nodo i y otra para el nodo $i-1$. Tomando lo anterior en cuenta es necesario derivar el par de ecuaciones lineales para determinar la información en los nodos i e $i-1$.

Empezando por derivar la ecuación para el nodo i y empleando los conceptos del MEFG se establece la siguiente ecuación, donde se aplicó una integración por partes y se tomó en cuenta el tipo de frontera de Dirichlet.

$$-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D}, \varphi_i \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i=3, 5, \dots, I-2) \quad (4.22)$$

Empleando la función aproximada para el nodo i .

$$\hat{S}(z_D, t_D) = \sum_{j=1}^I S_j(t_D) \varphi_j(z_D) \quad (4.23)$$

Combinando el par de ecuaciones anteriores y considerando que para describir la información en el nodo i se emplean los cinco nodos siguientes $i-2, i-1, i, i+1, i+2$.

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left\{ \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle \right] S_j - \frac{dS}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (4.24)$$

(i=3, 5, ..., I-2)

Discretizando la parte temporal de la ecuación anterior

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left\{ \left[\beta S_j^{n+1} - (\beta-1) S_j^n \right] \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle \right] - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \right\} = 0 \quad (4.25)$$

(i=3, 5, ..., I-2)

Resolviendo las integrales de la ecuación anterior y tomando el esquema implícito se obtiene la ecuación para describir al nodo i .

$$\left[\frac{1}{4N_{PE}\Delta z_D^2} + \frac{1}{4\Delta z_D} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-2}{N_{PE}\Delta z_D^2} - \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_{i-1} + \left[\frac{7}{2N_{PE}\Delta z_D^2} \right] S_i + \left[\frac{-2}{N_{PE}\Delta z_D^2} + \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_{i+1} +$$

$$\left[\frac{1}{4N_{PE}\Delta z_D^2} - \frac{1}{4\Delta z_D} \right] S_{i+2} + \frac{1}{10} \left[-\frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8\frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right] = 0$$

(i=3, 5, ..., I-2) \quad (4.26)

Para obtener la ecuación correspondiente al nodo $i-1$ se desarrolla un procedimiento análogo que al caso correspondiente a i . Empleando los conceptos del MEFG para

desarrollar la ecuación integral de aproximación del método de EF se puede llegar a la siguiente expresión, que es la análoga a la ecuación (4.24).

$$\sum_{j=i-2}^i \left\{ \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle \right] S_j - \frac{dS}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right\} = 0$$

(i= 2, 4, ..., I-1) (4.27)

Por la configuración de las funciones bases cuadráticas en un elemento finito se observa que los nodos que se requieren para determinar a la ecuación integral de aproximación son $i-2$, $i-1$ e i y discretizando a la variable temporal con el esquema de diferencias finitas se llega a la siguiente ecuación.

$$\sum_{j=i-2}^i \left\{ \left[\beta S_j^{n+1} - (\beta-1)S_j^n \right] \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle \right] - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right\} = 0$$

(i= 2,4, ..., I-1) (4.28)

Resolviendo las integrales de la esta última ecuación y empleando un esquema implícito se obtiene la ecuación lineal que describe la información para los nodos $i-1$.

$$\left[-\frac{2}{\Delta z_D^2 N_{PE}} - \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_{i-2} + \left[\frac{4}{\Delta z_D^2 N_{PE}} \right] S_{i-1} + \left[-\frac{2}{\Delta z_D^2 N_{PE}} + \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_i$$

$$+ \frac{1}{10} \left[2 \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right] = 0$$

(i= 2,4, ..., I-1) (4.29)

El conjunto de ecuaciones (4.26) y (4.29) generan el sistema de $I-2$ ecuaciones lineales con $I-2$ incógnitas desarrollado por el método de elemento finito de Galerkin.

4.3 Comparación de los esquemas numéricos.

En las secciones anteriores se derivaron tres sistemas de ecuaciones lineales que generan tres soluciones numéricas con diferentes grados de aproximación a una función $S(z_D, t_D)$

de dos variables independientes. En esta sección se procede a comparar las tres soluciones numéricas principalmente al método de *diferencias finitas* y el de *elemento finito* para el mismo orden en el error de truncamiento, y se determinan los casos en donde se requiere mayor orden de aproximación.

Como se mencionó antes, las ecuaciones aproximadas en DF y EFG con funciones base lineal tiene un error de segundo orden en la variable espacial, también se mencionó que la discretización espacial resulta en la misma expresión algebraica para las dos técnicas, ver las ecuaciones (4.6) y (4.21). Para determinar que tanto influye la discretización temporal en los problemas difusivos-convectivos se comparan las soluciones generadas por dichas ecuaciones con la solución exacta del problema, citada en la introducción de este capítulo, ver ecuación (4.3).

Observando la ecuación diferencial (4.1) se puede decir que a medida que N_{PE} aumenta de valor, la influencia del término de la segunda derivada en espacio (difusivo) en la ecuación diferencial disminuye, esto es, los términos de primera derivada en espacio y tiempo se hacen más importantes en la ecuación convirtiendo al problema difusivo-convectivo en un problema de convección. Por lo que se puede concluir brevemente que a medida que el problema se hace convectivo el término transitorio toma más importancia, y como resultado, los sistemas de ecuaciones (4.6) y (4.21) difieren más. Lo mencionado en este párrafo se comprueba con la experimentación numérica desarrollada en esta sección.

Con el objetivo de analizar las diferencias entre las soluciones numéricas, así como el desempeño del método de diferencias finitas y el método de elemento finito se introduce un concepto que ayuda a tener una medida de la exactitud de la solución numérica, tal concepto es conocido como *error global de truncamiento*, que es generado por el error de truncamiento debido al hecho de reemplazar una ecuación diferencial por una ecuación de diferencias para el caso de diferencias finitas y para elemento finito, es por reemplazar una función continua por una función aproximada y continua por secciones (elementos). Debido a las aproximaciones, la solución exacta de la ecuación diferencial y la solución numérica de cada método difieren. La referencia [31] define al error global de truncamiento como:

$$\varepsilon_{G,1} = \max_{i,n} |S_{(i,n)} - S(z_{D(i)}, t_{D(n)})|, \quad (4.30)$$

donde i y n son los contadores de nodos y pasos de tiempo respectivamente. La ecuación (4.30) determina el error máximo en la aproximación, tomando en cuenta todos los valores aproximados tanto en espacio como en tiempo.

Sin embargo la ecuación anterior determina el error máximo en un nodo, por lo que no informa del comportamiento del error en el resto de los nodos, por lo que en este trabajo el error es determinado por el cálculo del área comprendida entre las curvas correspondientes a la solución analítica y la numérica, como lo muestra la figura 4.3, entonces empleando el método de integración numérica conocido como regla del trapecio se puede llegar a la siguiente ecuación (4.31).

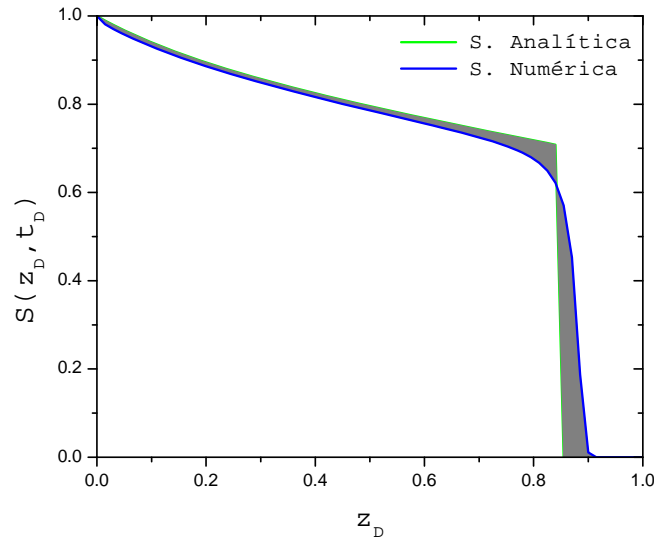


Figura 4.3: Área comprendida entre las curvas analítica y numérica que representa una medida del error en la aproximación.

$$E_A = \frac{\Delta z_D}{2} \left\{ |S_{i=1}^n - S(z_{D_{i=1}}, t_{D_n})| + |S_{i=l}^n - S(z_{D_{i=l}}, t_{D_n})| + 2 \sum_{i=2}^{l-1} [|S_i^n - S(z_{D_i}, t_{D_n})|] \right\} \quad (4.31)$$

Donde E_A es el error en la aproximación determinado por el área entre las curvas numérica y analítica.

Las siglas DF, EFL y EFC son abreviaturas que hacen referencia los métodos de diferencias finitas con la ecuación (4.6), elemento finito con funciones base lineal con la ecuación (4.21) y elemento finito funciones base cuadrática con las ecuaciones (4.26) y (4.29). SA es la abreviatura para solución analítica.

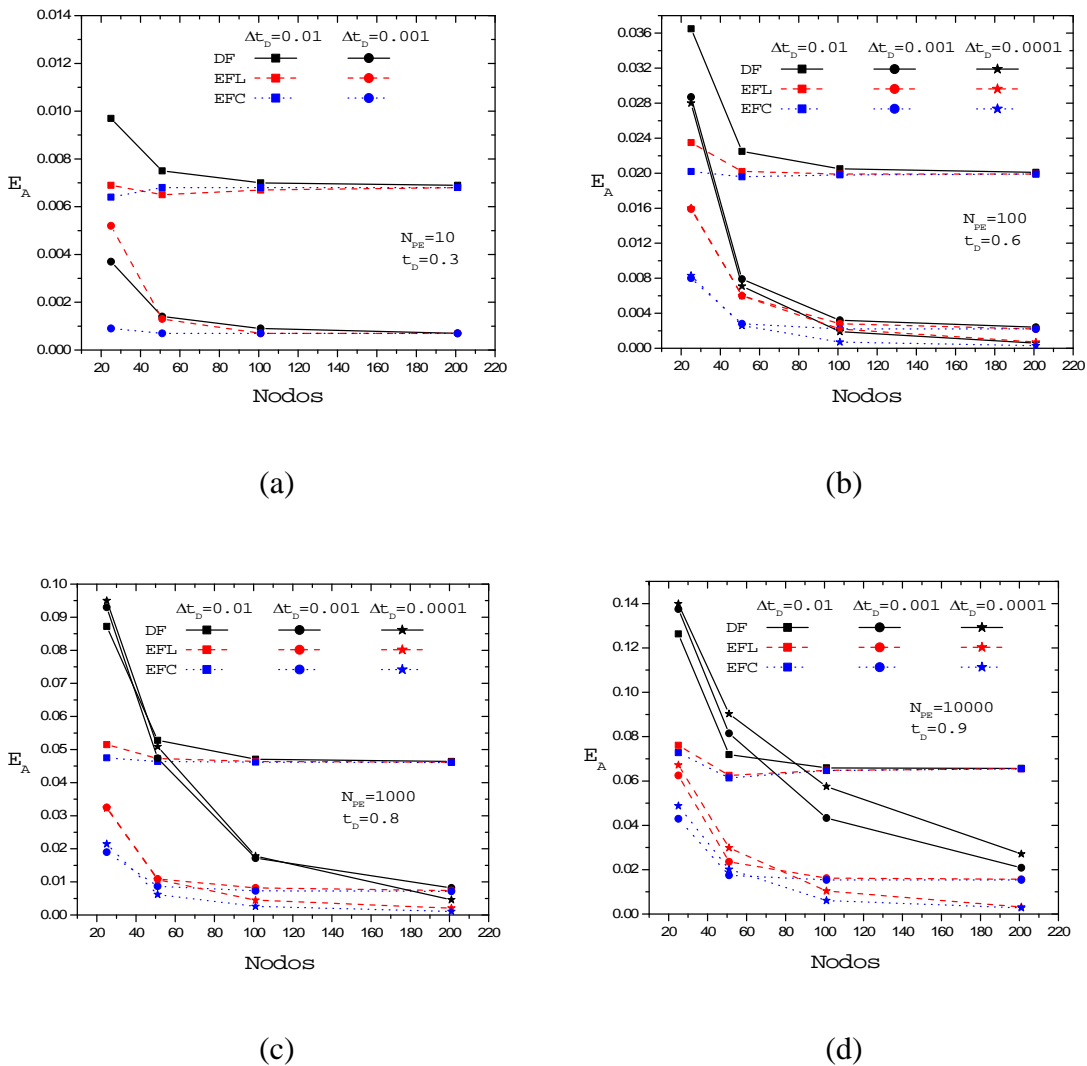


Figura 4.4: Comportamiento del error, E_A para varios números de Pelet, en función del número de nodos y tamaño del paso de tiempo, usados en la simulación con DF, EFL y EFC.

Empezando el análisis del error, por caso con $N_{PE} = 10$ y tomando el perfil de saturaciones en el tiempo adimensional de 0.3, en el cual las variaciones en la saturación están cerca del rompimiento. Entonces se observa en la figura 4.4a que para el caso de $\Delta t_D = 0.01$ los errores de DF disminuyen rápidamente cuando el número de nodos aumenta, hasta llegar a un error mínimo de 0.007 aproximadamente con 201 nodos. Por el contrario, los métodos de EF alcanzan dicho error mínimo desde los 25 nodos, permaneciendo casi constante el error durante el barrido por número de nodos. Refinando el tamaño del paso de tiempo a 0.001 se observa que los errores obtenidos se reducen y las diferencias entre DF y EFL se acortan desde el punto de vista del error por áreas; de hecho, con 25 nodos el error para DF es menor que el de EFL, pero por muy poco. Mientras que EFC es el método que de los tres se desempeña mejor, minimizando al error hasta 0.0007 aproximadamente y comportándose prácticamente constante durante el barrido por nodos.

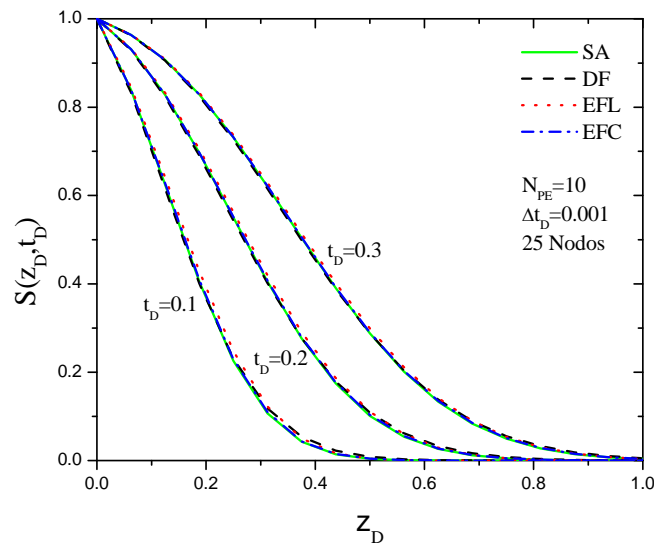


Figura 4.5: Perfil de saturaciones $s(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 10$ empleando 25 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.001$.

Con un error máximo de aproximadamente 0.005 en el perfil para $t_D = 0.3$, la figura 4.5 muestra tres perfiles de saturaciones que ilustran la evolución temporal del proceso

difusivo-convectivo cuando $N_{PE} = 10$, y en donde se emplean sólo 25 nodos y 0.001 como el tamaño del pasos de tiempo adimensional, obteniéndose así buenas aproximaciones por los tres modelos numéricos, como lo muestra la figura 4.5.

Continuando con el caso en el cual $N_{PE} = 100$ y eligiendo al perfil de saturaciones al tiempo adimensional de 0.6 para el análisis del error, entonces de la figura 4.4b podemos observar, considerando 25 nodos, que para todos los pasos de tiempo adimensional mostrados, los errores generados por las tres técnicas son diferentes, y que al aumentar el número de nodos, dichos errores disminuyen tendiendo a un valor mínimo, al cual los tres modelos convergen. Se observa que el método de DF es el que requiere más esfuerzo computacional para igualar los errores generados por los métodos de EF. Además, bajo las mismas condiciones, de los tres modelos, el EFC es el que genera el menor error cuando el número de nodos es menor que 101. Para 0.01 en el tamaño del paso de tiempo adimensional, el error mínimo con 201 nodos es de 0.02 aproximadamente, el cual es reducido hasta 0.002 y 0.0003 empleando pasos de tiempo adimensional de 0.001 y 0.0001 respectivamente. Siguiendo con la misma figura y considerando cualquier modelo de los tres, se puede ver que los beneficios en exactitud al refinar el tamaño del paso de tiempo adimensional de 0.001 a 0.0001 son pequeñas cuando el número de nodos usados esta por debajo de 51 nodos. Teniendo un error máximo de aproximadamente 0.003 en el perfil al tiempo adimensional de 0.6, la figura 4.6 muestra la evolución temporal del proceso difusivo-convectivo por medio de tres perfiles, los cuales fueron calculados con 101 nodos y 0.001 de tamaño en paso de tiempo y se observa que las curvas numéricas son prácticamente las mismas que la analítica.

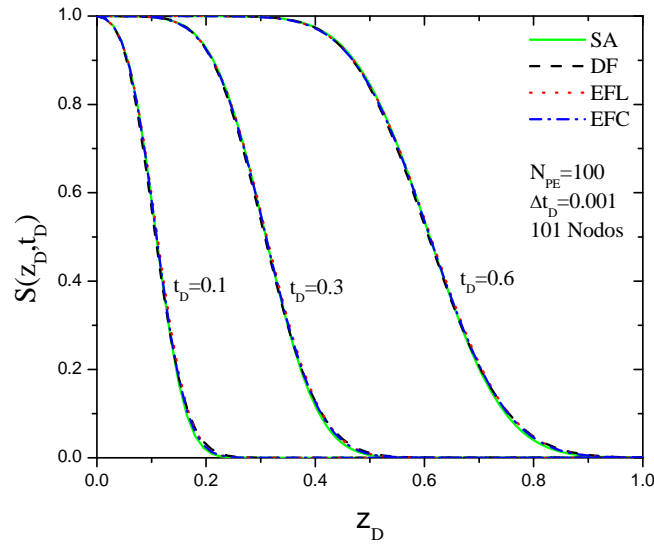


Figura 4.6: Perfil de saturaciones $s(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 100$ empleando 101 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.001$.

Para el caso de $N_{PE} = 1000$ y con el perfil de saturaciones al tiempo adimensional de 0.8 se observa de la figura 4.4c que todo lo mencionado para la figura 4.4b es válido también, sólo que los errores obtenidos son mayores en este caso, pero el comportamiento es el mismo. Empleando 201 nodos en la simulación y $\Delta t_D = 0.001$ se tiene que los tres modelos numéricos convergen a un error mínimo de aproximadamente 0.007 y para $\Delta t_D = 0.0001$, DF minimiza el error hasta aproximadamente 0.004, mientras que los métodos de EF lo minimizan hasta aproximadamente 0.001. Con estos dos últimos errores se generan los resultados por lo tres modelos numéricos que son mostrados en la figura 4.7 donde tres perfiles de saturaciones ilustran la evolución temporal del proceso difusivo-convectivo. Se puede observar que los resultados de DF requieren un mayor esfuerzo computacional para minimizar los errores en este proceso en el cual domina más la parte convectiva, de hecho se puede observar que este método genera oscilaciones o sobre cálculos en la vecindad del frente de desplazamiento, sugiriendo que es necesario emplear un mayor número de nodos en los cálculos.

Buscando un análisis numérico exhaustivo, haciendo $N_{PE} = 10000$ y considerando el perfil en el tiempo adimensional de 0.9, se puede ver de la figura 4.4d que el comportamiento descendente del error cuando el esfuerzo computacional aumenta es válido como en todos los casos mencionados. Lo interesante de este caso es que el método de DF minimiza el error hasta 0.02 aproximadamente cuando se usan 201 nodos y el tamaño del paso de tiempo es 0.0001, mientras que bajo las mismas condiciones los métodos de EF generan un error de aproximadamente 0.002. Corroborando la ineficiencia de DF para este caso, se muestra la figura 4.8, que presenta tres perfiles de saturaciones a diferentes tiempos y en la cual se puede ver que DF genera grandes oscilaciones en la vecindad del frente haciendo muy ineficiente los resultados de dicho método numérico. Por otro lado, los métodos de EF generan resultados satisfactorios, a pesar de que EFL muestra pequeñas oscilaciones en la vecindad del frente.

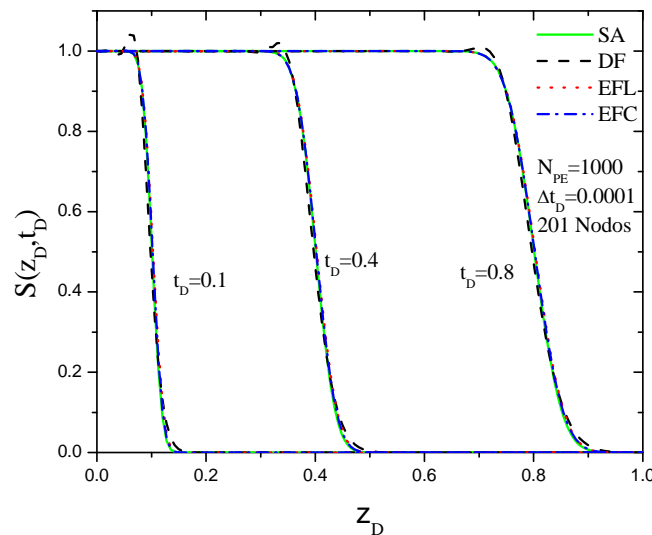


Figura 4.7: Perfil de saturaciones $s(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 1000$ empleando 201 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.0001$.

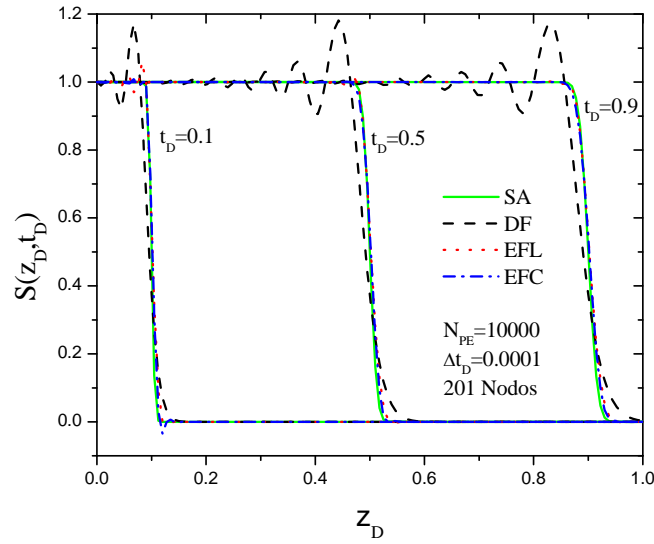
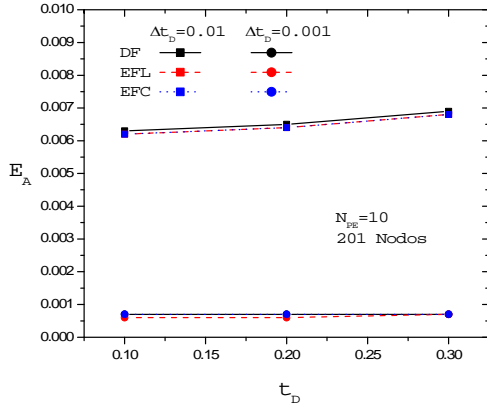
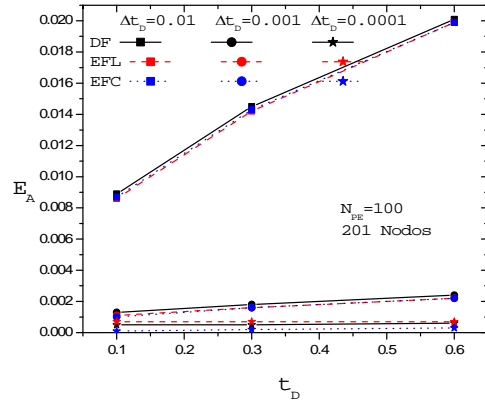


Figura 4.8: Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 10000$ empleando 201 nodos para la simulación y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.0001$.

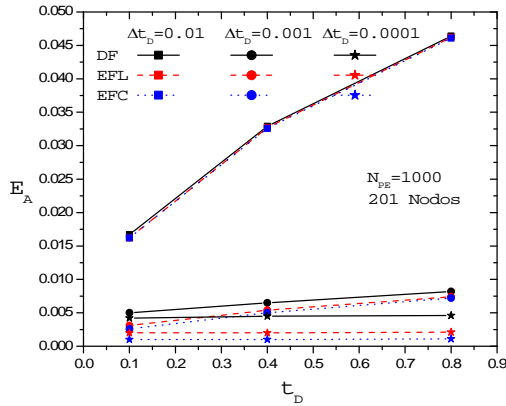
De las figuras 4.4 - 4.8 se puede mencionar que a medida que N_{PE} aumenta los esfuerzos computacionales debidos al número de nodos y tamaño del tiempo adimensional deben aumentar, para que los errores generados por las aproximaciones sean satisfactorios. DF es el método que requiere de mayor esfuerzo computacional para disminuir sus errores en la aproximación al orden de los generados por los métodos de EF. De los tres modelos numéricos, EFC es el modelo que genera los errores más pequeños cuando el número de nodos es menor o igual que 51. Además, EFC es el método que muestra la mejor aproximación cuando el proceso es dominado por la convección o cuando el frente de desplazamiento tiende a ser de tipo pistón.



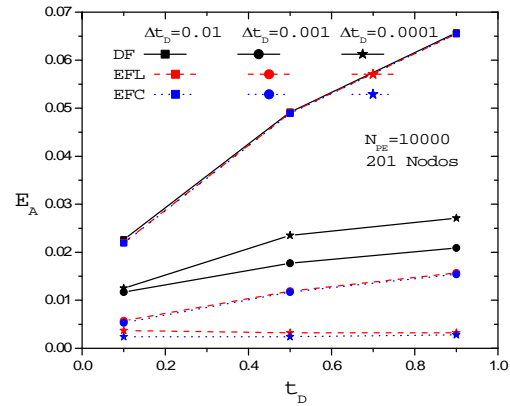
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.9: Evolución temporal del error, E_A para varios números de Peclet, con barridos en el tamaño del paso de tiempo, usados en las simulaciones con DF, EFL y EFC.

El error generado por las aproximaciones también depende del tiempo al que se considera el perfil de saturaciones, entonces en la figura 4.9 se muestra la evolución temporal de error por áreas y se observa que para todos los casos de N_{PE} los errores tienden a incrementarse a medida que el tiempo transcurre, sin embargo, la rapidez de incremento del error puede disminuirse hasta casi cero si el tamaño de los pasos de tiempo es reducido a cierto valor, produciendo un comportamiento temporal prácticamente constante del error. A medida que N_{PE} aumenta los errores generados aumentan y las diferencias en exactitud entre los métodos numéricos se hacen más visibles, principalmente con DF el cual genera errores más grandes en desplazamientos cercanos al tipo pistón. En la figura 4.9d se observa que

los errores generados por DF con 0.0001 de tamaño en el paso de tiempo son mayores que los correspondientes a 0.001, lo cual es anormal, pero la explicación a lo anterior es que debido al tipo de desplazamiento (casi pistón), al refinar el tamaño de paso de tiempo las oscilaciones o sobre cálculos aumentan en frecuencia y tamaño, por lo que los resultados mejorarían si el número de nodos es incrementado como lo sugiere la figura 4.4d.

Se prosigue a continuación con la comparación de los esquemas numéricos, pero ahora de una forma en la que se analiza la distribución del error en todo el dominio mediante un histograma de error calculado por:

$$E_i = |S_{i,n} - S(z_D, t_D)| \quad (4.32)$$

Donde E_i es el error absoluto que existe en el nodo i , definido como la diferencia absoluta entre el valor de la solución analítica y la numérica en el nodo i .

Para este análisis se toma al proceso difusivo-convectivo con $N_{PE} = 100$ como ejemplo, para observar la forma en la que los errores en los nodos son distribuidos por cada modelo numérico. De la figura 4.6 se toma que el tamaño del paso de tiempo que proporciona buenos resultados sin tanto esfuerzo computacional es 0.001. Entonces empezando por la figura 4.10a en la cual 25 nodos son usado para los cálculos, se observa que DF es el modelo que tiene menos errores mínimos seguido por EFL, resultando en que los cálculos de EFC son lo que proporcionan la mayor cantidad de errores mínimos. Lo mismo puede decirse para el caso en el que 51 nodos son usados (figura 4.10b) en la simulación, pero con la ventaja de que al aumentar el número de nodos los errores disminuyen, bajando el error máximo de todos los nodos, de 0.087 a 0.028 en el caso de DF, que es el método que muestra los mayores errores. Para el caso de 101 nodos, ver figura 4.10c, se observa que DF y EFL tienen distribuciones de errores parecidas, y además que el error máximo le pertenece a EFL, por lo que con 101 nodos los errores de DF y EFL tiene distribuciones comparables. Por último, aumentando a 201 nodos los errores se reducen como ya se ha mencionado, pero con respecto a la distribución de errores se observa de la figura 4.10d que los tres modelos tienden a igualar sus distribuciones. Lo importante de la figura 4.10 es que si se tiene un problema que requiere pocos nodos, entonces EFC es la técnica que funciona

mejor de las tres, también que al aumentar el número de nodos hace que las diferencias entre las distribuciones de los errores disminuyan.

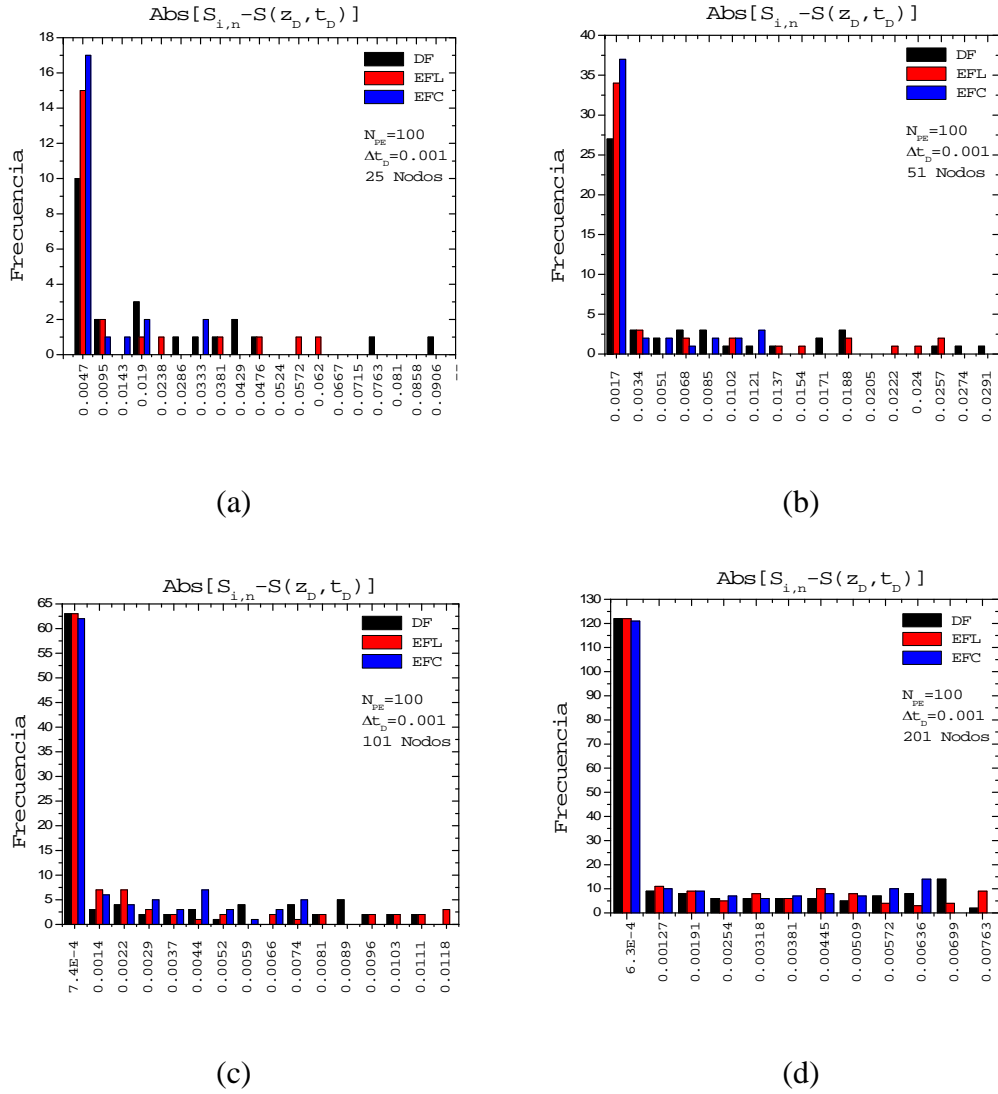


Figura 4.10: Histogramas del error $Abs[S_{i,n} - S(z_D, t_D)]$, para el caso de $N_{PE} = 100$, descrito para 25, 51, 101 y 201 nodos y $\Delta t_D = 0.001$.

4.4 Dispersión Numérica.

En la sección anterior se mostró que el valor tomado por N_{PE} en la ecuación de flujo es muy importante cuando se aplican técnicas de aproximación numéricas. Se observó que cuando N_{PE} disminuye, las fuerzas difusivas cobran importancia y viceversa, por lo que las

fuerzas convectivas dominan el proceso a medida que N_{PE} aumenta. También se concluyó que las soluciones numéricas tienen buena aproximación cuando el proceso de flujo es dominado por el término difusivo en la ecuación de flujo y por lo contrario, cuando el término convectivo domina en la ecuación de flujo, la zona de transición del frente de desplazamiento tiende a reducirse de modo que dicho frente tiende a pronunciarse influyendo en las aproximaciones numéricas de forma tal que se requiere de un mayor esfuerzo computacional para obtener aproximaciones satisfactorias. En las figuras 4.4 a 4.10 de la sección anterior, que muestran el comportamiento del error en la simulación cuando varía el número de nodos empleados y el tamaño de los pasos de tiempo adimensional, se observa que cuando Δt_D se fija y el número de nodos se incrementa, los errores en la simulación disminuyen hasta cierto límite mostrando la presencia de una *dispersión numérica* [35, 36] dependiente de Δt_D .

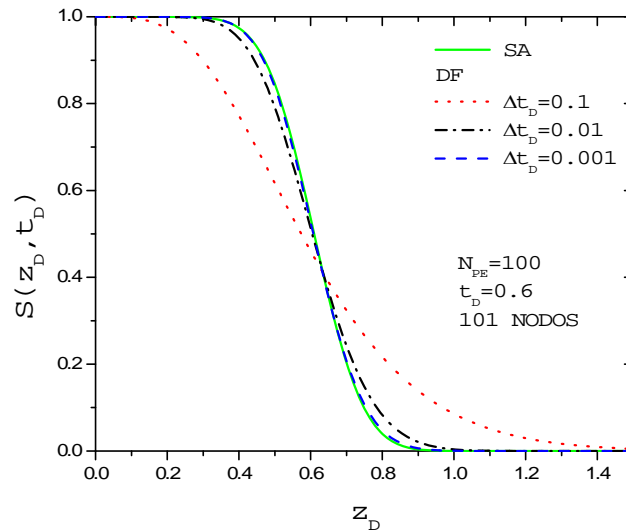


Figura 4.11: Presencia de dispersión numérica en perfiles de saturación $S(z_D, t_D)$ para

$N_{PE} = 100$ y $t_D = 0.6$ empleando 101 nodos para la simulación.

En la figura 4.11 se muestra la presencia de la dispersión numérica para el caso en el cual $N_{PE} = 100$, $t_D = 0.6$ y empleando 101 nodos en la aproximación numérica por el método de diferencias finitas, el comportamiento del error para este caso es ilustrado en la figura

4.4b. De dicho par de figuras se observa que para un paso de tiempo adimensional fijo existe un límite inferior para el error en la simulación a medida que el número de nodos aumenta. Por lo que en la presente sección se confirma matemáticamente la existencia de la dispersión numérica, por medio de una expresión analítica derivada con la ayuda de la definición del error de truncamiento y de la formulación en diferencias finitas. La ecuación matemática de la dispersión numérica es usada para eliminar a la dispersión numérica del problema de difusión-convección.

Recordando que el error de truncamiento en DF proviene de reemplazar la ecuación diferencial por una aproximación en diferencias finitas, esta aproximación introduce un error numérico que puede ser estudiado por la expansión en series de Taylor de los términos en la ecuación en diferencias finitas.

El error local de truncamiento proporciona el orden de la aproximación del método. Para el caso de diferencias finitas se define al error local de truncamiento de la siguiente manera [35]

$$\varepsilon_L = L_D(S_{i,n}) - (LS)_{z_{Di}, t_{Dn}} \quad (4.33)$$

donde ε_L = error local de truncamiento, $L_D S$ = operador aplicado a la ecuación diferencial, y LS = operador aplicado a la ecuación en diferencias.

Para analizar el error de truncamiento considere la ecuación de convección (4.34) que es una forma simplificada de la ecuación de difusión-convección. Cabe mencionar que el hecho de eliminar al término difusivo no afecta en la derivación de la expresión analítica de la dispersión numérica, ya que para el caso de diferencias centrales en espacio y regresivas en tiempo, el término transitorio es el que introduce la dispersión numérica, como se verá más adelante.

$$-\frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (4.34)$$

Introduciendo la ecuación (4.34) en la (4.33) del error local de truncamiento.

$$\varepsilon_L = \left\{ -\frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{\partial S}{\partial t_D} \right\}_i^{n+1} - \left\{ -\frac{S^{n+1} - S_{i-1}^{n+1}}{2\Delta z_D} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right\} \quad (4.35)$$

Recordando de la expansión en series de Taylor, las siguientes relaciones para las aproximaciones en diferencias centrales en espacio y regresivas en tiempo.

$$\frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i-1}^{n+1}}{2\Delta z_D} = \frac{\partial S_{(i,n+1)}}{\partial z_D} + \frac{(\Delta z_D)^2}{3!} \frac{\partial^3 S_{(i,n+1)}}{\partial z_D^3} + \dots = \frac{\partial S_{(i,n+1)}}{\partial z_D} + O([\Delta z_D]^2) \quad (4.36)$$

$$\frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = \left\{ \frac{\partial S}{\partial t_D} - \frac{\Delta t_D}{2!} \frac{\partial^2 S}{\partial t_D^2} + \frac{(\Delta t_D)^2}{3!} \frac{\partial^3 S}{\partial t_D^3} \right\}_i^{n+1} + \dots = \left\{ \frac{\partial S}{\partial t_D} - \frac{\Delta t_D}{2!} \frac{\partial^2 S}{\partial t_D^2} \right\}_i^{n+1} + O([\Delta t_D]^2) \quad (4.37)$$

Sustituyendo las últimas dos ecuaciones en la ecuación (4.35)

$$\varepsilon_L = -\frac{\Delta t_D}{2!} \frac{\partial^2 S}{\partial t_D^2} \Big|_i^{n+1} + O([\Delta z_D]^2) + O([\Delta t_D]^2) \quad (4.38)$$

De la ecuación (4.34), se puede deducir que

$$\frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} \Big|_i^{n+1} = \frac{\partial^2 S}{\partial t_D^2} \Big|_i^{n+1} \quad (4.39)$$

Sustituyendo la ecuación (4.39) en la ecuación (4.38) se tiene que:

$$\varepsilon_L = -\frac{\Delta t_D}{2!} \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} \Big|_i^{n+1} + O([\Delta z_D]^2) + O([\Delta t_D]^2). \quad (4.40)$$

La ecuación anterior muestra que el error de truncamiento contiene un término semejante al término difusivo. Y sustituyendo lo anterior en la ecuación (4.35) se llega a.

$$-\left\{ \frac{\Delta t_D}{2!} \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} - \frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{\partial S}{\partial t_D} \right\}_i^{n+1} + O([\Delta z_D]^2) + O([\Delta t_D]^2) = \left\{ \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i-1}^{n+1}}{2\Delta z_D} + \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right\} \quad (4.41)$$

De la ecuación (4.41), se observa que cuando se aproxima la ecuación de convección, en diferencias centrales es espacio y regresivas en tiempo, en realidad se está resolviendo una ecuación de difusión-convección con el término difusivo representado por la *dispersión numérica*. Ahora, si se desea resolver la ecuación (4.1) por la técnica numérica de diferencias finitas, centrales en espacio y esquema implícito, se debe restar la dispersión numérica introducida de manera natural por el esquema numérico mencionado, entonces al término difusivo de la ecuación de difusión-convección se le resta el término de dispersión numérica que muestra la ecuación (4.41), por lo que la ecuación que en realidad se debe aproximar cuando se emplea diferencias finitas centrales en espacio y regresivas en tiempo es la siguiente:

$$\left[\frac{1}{N_{Pe}} - \frac{\Delta t_D}{2} \right] \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} - \frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (4.42)$$

$$\Delta t_D < 2 / N_{Pe} \quad (4.43)$$

Al emplear este método para eliminar la dispersión numérica, la ecuación anterior establece un criterio para reducir la dispersión numérica, y por consiguiente un valor máximo de Δt_D . Cabe mencionar también que, el esquema de diferencias centrales en espacio y tiempo (CN) hace cero a las dispersión numérica [34,35], pero existen errores numéricos de segundo orden.

Para mostrar la aplicación de este método en la eliminación de la dispersión numérica, de la ecuación (4.42) se puede definir un número de Peclet total que es usado en la en la solución numérica.

$$N_{PeT} = \frac{2N_{Pe}}{2 - \Delta t_D N_{Pe}} \quad (4.44)$$

Para eliminar la dispersión numérica en el problema de la figura 4.11 se aplica el criterio de la ecuación (4.43), por lo que se debe cumplir que $\Delta t_D < 2/100 = 0.02$, y entonces se fija lo siguiente $\Delta t_D = 0.01$. Por consecuencia, de la ecuación (4.44) se tiene que $N_{PeT} = 200$.

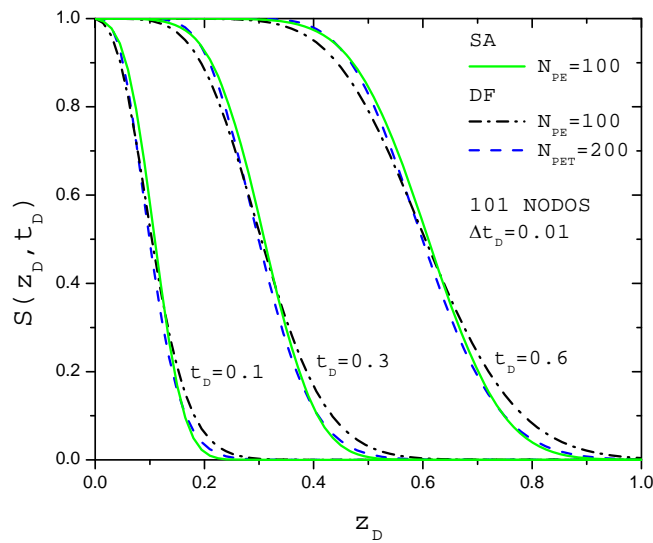


Figura 4.12: Eliminación de la dispersión numérica en perfiles de saturación $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 100$ empleando 101 nodos para la simulación.

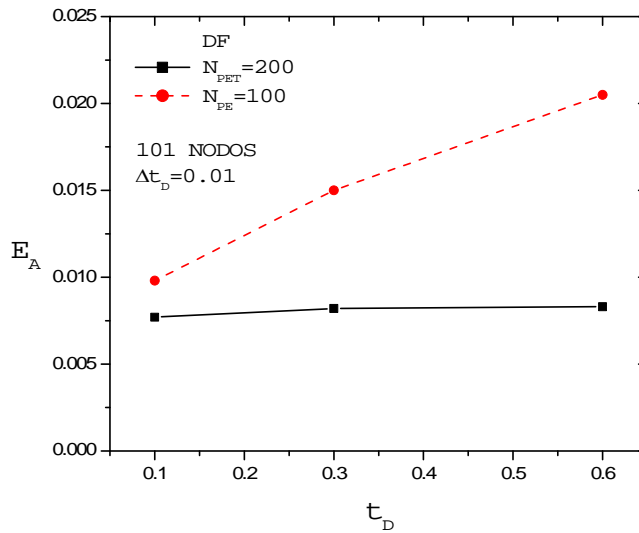


Figura 4.13: Gráfica del error máximo obtenido a medida que el tiempo transcurre en simulaciones para aproximaciones en DF con $N_{PE} = 100$ y $N_{PET} = 200$.

La figura 4.12 muestra la evolución en el tiempo de un proceso difusivo-convectivo cuando $N_{PE} = 100$. Los perfiles de saturación obtenidos de la solución analítica del problema de difusión-convección son comparados con las soluciones numéricas obtenidas por el método de diferencias finitas para $N_{PE} = 100$ y se observa que por el esquema en diferencias finitas empleado las soluciones numéricas manifiestan la presencia de una dispersión numérica que se adhiere a la dispersión física como se mostró en el desarrollo matemático precedente a esta figura. Para eliminar dicha dispersión numérica que naturalmente es introducida por el esquema numérico se hace uso de la ecuación (4.44) que define un número de Peclet total, $N_{PET} = 200$, el cual toma en cuenta la dispersión numérica. Por lo que numéricamente se debe resolver el problema para N_{PET} en vez de N_{PE} que es lo que se quiere resolver en realidad. Las figuras 4.12 y 4.13 muestran que en general las soluciones numéricas obtenidas cuando la dispersión numérica es eliminada por el uso de N_{PET} son más aproximadas que en el caso contrario, N_{PE} , aunque la solución analítica sea para N_{PE} . También se observa de estas figuras que si la dispersión numérica es eliminada, las soluciones numéricas seguirán teniendo errores de truncamiento de segundo orden en espacio y tiempo como muestra la ecuación (4.41).

Capítulo 5

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN NO-LINEAL DE TIPO DIFUSIVO-CONVECTIVO

Introducción.

En el capítulo anterior se analizaron los métodos de diferencias finitas y elemento finito para la solución numérica de la ecuación diferencial lineal parcial de difusión-convección, ahora en este capítulo se extiende la aplicación de esos métodos para la solución de la ecuación diferencial parcial, no-lineal de tipo difusivo-convectivo que describe el proceso de desplazamiento de dos fluidos inmiscibles y homogéneos, fluyendo en un medio poroso homogéneo e isotrópico, en una dimensión. La ecuación diferencial parcial tiene la siguiente forma, y cuenta con las siguientes condiciones inicial y de fronteras tipo Dirichlet.

$$\frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_c(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} + C(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (5.1)$$

$$S(z_D, t_D = 0) = 0 \quad (5.2a)$$

$$S(z_D = 0, t_D) = 1 \quad (5.2b)$$

$$\begin{aligned} \text{Lím}_{z_{DR} \rightarrow \infty} [S(z_D = z_{DR}, t_D)] &= 0 \\ 0 < z_D < \infty \end{aligned} \quad (5.2c)$$

En la simulación numérica del flujo multifásico en yacimientos, es común encontrar modelos de flujo no-lineales debido a la presencia de las permeabilidades relativas de las fases en el yacimiento. Por lo que en esta sección se abordan métodos para evaluar los coeficientes no-lineales de la ecuación diferencial y se aplica el método general de Newton-Raphson para linealizar el sistema de ecuaciones.

5.1 Manejo de los coeficientes no-lineales

Las ecuaciones de flujo en medios porosos contienen, en lo general, contienen coeficientes no-lineales que dependen de la presión o de la saturación de las fases. Las funciones no-lineales pueden dividirse en dos grupos: fuertes y débiles [³⁷] con respecto a su grado de no-linealidad.

Las funciones débilmente no-lineales son las funciones que dependen de las presiones del fluido; principalmente las propiedades PVT. El efecto de estas no-linealidades depende de la magnitud del cambio de la presión en los pasos de tiempo.

Las funciones fuertemente no-lineales son las que dependen de la saturación de las fases, como es el caso de las permeabilidades relativas o de la presión capilar. La no-linealidad causada por la presión capilar se elimina en el caso particular en que la presión capilar depende linealmente de la saturación de la fase. Lo anteriormente mencionado para la presión capilar no se aplica a las permeabilidades relativas, entonces, considerando una dependencia lineal de la presión capilar con la saturación, lo que ocasiona la no-linealidad de los coeficientes de la ecuación de flujo son las permeabilidades relativas de las fases fluyentes.

Empleando el esquema de diferencias finitas, se requiere evaluar la función no-lineal en las fronteras de las celdas tomando de base la información de los nodos adyacentes de la frontera. Si la función es débilmente no-lineal se puede emplear un promedio aritmético que involucre la información de los nodos adyacentes a la frontera de la celda o pesar la información de los nodos adyacentes por el criterio de corriente arriba. En las funciones débilmente no-lineales no es crítico el modo de evaluar la no-linealidad. Por el contrario, en las funciones fuertemente no-lineales sí es crítica la forma de evaluar la función en las fronteras de la celda de modo que se obtenga un resultado físicamente posible. La forma de evaluar estas funciones es empleando el criterio de corriente arriba, ya que emplear promedios aritméticos proporciona soluciones físicamente no válidas a pesar de que matemáticamente sean correctas [^{33,37}].

A continuación se describen los métodos mencionados arriba para la evaluación de las funciones no-lineales en las fronteras de las celdas.

El criterio de evaluación corriente arriba considera la función no-lineal en el nodo de donde proviene el flujo, es decir si f es la función no-lineal, matemáticamente se representa de la siguiente manera.

$$f_{i+1/2} = f_i, \quad \text{si el flujo va de } i \text{ a } i+1. \quad (5.3)$$

ó

$$f_{i+1/2} = f_{i+1}, \quad \text{si el flujo va de } i+1 \text{ a } i. \quad (5.4)$$

Como se mencionó en párrafos anteriores, esto es válido para funciones que dependen de presión (funciones débilmente no-lineales) o de saturación (funciones fuertemente no-lineales).

El método del promedio entre la información de los nodos adyacentes a la frontera de la celda, puede ser de dos formas.

$$f_{i+1/2} = \frac{1}{2} [f_i + f_{i+1}] \quad (5.5)$$

ó

$$f_{i+1/2}(p_i, p_{i+1}) = f\left(\frac{p_i + p_{i+1}}{2}\right) \quad (5.6)$$

Desde luego hay otras formas de evaluar las funciones fuertemente no-lineales, pero requieren de la información de más nodos, lo que aumentaría el ancho de banda del jacobiano. Para fines de este trabajo los métodos descritos aquí son suficientes, aunque en

realidad el método que se emplea es el criterio de evaluación corriente arriba, debido a que los coeficientes no-lineales son función de la saturación del agua.

La discusión anterior es aplicable al método de diferencias finitas, debido a que este método es el que comúnmente se usa en la simulación numérica de yacimientos, y por consiguiente ha sido ampliamente estudiado y adaptado a los problemas de flujo multifásico. El método estándar de diferencias finitas trata las no-linealidades de la ecuación basándose en el promedio aritmético de los valores en los nodos adyacentes a la frontera. Cuando el método estándar de diferencias finitas se aplica a los problemas de flujo multifásico las soluciones que se obtienen son físicamente imposibles a pesar de que matemáticamente sean correctas, y para vencer este inconveniente se modifica el método estándar de diferencias finitas con la aplicación de criterio de corriente arriba. Algunos autores [32], establecen que es suficiente aplicar el criterio de corriente arriba sobre el término convectivo de la ecuación en diferencias, es decir, considérese al término convectivo de la ecuación (5.1) y a su aproximación en diferencias finitas, entonces la aproximación es de la siguiente manera cuando se emplean los nodos $i+1$ e $i-1$ y el flujo va de $i-1$ a i :

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z_D} \right|_i \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z_D} \approx \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta z_D} \quad (5.7)$$

Pero cuando se emplean los nodos $i+1/2$ e $i-1/2$.

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z_D} \right|_i \approx \frac{C_{i+1/2} - C_{i-1/2}}{\Delta z_D} \approx \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta z_D} \quad (5.8)$$

Análogamente se puede aplicar al caso de la aproximación en elemento finito [32]. Se modifica el método estándar para soluciones con un frente de desplazamiento convectivo, aproximando al término convectivo por el criterio de corriente arriba análogo al de la ecuación (5.13). Por lo que con esta modificación, el método de elemento finito funciona para la simulación del modelo no-lineal de desplazamiento convectivo. Como se mostrará más adelante.

Empleando un parámetro de peso, ω ($0 \leq \omega \leq 1$) que evalúe la proveniencia del flujo, de modo que se maneje un modelo general para el criterio de corriente arriba.

$$C_{i+1/2} = (\omega)C_i + (1 - \omega)C_{i+1} \quad (5.9)$$

Análogamente para la otra frontera de la celda:

$$C_{i-1/2} = (\omega)C_{i-1} + (1 - \omega)C_i \quad (5.10)$$

Combinando las ecuaciones (5.9) y (5.10) con la (5.8) se tiene.

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z_D} \right|_i \approx \frac{(1 - \omega)C_{i+1} + (2\omega - 1)C_i - \omega C_{i-1}}{\Delta z_D} \quad (5.11)$$

El factor de peso determina la forma de la aproximación en diferencias finitas, esta es: estándar si $\omega = 0.5$, o con el criterio de corriente arriba si $\omega = 1$.

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z_D} \right|_i \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z_D} \approx \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta z_D}, \quad \text{corriente arriba, } \alpha = 1 \quad (5.12)$$

La importancia de escribir la aproximación en diferencias finitas con el factor de peso ω es que se representan tres alternativas de evaluación de forma general; corriente arriba, forma estándar y corriente abajo; este último es cuando el flujo proviene de $i+1$ a i .

El parámetro de peso ω caracteriza las siguientes opciones para la evaluación de las funciones no-lineales, donde se considera que el flujo va de i a $i+1$:

Pesado en corriente arriba: $\omega = 1$

Pesado en promedio aritmético: $\omega = 0.5$

Pesado en corriente abajo: $\omega = 0$

Para considerar el caso en el que flujo va de i a $i-1$, se modifica la anterior de la siguiente manera:

Pesado en corriente arriba: $\omega = 0$
 Pesado en promedio aritmético: $\omega = 0.5$
 Pesado en corriente abajo: $\omega = 1$

5.2 Método de iteración Newtoniana o Totalmente Implícito

En el capítulo anterior se vio que las técnicas numéricas, empleadas para encontrar soluciones numéricas que se aproximan a la solución real de una ecuación diferencial lineal parcial, generan sistemas de ecuaciones lineales cuya solución proporciona los valores aproximados de la función desconocida en cada nodo para un nivel dado de tiempo. Cuando los mismos métodos numéricos son empleados en una ecuación diferencial no-lineal parcial, se generan sistemas de ecuaciones no-lineales, que para resolverlos se requiere de un método que transforme el sistema no-lineal a uno lineal y después resolver el sistema linealizado como en el capítulo anterior.

En esta sección se describe al método totalmente implícito conocido también como método de Newton-Raphson o iteración Newtoniana. Es un método iterativo muy poderoso que trabaja bien en problemas con grado de no-linealidad fuerte, debido a que es incondicionalmente estable [37]. En este método los términos de flujo en el nivel de tiempo $n+1$ son aproximados iterativamente por su valor en el nivel de iteración v , el cual es aproximado por su valor en la iteración $v-1$. Para detallar el método considérese el siguiente sistema de ecuaciones no lineales, el cual está escrito en forma vectorial de residuos, R .

$$R(S^{n+1}) \equiv R^{n+1} = 0 \quad (5.13)$$

El sistema de ecuaciones descrito se puede resolver por el método de Newton y es definido de la siguiente forma [33].

$$S^{(v+1)} - S^{(v)} = -[J^{(v)}]^{-1} R^{(v)} \quad (v=0,1,2,..) \quad (5.14)$$

Donde \mathbf{J} es el jacobiano o matriz jacobiana de la función vectorial \mathbf{R} :

$$\mathbf{J}^{(v)} = \left(\frac{\partial R_i}{\partial S_j} \right)^{(v)}, \quad (5.15)$$

La matriz jacobiana es la extensión de la derivada en el método clásico de Newton para una sola ecuación e i es un contador de ecuaciones y j es contador de incógnitas. Para fines de cómputo la ecuación (5.15) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\mathbf{J}^{(v)} \delta \mathbf{S}^{v+1} = -\mathbf{R}^{(v)}, \quad (5.16)$$

y
$$\mathbf{S}^{(v+1)} = \mathbf{S}^{(v)} + \delta \mathbf{S}^{(v+1)}, \text{ para } v=0,1,2,\dots \quad (5.17)$$

con
$$\mathbf{S}^{(0)} = \mathbf{S}^n. \quad (5.18)$$

En la medida que las iteraciones del método proceden los vectores $\delta \mathbf{S}$ y \mathbf{R} tienden a cero para que el método converja. Un método alternativo para demostrar las ecuaciones del método de Newton es la expansión en series de Taylor alrededor del nivel de iteración v y tomando sólo el primer término de la expansión para el elemento i del vector de residuos \mathbf{R} .

$$R_i^{v+1} \approx R_i^v + \sum_j \left(\frac{\partial R_i}{\partial S_j} \right)^v \delta S_j^{v+1} = 0 \quad (5.19a)$$

ó

$$\sum_j \left(\frac{\partial R_i}{\partial S_j} \right)^v \delta S_j^{v+1} = -R_i^v. \quad (5.19b)$$

Donde j contador de incógnitas para la ecuación i y se observa la semejanza entre la ecuación (5.19b) y (5.16).

5.3 Aproximación del Modelo de flujo no-lineal

En el capítulo anterior se estudiaron los conceptos básicos para emplear los métodos numéricos de diferencias finitas y elemento finito para simular numéricamente el proceso difusivo-convectivo en un medio semi-infinito. En esta sección se emplea las mismas técnicas pero con un modelo de flujo más real y por consiguiente el grado de dificultad del proceso de simulación es más complicado, como se mencionó en las secciones anteriores. En los apéndices G, H e I se detallan los desarrollos de los modelos numéricos para la simulación con las técnicas de diferencias finitas y elemento finito de Galerkin con función base lineal y cuadrática. Los sistemas lineales de ecuaciones son resueltos por los algoritmos de Thomas y Crout [38].

5.3.1 Diferencias Finitas

Como ya se ha visto este método es el más sencillo de entender y de aplicar, entonces aplicando diferencias centrales en espacio y regresivas en tiempo sobre la ecuación (5.1) se tiene que:

$$\left\{ \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} [D_{C_{i+1/2}} (S_{i+1} - S_i) - D_{C_{i-1/2}} (S_i - S_{i-1})] + \frac{(C_{i+1/2} - C_{i-1/2})}{\Delta z_D} \right\}^{n+1} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0$$

$$(i=1,2,3,\dots, I; n=0,1,2,\dots) \quad (5.20)$$

Donde N_{PE} es un número importante para determinar el comportamiento de la solución al modelo de flujo, es decir, si el comportamiento es el correspondiente al de una ecuación no-lineal parabólica o hiperbólica. En las soluciones a ecuaciones hiperbólicas domina el término convectivo, entonces se debe emplear el criterio de corriente arriba en vez de un promedio aritmético entre los nodos vecinos como se emplea en el método clásico. En la simulación numérica de yacimientos, al término difusivo también se le aplica el criterio de corriente arriba [33,35], pero en este capítulo se investiga la importancia de aplicar dicho criterio al término difusivo ya que el criterio de corriente arriba fue introducido para el flujo convectivo. Aplicando el modelo del criterio de corriente arriba en la ecuación (5.21).

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \{ [\alpha D_{C_i} + (1-\alpha) D_{C_{i+1}}] S_{i+1} - [(1-\alpha) D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] S_i \\
& + [\alpha D_{C_{i-1}} + (1-\alpha) D_{C_i}] S_{i-1} \}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z_D} \{ (1-\omega) C_{i+1} + (2\omega-1) C_i - \omega C_{i-1} \}^{n+1} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \\
& \qquad \qquad \qquad (i=1,2,3,\dots, I; n=0,1,2,\dots) \qquad \qquad \qquad (5.21)
\end{aligned}$$

Donde α es el factor de peso entre los valores de la función no-lineal D_C para los nodos vecinos y ω tiene la misma aplicación que el factor de peso anterior, pero aplicado sobre la función C .

Una forma sencilla de validar algebraicamente a la ecuación (5.21) es llegando a la ecuación (4.6) cuando los coeficientes son: $D_C = 1$ y $C = -S$; y estableciendo los siguientes parámetros $\alpha = \omega = 0.5$.

Como el sistema de ecuaciones generado por la ecuación (5.21) es no-lineal, entonces se requiere aplicar el método Newton-Raphson para linealizar el sistema de ecuaciones y así obtener las siguientes ecuaciones:

Elemento i de vector de residuos \mathbf{R} .

$$\begin{aligned}
R_i^{v-1}(S_{i-1}, S_i, S_{i+1}) &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \{ [\alpha D_{C_i} + (1-\alpha) D_{C_{i+1}}] S_{i+1} - [(1-\alpha) D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] S_i \\
& + [\alpha D_{C_{i-1}} + (1-\alpha) D_{C_i}] S_{i-1} \}^{v-1} + \frac{1}{\Delta z_D} \{ (1-\omega) C_{i+1} + (2\omega-1) C_i - \omega C_{i-1} \}^{v-1} - \frac{S_i^{v-1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \\
& \qquad \qquad \qquad (5.22)
\end{aligned}$$

Coefficientes distintos de cero en una fila fija de la matriz Jacobiana \mathbf{J} .

$$\frac{\partial R_i^{v-1}}{\partial S_{i+1}} = \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ [(1-\alpha) D_{C_{i+1}} + \alpha D_{C_i}] + (1-\alpha) \frac{\partial D_{C_{i+1}}}{\partial S_{i+1}} [S_{i+1} - S_i] \right\}^{v-1} + \frac{(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+1}^{v-1}}{\partial S_{i+1}} \qquad (5.23)$$

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_i} = \frac{1}{N_{Pe} \Delta z_D^2} \left\{ \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} [\alpha S_{i+1} - S_i + (1-\alpha) S_{i-1}] - [(1-\alpha) D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] \right\}^{v-1} \quad (5.24)$$

$$+ \frac{(2\omega-1) \partial C_i^{v-1}}{\Delta z_D \partial S_i} - \frac{1}{\Delta t_D}$$

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i-1}} = \frac{1}{N_{Pe} \Delta z_D^2} \left\{ [(1-\alpha) D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] + \alpha \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} [S_{i-1} - S_i] \right\}^{v-1} - \frac{\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}^{v-1}}{\partial S_{i-1}} \quad (5.25)$$

Donde $v=1,2,\dots$, es el contador del nivel de iteración de método de Newton y el contador $i=2,3,4,\dots,I-1$, debido al tipo de condición de frontera, por lo que se genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas y se resuelve empleando el algoritmo de Thomas.

5.3.2 Elemento Finito de Galerkin función base lineal

Como en el capítulo anterior, primero se establece al operador diferencial que actúa en la ecuación (5.1).

$$L[S] = \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z} + C(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (5.26)$$

Introduciendo al operador en la ecuación (4.11) se establece una ecuación integral, que al integrarla por partes se reduce el orden de la derivada más alta en dicha ecuación, y al considerar condiciones de frontera de tipo Dirichlet se llega a la ecuación integral diferencial que se desea resolver.

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (5.27)$$

Insertando la función aproximada (4.8) en la ecuación anterior se tiene que:

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left[-\frac{1}{N_{PE}} S_j \left\langle \hat{D}_C \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \left\langle \hat{C}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (5.28)$$

Para resolver las integrales de la ecuación anterior se requiere el conocimiento de las funciones no-lineales, por lo que se puede emplear una ecuación análoga a la (4.8) para aproximar el valor de estas funciones de la siguiente manera.

$$\hat{D}_C(z_D, t_D) = \sum_{k=1}^I D_{Ck}(t_D) \varphi_k(z_D) \quad (5.29a)$$

$$\hat{C}(z_D, t_D) = \sum_{k=1}^I C_k(t_D) \varphi_k(z_D) \quad (5.29b)$$

Introduciendo las aproximaciones anteriores en la ecuación (5.28) se tiene que:

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j^{n+1} \sum_{k=i-1}^{i+1} \left\{ D_{Ck}^{n+1} \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \sum_{k=i-1}^{i+1} C_k^{n+1} \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (5.30)$$

$$(i=2,3,\dots, I-1)$$

Considerando funciones bases lineales y resolviendo las integrales se llega al siguiente sistema de ecuaciones, en donde la discretización temporal es en diferencias finitas con un esquema implícito.

$$\frac{1}{N_{Pe} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{Ci+1} + D_{Ci}}{2} \right] S_{i+1} - \left[\frac{D_{Ci+1} + 2D_{Ci} + D_{Ci-1}}{2} \right] S_i + \left[\frac{D_{Ci} + D_{Ci-1}}{2} \right] S_{i-1} \right\}^{n+1} + \left\{ \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2 \Delta z_D} \right\}^{n+1} - \frac{1}{6 \Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0 \quad (5.31)$$

Como en el caso de diferencias finitas el término convectivo requiere del uso del criterio de corriente arriba, por lo que la ecuación anterior se reescribe como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_{pe}\Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{C_{i+1}} + D_{C_i}}{2} \right] S_{i+1} - \left[\frac{D_{C_{i+1}} + 2D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_i + \left[\frac{D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_{i-1} \right\}^{n+1} \\ & + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1} \right\}^{n+1} - \frac{1}{6\Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0 \\ & \hspace{15em} (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (5.32) \end{aligned}$$

Una forma sencilla de validar algebraicamente la ecuación (5.32) es obteniendo la ecuación (4.21) cuando los coeficientes son: $D_C = 1$ y $C = -S$; y estableciendo $\omega = 0.5$.

En el capítulo anterior se comentó que la discretización espacial de los métodos de diferencias finitas y elemento finito de Galerkin con función base lineal son la misma. Así analizando la discretización espacial en diferencias finitas del modelo no-lineal de flujo (5.21) y fijando $\alpha = 0.5$, es decir, sin el criterio de corriente arriba en el término difusivo se tiene que ambas ecuaciones (5.21) y (5.32) tiene la misma discretización espacial. Así empleado la igualdad en discretización espacial entre diferencias finitas y elemento finito de Galerkin con función base lineal, la ecuación (5.32) con el criterio de corriente arriba también en el término difusivo se escribe como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_{PE}\Delta z_D^2} \left\{ [\alpha D_{C_i} + (1-\alpha)D_{C_{i+1}}] S_{i+1} - [(1-\alpha)D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] S_i \right. \\ & \left. + [\alpha D_{C_{i-1}} + (1-\alpha)D_{C_i}] S_{i-1} \right\}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1} \right\}^{n+1} \\ & - \frac{1}{6\Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0 \\ & \hspace{15em} (i=1,2,3,\dots, I) \end{aligned} \quad (5.33)$$

Empleando el método de Newton-Raphson para linealizar el sistema de ecuaciones se llega al conjunto de ecuaciones siguiente:

Elemento i de vector de residuos \mathbf{R} .

$$\begin{aligned}
R_i^{v-1}(S_{i-1}, S_i, S_{i+1}) = & \left\{ [\alpha D_{C_i} + (1-\alpha)D_{C_{i+1}}] S_{i+1} - [(1-\alpha)D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] S_i \right. \\
& + \left. [\alpha D_{C_{i-1}} + (1-\alpha)D_{C_i}] S_{i-1} \right\}^{v-1} \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1} \right\}^{v-1} \quad (5.34) \\
& - \frac{1}{6\Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0
\end{aligned}$$

Coeficientes distintos de cero en una fila fija del Jacobiano J .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i+1}} = & \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ [(1-\alpha)D_{C_{i+1}} + \alpha D_{C_i}] + (1-\alpha) \frac{\partial D_{C_{i+1}}}{\partial S_{i+1}} [S_{i+1} - S_i] \right\}^{v-1} \quad (5.35) \\
& + \frac{(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+1}^{v-1}}{\partial S_{i+1}} - \frac{1}{6\Delta t_D}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_i} = & \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} [\alpha S_{i+1} - S_i + (1-\alpha)S_{i-1}] - [(1-\alpha)D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] \right\}^{v-1} \quad (5.36) \\
& + \frac{(2\omega-1)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_i^{v-1}}{\partial S_i} - \frac{4}{6\Delta t_D}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i-1}} = & \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ [(1-\alpha)D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] + \alpha \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} [S_{i-1} - S_i] \right\}^{v-1} \quad (5.37) \\
& - \frac{\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}^{v-1}}{\partial S_{i-1}} - \frac{1}{6\Delta t_D}
\end{aligned}$$

Este conjunto de ecuaciones genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas, derivado por el MEFG y se resuelve empleando el algoritmo de Thomas.

5.3.3 Elemento Finito de Galerkin función base cuadrática

Retomando la ecuación (5.28) para describir a la ecuación integral para la aproximación de la función $S(z_D, t_D)$ alrededor del nodo i , empleando funciones bases cuadráticas tanto para la función de aproximación como para la estimación de los coeficientes no-lineales. Como se describió en el capítulo anterior, para este caso se requieren dos conjuntos de ecuaciones para describir al sistema completo de ecuaciones que conforman el jacobiano.

Primero se desarrolla el procedimiento para determinar la ecuación que describe al nodo i , el cual emplea información de los nodos $i-2$, $i-1$, i , $i+1$ e $i+1$.

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j^{n+1} \sum_{k=i-2}^{i+2} \left\{ D_{C_k}^{n+1} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right]_{(i=3,5,\dots,I-2)} (5.38)$$

$$- \sum_{k=i-2}^{i+2} C_k^{n+1} \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0$$

Resolviendo las integrales se tiene que:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[\frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-1}{15\Delta z_D} D_{C_{i-2}} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{15\Delta z_D} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\ & + \left[\frac{-1}{20\Delta z_D} D_{C_{i-2}} + \frac{3}{5\Delta z_D} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{30\Delta z_D} D_{C_i} + \frac{3}{5\Delta z_D} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{20\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\ & + \left. \left[-\frac{11}{15\Delta z_D} D_{C_i} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} + \left[\frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_i} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{n+1} \\ & - \frac{\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + \frac{8\Delta z_D}{15} \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{\Delta z_D}{15} \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \\ & + \left\{ -\frac{2}{3} [C_{i+1} - C_{i-1}] + \frac{1}{6} [C_{i+2} - C_{i-2}] \right\}^{n+1} \end{aligned} \quad (i=3,5,\dots,I-2) \quad (5.39)$$

Incorporando el criterio de evaluación corriente arriba en la ecuación anterior se tiene que:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{40} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
& + \left[\frac{-3}{40} D_{C_{i-2}} + \frac{9}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{20} D_{C_i} + \frac{9}{10} D_{C_{i+1}} - \frac{3}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\
& + \left. \left[-\frac{11}{10} D_{C_i} - \frac{4}{5} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{10} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} + \left[\frac{7}{40} D_{C_i} - \frac{1}{10} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{n+1} \\
& + \frac{1}{10} \left\{ -\frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right\} \\
& + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ \frac{1}{2} (1-\omega) C_{i+2} - 2(1-\omega) C_{i+1} - \frac{3}{2} (2\omega-1) C_i + 2\omega C_{i-1} - \frac{1}{2} \omega C_{i-2} \right\}^{n+1} = 0 \\
& \hspace{25em} (i=3,5,..,I-2) \hspace{10em} (5.40)
\end{aligned}$$

Ahora para desarrollar el procedimiento para determinar la ecuación que describe al nodo $i-1$, la cual emplea información de los nodos $i-2$, $i-1$, e i , se adecua la ecuación (5.38) al nodo $i-1$.

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=i-2}^i \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=i-2}^i \left\{ D_{C_k} \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right]_{(i=2,4,..,I-1)} (5.41) \\
& - \sum_{k=i-2}^i C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = 0
\end{aligned}$$

Resolviendo las integrales de la ecuación anterior e incorporando al criterio de evaluación corriente arriba se tiene que:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{1}{10} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{6}{5} D_{C_{i-2}} + \frac{8}{5} D_{C_{i-1}} + \frac{6}{5} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
& + \left. \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_i \right\}^{n+1} - \frac{2}{\Delta z_D} \{ (1-\omega) C_i + (2\omega-1) C_{i-1} - \omega C_{i-2} \}^{n+1} \\
& + \frac{1}{10} \left\{ 2 \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right\} = 0 \\
& \hspace{25em} (i=2,4,..,I-1) \hspace{10em} (5.42)
\end{aligned}$$

Una forma sencilla de validar algebraicamente a las ecuaciones (5.40) y (5.42) es obteniendo las ecuaciones (4.26) y (4.29) cuando los coeficientes son: $D_C = 1$ y $C = -S$; y estableciendo los siguientes parámetros $\omega = 0.5$. El criterio de evaluación corriente arriba para el término difusivo en esta discretización es difícil de incorporar ya que el método de elemento finito no requiere el conocimiento de las funciones no-lineales en las fronteras de las celdas.

Como en los modelos numéricos anteriores, se procede a aplicar el método de Newton-Raphson para linealizar el sistema de ecuaciones generado por (5.40) y (5.42).

Elementos $i-1$ e i del vector de residuos \mathbf{R} respectivamente.

Corresponde a nodos $i-1$.

$$\begin{aligned}
 R^{v-1}(S_{i-2}, S_{i-1}, S_i) &\approx \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{1}{10} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{6}{5} D_{C_{i-2}} + \frac{8}{5} D_{C_{i-1}} + \frac{6}{5} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
 &+ \left. \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_i \right\}^{v-1} - \frac{2}{\Delta z_D} \{ (1-\omega)C_i + (2\omega-1)C_{i-1} - \omega C_{i-2} \}^{v-1} \\
 &+ \frac{1}{10} \left\{ 2 \frac{S_{i-2}^{v-1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}^{v-1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i^{v-1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right\} = 0
 \end{aligned} \tag{5.43}$$

Corresponde a nodos i .

$$\begin{aligned}
R^{v-1}(S_{i-2}, S_{i-1}, S_i, S_{i+1}, S_{i+2}) &\approx \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{40} D_{C_i} \right] S_{i-2} \right. \\
&+ \left[\frac{-1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_{i-1} + \left[\frac{-3}{40} D_{C_{i-2}} + \frac{9}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{20} D_{C_i} + \frac{9}{10} D_{C_{i+1}} - \frac{3}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\
&+ \left. \left[-\frac{11}{10} D_{C_i} - \frac{4}{5} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{10} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} + \left[\frac{7}{40} D_{C_i} - \frac{1}{10} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{v-1} \\
&+ \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ \frac{1}{2} (1-\omega) C_{i+2} - 2(1-\omega) C_{i+1} - \frac{3}{2} (2\omega-1) C_i + 2\omega C_{i-1} - \frac{1}{2} \omega C_{i-2} \right\}^{v-1} \\
&+ \frac{1}{10} \left\{ -\frac{S_{i-2}^{v-1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i-1}^{v-1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8\frac{S_i^{v-1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i+1}^{v-1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{v-1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right\} = 0
\end{aligned} \tag{5.44}$$

Coefficientes distintos de cero en las filas $i-1$ e i del jacobiano \mathbf{J} .

Corresponde a términos del jacobiano relacionados con los nodos $i-1$.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_{i-2}}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{1}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-2}}}{\partial S_{i-2}} \left[-\frac{11S_{i-2}}{10\Delta z_D} + \frac{4S_{i-1}}{5\Delta z_D} - \frac{S_i}{10\Delta z_D} \right] \right\}^{v-1} \\
&+ \frac{2\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-2}}{\partial S_{i-2}}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{5.45}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_{i-1}}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} \left[-\frac{4S_{i-2}}{5} + \frac{8S_{i-1}}{5} - \frac{4S_i}{5} \right] \right\}^{v-1} \\
&- \frac{2(2\omega-1)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}}{\partial S_{i-1}}^{v-1} + \frac{16}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{5.46}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_i}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} \left[-\frac{S_{i-2}}{10} + \frac{6S_{i-1}}{5} - \frac{11S_i}{10} \right] \right\}^{v-1} \\
&- \frac{2(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_i}{\partial S_i}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Corresponde a términos del jacobiano relacionados con los nodos i .

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i-2}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{40} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-2}}}{\partial S_{i-2}} \left[\frac{7S_{i-2}}{40} - \frac{S_{i-1}}{10} - \frac{3S_i}{40} \right] \right\}^{v-1} \\ &- \frac{\omega}{2\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-2}}{\partial S_{i-2}}{}^{v-1} - \frac{1}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i-1}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{-1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} \left[-\frac{S_{i-2}}{10} - \frac{4S_{i-1}}{5} + \frac{9S_i}{10} \right] \right\}^{v-1} \\ &+ \frac{2\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}}{\partial S_{i-1}}{}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_i}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{-3}{40} D_{C_{i-2}} + \frac{9}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{20} D_{C_i} + \frac{9}{10} D_{C_{i+1}} - \frac{3}{40} D_{C_{i+2}} \right] \right. \\ &+ \left. \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} \left[\frac{7S_{i-2}}{40} - \frac{11S_{i-1}}{10} + \frac{37S_i}{20} - \frac{11S_{i+1}}{10} + \frac{7S_{i+2}}{40} \right] \right\}^{v-1} - \frac{3(2\omega-1)}{2\Delta z_D} \frac{\partial C_i}{\partial S_i}{}^{v-1} + \frac{8}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i+1}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_i} - \frac{4}{5} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{10} D_{C_{i+2}} \right] + \frac{\partial D_{C_{i+1}}}{\partial S_{i+1}} \left[\frac{9S_i}{10} - \frac{4S_{i+1}}{5} - \frac{S_{i+2}}{10} \right] \right\}^{v-1} \\ &- \frac{2(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial S_{i+1}}{}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i+2}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_i} - \frac{1}{10} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{40} D_{C_{i+2}} \right] + \frac{\partial D_{C_{i+2}}}{\partial S_{i+2}} \left[-\frac{3S_i}{40} - \frac{S_{i+1}}{10} + \frac{7S_{i+2}}{40} \right] \right\}^{v-1} \\ &+ \frac{(1-\omega)}{2\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+2}}{\partial S_{i+2}}{}^{v-1} - \frac{1}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (5.52)$$

Este conjunto de ecuaciones genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas, derivado por el método de EFG y se resuelve empleando el algoritmo de *Crout* basado en la descomposición LU.

5.4 Validación de las soluciones numéricas

Con el objetivo de validar los modelos numéricos obtenidos en la sección anterior se emplean las soluciones analíticas de los problemas siguientes: 1) difusión-convección para el caso semi-infinito (ver apéndice A) y 2) Buckley-Leverett para flujo convectivo (ver apéndice J).

5.4.1 Solución analítica de ecuación de difusión-convección

Las soluciones numéricas obtenidas por los tres modelos numéricos DF, EFL y EFC derivados en la sección anterior son comparadas con la solución analítica de DC y con las soluciones numéricas correspondientes a las desarrolladas en el capítulo 4, es decir el modelo no-lineal se reducirá al modelo lineal de DC de modo que los modelos numéricos no-lineales se aproximen numéricamente a la solución analítica del modelo lineal. Para este caso se emplean los casos estándares de las técnicas numéricas, estableciendo los valores de los parámetros $\alpha = \omega = 0.5$ y los coeficientes no-lineales toman la forma siguiente: $D_C = 1$ y $C = -S$.

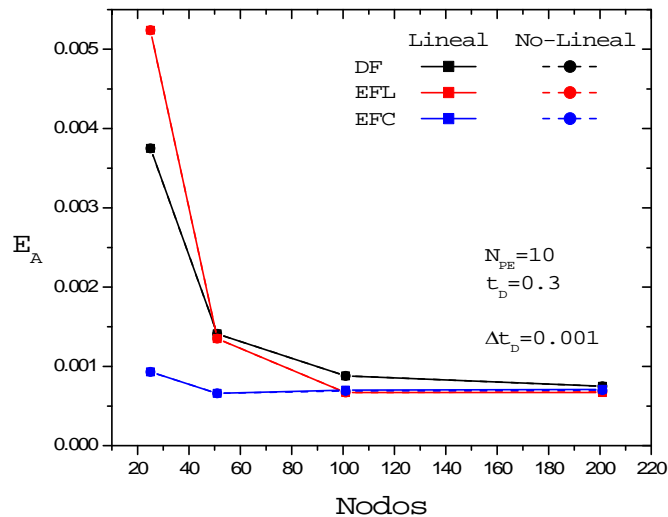


Figura 5.1: Gráfica del error por áreas obtenido para $N_{PE} = 10$ y $t_D = 0.3$ cuando se varía el número de nodos empleados en la validación de los modelos no-lineales con la EDC.

Nodos	DF Lineal	DF No- Lineal	EFL Lineal	EFL No- Lineal	EFC Lineal	EFC No- Lineal
25	0.00375	0.00375	0.00524	0.00524	0.00093	0.00093
51	0.00141	0.00141	0.00135	0.00135	0.00066	0.00066
101	0.00088	0.00088	0.00067	0.00067	0.00070	0.00069
201	0.00075	0.00075	0.00067	0.00068	0.00071	0.00070

Tabla 5.1: Datos correspondientes a los graficados en la figura 5.1.

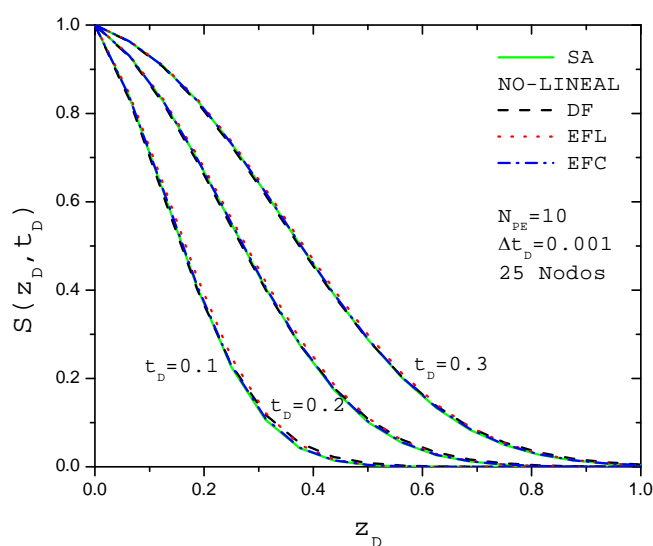


Figura 5.2: Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 10$ empleando 25 nodos y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.001$ en modelo numérico no-lineal.

En la figura 5.1 se muestra la sensibilidad del error por áreas correspondiente al perfil de saturación en el tiempo adimensional $t_D = 0.3$ cuando se aumenta el número de nodos empleados en la simulación. Se observa claramente que los errores obtenidos por una técnica numérica en particular (ya sea DF, EFL y EFC) son exactamente los mismos sin importar si el modelo numérico es lineal o no-lineal. La figura también ilustra que los errores disminuyen con el aumento de los nodos empleados. Y por último, se puede ver de la tabla 5.1 que el orden de los errores es aceptable de modo que los perfiles de saturación mostrados en la figura 5.2 muestran un buen ajuste entre la solución analítica del problema

de DC y los modelos no-lineales desarrollados en este capítulo. Con esto se valida el algoritmo de los tres modelos numéricos.

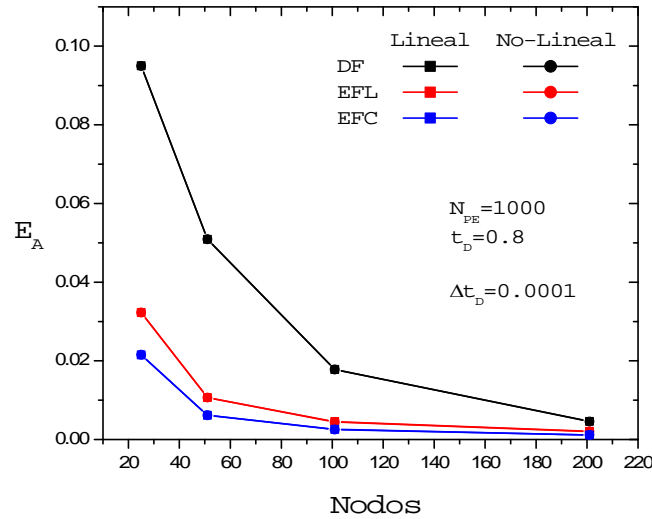


Figura 5.3: Gráfica del error por áreas obtenido para $N_{PE} = 1000$ y $t_D = 0.8$ cuando se varía el número de nodos empleados en la validación de los modelos no-lineales con la EDC.

Para ampliar la validación se aborda un segundo caso, que es más complejo desde el punto de vista de la aproximación numérica. Como se ha explicado a medida que el término convectivo de la ecuación de flujo domina en el proceso de flujo, la solución numérica requiere mayor número de nodos en la malla y refinamiento en los pasos de tiempo, requiriendo así mayor esfuerzo computacional. Por lo que, para probar el funcionamiento de los modelos numérico no-lineal contra los lineales, se aborda el problema de DC para $N_{PE} = 1000$.

El comportamiento del error mostrado en la figura 5.3 es el mismo que se observó en la figura 5.1. Un mismo método numérico proporciona los mismos errores para la simulación del problema de DC en el caso semi-infinito. La tabla 5.2 muestra los datos graficados en la figura 5.3 y se observa que los datos mostrados para un mismo método numérico son

prácticamente los mismos, algunos datos varían pero esto ocurre hasta el orden de magnitud de 10^{-4} .

Nodos	DF Lineal	DF No-Lineal	EFL Lineal	EFL No-Lineal	EFC Lineal	EF No-Lineal
25	0.09499	0.09497	0.03227	0.03228	0.02149	0.02152
51	0.05089	0.05091	0.01067	0.01067	0.00617	0.00616
101	0.01780	0.01779	0.00452	0.00443	0.00257	0.00251
201	0.00458	0.00457	0.00207	0.00200	0.00114	0.00116

Tabla 5.2: Datos correspondientes a los graficados en la figura 5.3.

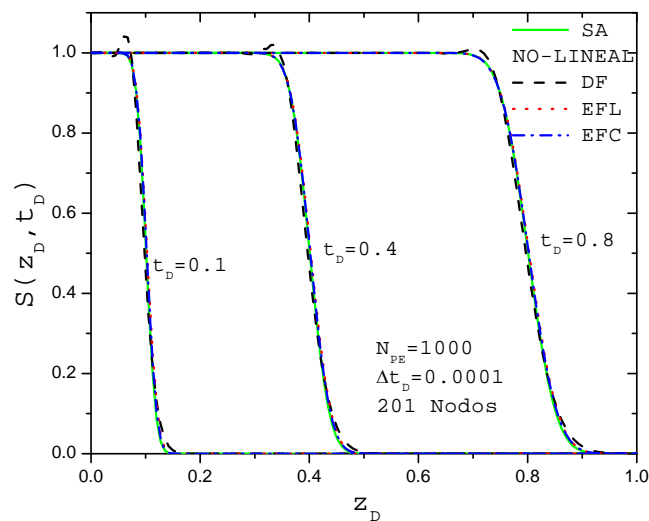


Figura 5.4: Perfil de saturaciones $S(z_D, t_D)$ para $N_{PE} = 1000$ empleando 201 nodos y pasos de tiempo de tamaño $\Delta t_D = 0.0001$ en modelo numérico no-lineal.

En la figura 5.4 se muestran los perfiles de saturación del flujo a un $N_{PE} = 1000$ y recordando a la figura 4.11 se observa que es muy similar, sólo que este caso se emplearon los resultados generados por los modelos numéricos no-lineales.

De esta sección se puede concluir que las ecuaciones derivadas en la sección anterior funcionan a muy bien para simular el problema de difusión-convección en el caso semi-infinito y que el algoritmo de solución empleado en los modelo numéricos no-lineales es correcto.

Aumentado el grado de complejidad en la validación en la siguiente sección se analiza la solución analítica conocida como solución de Buckley-Leverett, la cual representa el comportamiento de un problema de flujo más real que el descrito por la ecuación de DC.

5.4.2 Solución analítica de Buckley-Leverett

El modelo no-lineal de flujo que se desea resolver describe el comportamiento de dos fluidos inmiscibles, de propiedades homogéneas. Dependiendo de las condiciones empleadas, el modelo puede ser usado para simular el proceso de inyección de un fluido mojante para desplazar a uno no-mojante. La solución analítica de Buckley-Leverett describe el perfil de saturaciones para el proceso de inyección de agua en medio lineal inicialmente saturado con aceite. Dicha solución analítica es empleada para validar el modelo no-lineal cuando sólo actúan las fuerzas convectivas, es decir las fuerzas viscosas y las gravitacionales.

Empezando por considerar sólo las fuerzas viscosas en el modelo no-lineal de flujo es decir, los términos capilares y gravitacionales son ignorados, suponiendo flujo horizontal y fijando los siguientes parámetros $M = 1$ y $no = nw = 2$, se tiene la siguiente solución analítica al problema de flujo viscoso:

$$S(z_D, t_D) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\sqrt{-t_D z_D - z_D^2} + \sqrt{t_D z_D} \sqrt{t_D + 4z_D}}{z_D} \right] & 0 \leq z_D \leq 1.2t_D \\ 0 & z_D > 1.2t_D \end{cases} \quad (5.53)$$

Como se mencionó con anterioridad la solución de analítica de B-L es una excelente opción para validar el modelo de flujo no-lineal debido a que es una solución analítica para un problema real de flujo convectivo. Este caso proporciona la oportunidad de mostrar lo

indispensable de emplear el criterio de evaluación corriente arriba en las ecuaciones hiperbólicas o con comportamiento de flujo convectivo.

La figura 5.5 ilustra que los resultados obtenidos de los modelos no-lineales, cuando se emplean los métodos numéricos clásicos, proporcionan resultados que matemáticamente son correctos pero físicamente imposibles, y por el contrario, cuando el criterio de evaluación corriente arriba es incorporado en los métodos numéricos, los resultados obtenidos mejoran significativamente. Por lo que el criterio de corriente arriba es indispensable para modelar el flujo convectivo.

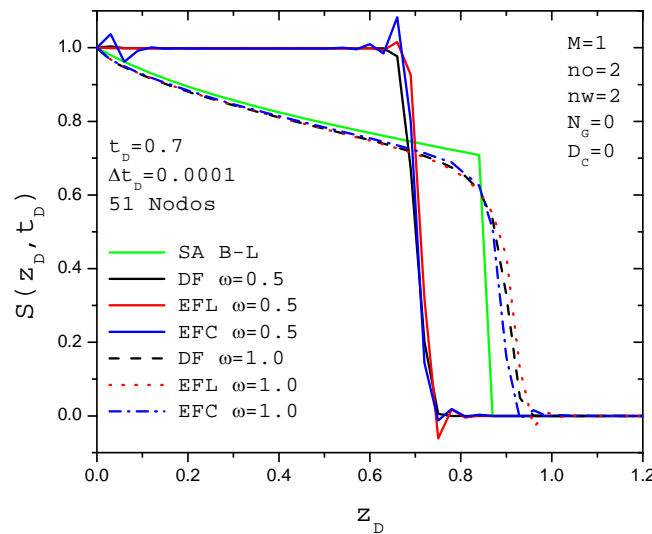


Figura 5.5: Perfil de saturaciones para el problema de B-L donde se muestra la necesidad de emplear el criterio de corriente arriba.

La figura 5.6 muestra el comportamiento del error en la áreas, E_A , cuando el número de nodos y el tamaño de los pasos de tiempo son variados. Se observa que el área entre las curvas disminuye a medida que el número de nodos empleados en la simulación aumenta y que para los tamaños de los pasos de tiempo mostrados en la figura no se observan diferencias. También se muestra que las áreas obtenidas por las tres técnicas son prácticamente las mismas. Esta figura incluye seis curvas: sin embargo, se puede notar que prácticamente todas pasan por encima indicando diferencias prácticamente imperceptibles.

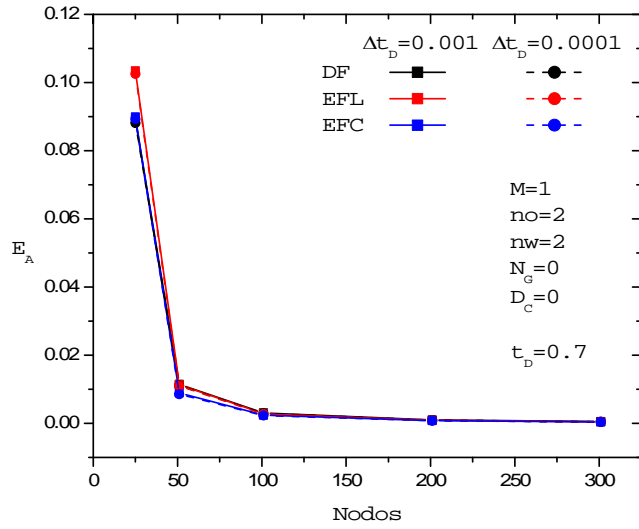


Figura 5.6: Gráfica del área entra las curvas analítica y numérica cuando se varía el número de nodos en el problema de flujo viscoso de B-L.

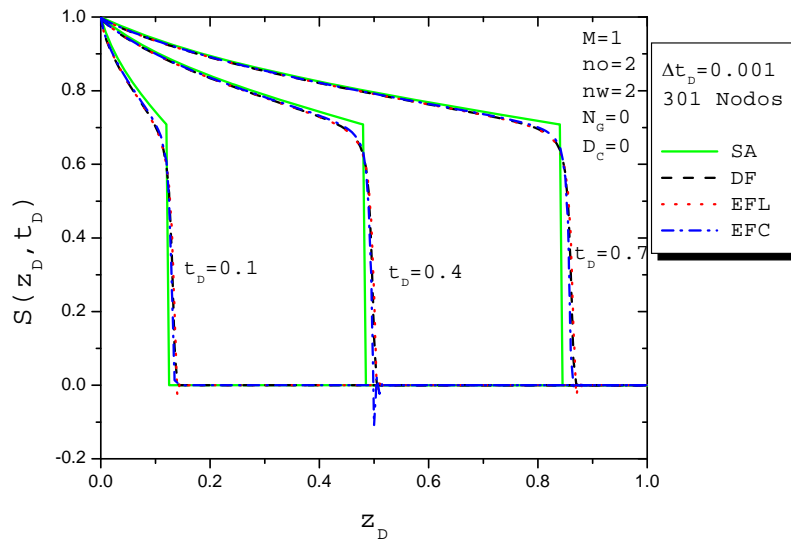


Figura 5.7: Perfil de saturaciones para el problema de B-L donde se comparan las soluciones analíticas y numéricas.

Es importante mencionar que aunque el área entre las curvas disminuye, los métodos de elemento finito pueden presentar oscilaciones en la vecindad inferior del frente de desplazamiento, como se muestra en la figura 5.7.

De la figura 5.7 se observa claramente que los tres métodos numéricos proporcionan resultados satisfactorios para el caso de flujo viscoso de BL y la técnica de diferencias finitas no presenta las oscilaciones que presentan las técnicas derivadas del método de elemento finito. La aproximación de elemento finito con funciones bases cuadráticas es la que mejor se adapta al frente de desplazamiento pero al igual que la aproximación con funciones bases lineales presentan oscilaciones en la parte baja del frente. En la figura 5.7 puede verse que los modelos no-lineales están validados para el término de las fuerzas viscosas. El paso lógico siguiente es validar al término convectivo completo, es decir, al término que contienen las fuerzas viscosas y gravitacionales. Para dicho propósito se fijan los siguientes datos: $M = 1$, $no = 1$, $nw = 2$ y $N_G = -1$.

$$S(z_D, t_D) = \begin{cases} \frac{t_D + z_D + \left[(-t_D - z_D)^2 - 4(t_D + z_D)(2t_D + z_D - \sqrt{t_D} \sqrt{4t_D + 3z_D}) \right]^{1/2}}{2(t_D + z_D)}, \\ 0 \end{cases},$$

$$\begin{aligned} 0 \leq z_D \leq 1.15t_D \\ z_D > 1.15t_D \end{aligned} \quad (5.54)$$

La ecuación anterior es la solución analítica del problema convectivo que se desea emplear para validar al término convectivo del modelo no-lineal de flujo.

Para el caso del flujo viscoso con gravedad, el comportamiento del error por áreas, E_A , figura 5.8, cuando el número de nodos y los tamaños de los pasos de tiempo son variados, es semejante al caso de la figura 5.6 donde el área entre las curvas disminuye a medida que el número de nodos aumenta, los resultados obtenidos para las áreas en los diferentes pasos de tiempo adimensionales empleados son prácticamente iguales.

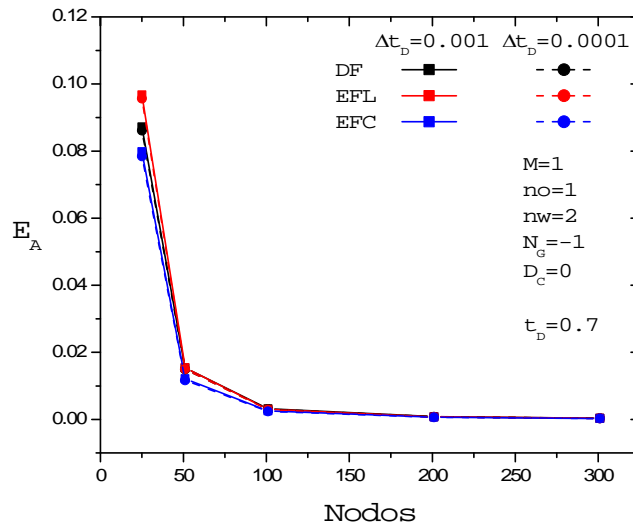


Figura 5.8: Gráfica del error por áreas entre las curvas analítica y numérica cuando se varía el número de nodos en el problema de flujo viscoso con gravedad de B-L.

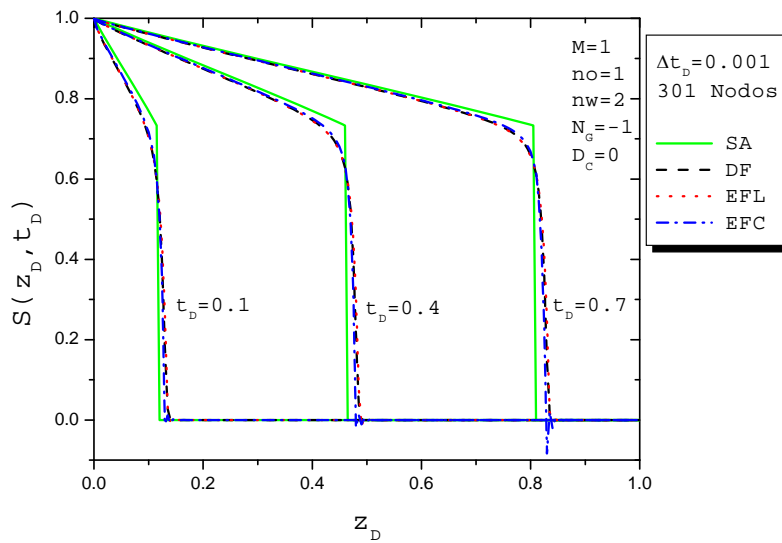


Figura 5.9: Perfil de saturaciones para el problema de B-L con gravedad, donde se comparan las soluciones analítica y numéricas.

En la figura 5.9 se observa que las tres técnicas numéricas proporcionan resultados satisfactorios para la aproximación del proceso convectivo de BL con gravedad, cabe mencionar que el método de elemento finito con función base cuadrática tienen mejor aproximación en la zona del frente de convección que los otros dos, pero en la parte inferior del frente generan unas pequeñas oscilaciones, mientras que el método de diferencias finitas no las genera. Los modelos numéricos no-lineales funcionan satisfactoriamente según se mostró en la validación con ayuda de las soluciones analíticas al problema de BL para el par de casos mostrados esta sección.

5.5 Análisis numérico del término difusivo del modelo no-lineal de flujo

En la sección anterior sólo se analizó el término convectivo del modelo no-lineal de flujo y se implementó indiscutiblemente el criterio de corriente arriba. En esta sección se analiza la influencia del criterio de corriente arriba en el término difusivo del modelo no-lineal de flujo. Como no se cuenta con una solución analítica o experimentos de laboratorio que ayuden en la validación de este término de flujo, se comparan las soluciones numéricas por los tres métodos (DF, EFL y EFC) con las formulaciones clásicas y con el criterio de corriente arriba. La figura 5.10 muestra el perfil de saturaciones para un proceso influenciado por el término difusivo (capilaridad) cuando se emplea la formulación clásica, y se observa que las tres soluciones se cotejan perfectamente.

Como se mencionó en la sección anterior que el término convectivo del modelo de flujo debe ser evaluado por el criterio de corriente arriba, entonces lo siguiente es comparar los resultados de los métodos clásicos ($\omega = 0.5$) con los correspondientes a los que incorporan el criterio de corriente arriba ($\omega = 1.0$) en el término convectivo.

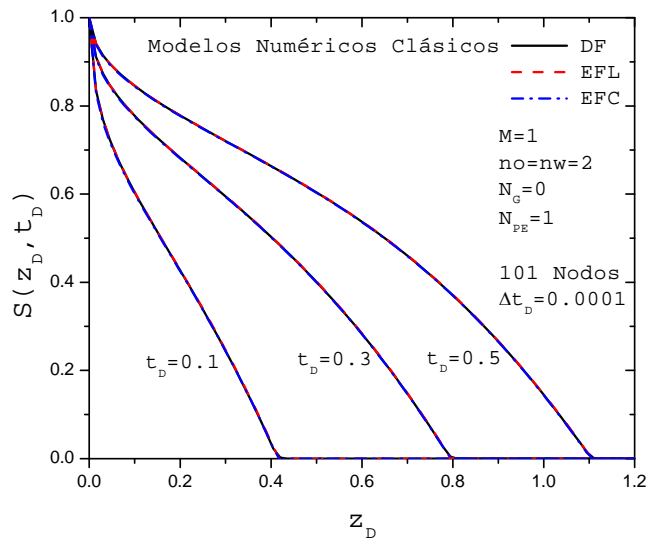


Figura 5.10: Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 1$ calculado por los modelos numéricos clásicos.

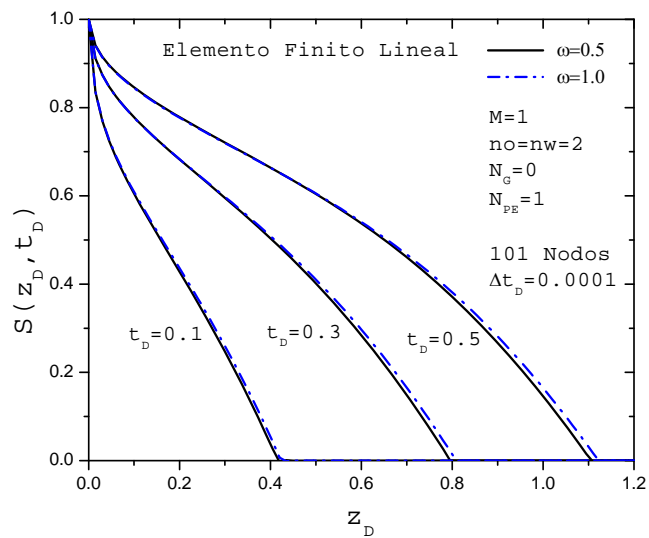


Figura 5.11: Comparación de los perfiles de saturaciones para $N_{PE} = 1$ calculado por los modelos numéricos clásicos y con el criterio de corriente arriba en EFL.

Los modelos numéricos derivados por la técnica de elemento finito tratan al término difusivo de flujo con la formulación clásica, y como se mencionó en las secciones anteriores el criterio de corriente arriba es incorporado sólo en el término convectivo. Las figuras 5.11 y 5.12 muestran los resultados obtenidos con los métodos de elemento finito con funciones base lineales y cuadráticas respectivamente, y se observa en ambas gráficas que las soluciones generadas por los criterios de evaluación corriente arriba y el clásico proporcionan casi los mismos resultados. Lo mismo puede decirse de la técnica de diferencias finitas cuando el término difusivo de flujo es evaluado con la formulación clásica, como lo muestra la figura 5.13, donde también se muestran los resultados obtenidos por el método de diferencias finitas con el criterio de corriente arriba incorporado en ambos términos de flujo ($\alpha = \omega = 0.1$), y se observa que difieren mucho con los resultados obtenidos con diferencias finitas clásico y con el criterio de corriente arriba sólo en el término convectivo.

Cabe mencionar que todas las soluciones obtenidas en las figuras 5.11, 5.12 y 5.13 se cotejan muy bien, menos la que incorpora el criterio de evaluación corriente arriba en los dos términos de flujo. Entonces, podríamos decir que esta última solución es incorrecta, debido a que se llega a la misma solución por tres técnicas numéricas diferentes. A pesar que no podemos saber cual es la solución correcta, si podemos tener la certeza de la incorrecta, ya que, a determinado tiempo adimensional le corresponde una cantidad de fluido inyectado, además t_D es el volumen total de fluido inyectado en el medio poroso a un tiempo determinado y debe ser igual en magnitud al área bajo el perfil de saturaciones en el mismo t_D . La tabla 5.3 muestra las áreas calculadas para los perfiles de saturación de la figura 5.13 y se concluye que en los perfiles que incorporan el criterio de corriente arriba en ambos términos de la ecuación de flujo, se obtienen los valores correctos del volumen adimensional total de fluido inyectado.

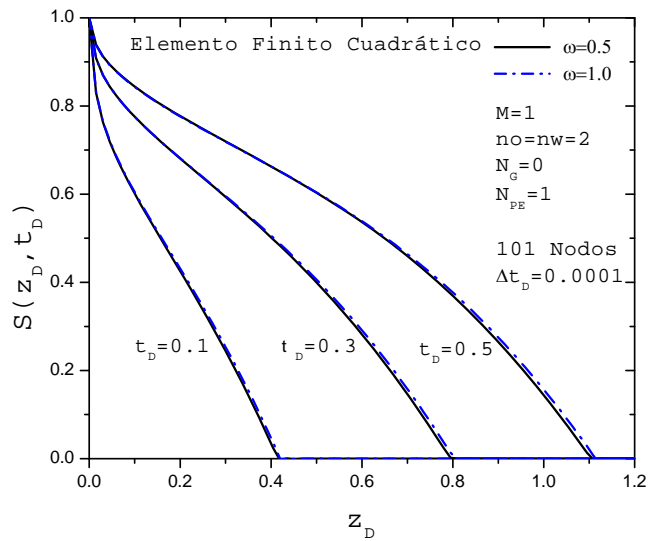


Figura 5.12: Comparación de los perfiles de saturaciones para $N_{PE} = 1$, calculado por los modelos numéricos clásicos y con el criterio de corriente arriba en EFC.

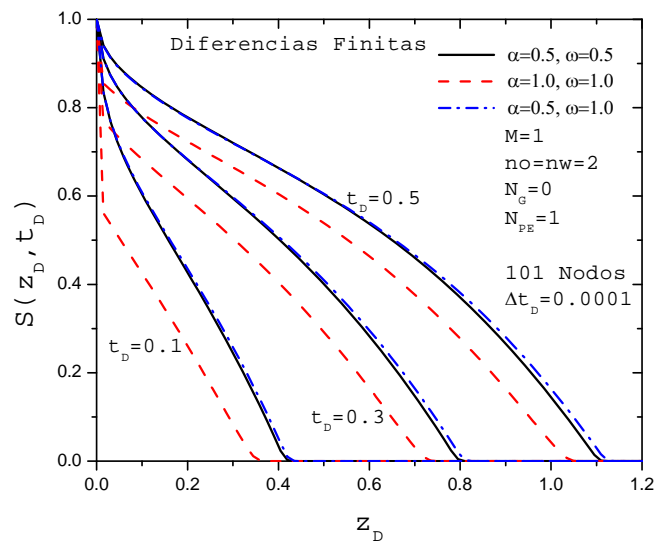


Figura 5.13: Comparación de los perfiles de saturaciones para $N_{PE} = 1$, calculado por los modelos numéricos clásicos y con el criterio de corriente arriba en DF.

De la discusión anterior se puede concluir que el modelo numérico general que funciona en los casos donde dominan las fuerzas difusivas o convectivas es el que aplica el criterio de corriente arriba en ambos términos en la ecuación de flujo, lo cual es congruente con lo mencionado en la sección 5.1 donde se menciona que las funciones dependientes de saturación son fuertemente no-lineales y deben tratarse con el criterio de evaluación corriente arriba, ya que si se aplica un promedio aritmético para evaluar estas funciones no-lineales se obtienen soluciones que matemáticamente son correctas pero físicamente irreales.

t_D	$\alpha = \omega = 0.1$	$\alpha = 0.5, \omega = 1.0$
0.1	0.107	0.176
0.3	0.307	0.391
0.5	0.507	0.594

Tabla 5.3: Áreas bajo los perfiles de la figura 5.15 para cada t_D .

Aunque el análisis anterior se hizo para el método de diferencias finitas, el criterio de evaluación corriente arriba para el término difusivo se puede incorporar en el modelo de elemento finito con funciones base lineal debido a la semejanza de los modelos numéricos (5.21) y (5.33).

Cabe mencionar que en las soluciones numéricas a medida que el término difusivo en la ecuación de flujo es significativo se requiere un número menor de nodos comparado con las soluciones en las que el término convectivo de la ecuación de flujo domina.

5.6 Efecto de las propiedades del sistema roca-fluido en la solución numérica.

Con el modelo numérico desarrollado y validado en este capítulo se procede a complementar el análisis discutido en el capítulo 3, relacionado con los efectos en los coeficientes no-lineales $V(S)$, $G(S)$ y $D_c(S)$ del modelo analítico de flujo y la velocidad adimensional del agua (3.41), cuando se varían las propiedades del sistema roca-fluidos mediante los cambios en n_w , n_o y M . En esta sección, por medio de la simulación numérica del proceso de desplazamiento de aceite por agua descrito por el modelo analítico

de flujo (3.33) se analiza la influencia de las propiedades del sistema roca-fluidos sobre t_{DR} , que es el tiempo adimensional en el momento de irrupción e igual a la recuperación de aceite en dicho momento. Entonces se pueden calcular perfiles de saturaciones numéricamente, S_i^n , permitiendo que las curvas que describen las contribuciones de las fuerzas viscosas, u_{wV} , gravitacionales, u_{wG} , y capilares, u_{wDC} , a la velocidad adimensional del agua, u_{wD} , sean calculadas a lo largo del medio poroso, en cada escenario determinado por nw , no y M .

Como sólo se desea analizar los efectos de nw , no y M en el proceso de desplazamiento, los números adimensionales de Peclet y gravead son se fijan a los valores de $N_{PE} = 10$ y $N_G = 1$ respectivamente, el análisis numérico los números adimensionales y diversos parámetros de flujo del proceso de inyección de agua son estudiados en el capítulo 6, con respecto a los parámetros requeridos para las simulaciones numéricas, 501 nodos y tamaño de pasos de tiempo adimensional de 0.0001 son usados.

Para el análisis numérico del efecto de las curvas de movilidades relativas de agua y aceite, ecuaciones (3.30) y (3.31) respectivamente, sobre el proceso de desplazamiento, primero se varían los exponentes de Corey y por último la relación de movilidades en sus puntos finales. Entonces como caso inicial, la figura 5.14 ilustra un escenario donde ambos fluidos tienen las mismas movilidades relativas con $nw = no = n = 2$ y $M = 1$, y que además sirve de comparación con los diferentes procesos de flujo definidos por nw , no y M . En las figuras empleadas para el análisis se muestran cinco curvas relacionadas con el proceso de desplazamiento, siendo éstas: el perfil de saturaciones, las contribuciones de las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas a la velocidad adimensional del agua y la velocidad adimensional del agua. También, como un parámetro numérico de comparación entre los diferentes escenarios mostrados por las figuras siguientes, a un lado de los rótulos y leyendas se muestran las áreas bajo las curvas ilustradas por las figuras.

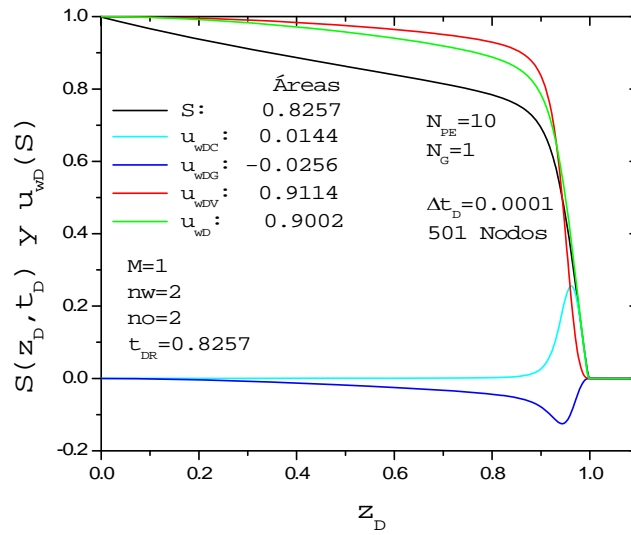


Figura 5.14: Caso I, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nw = 2$, $no = 2$.

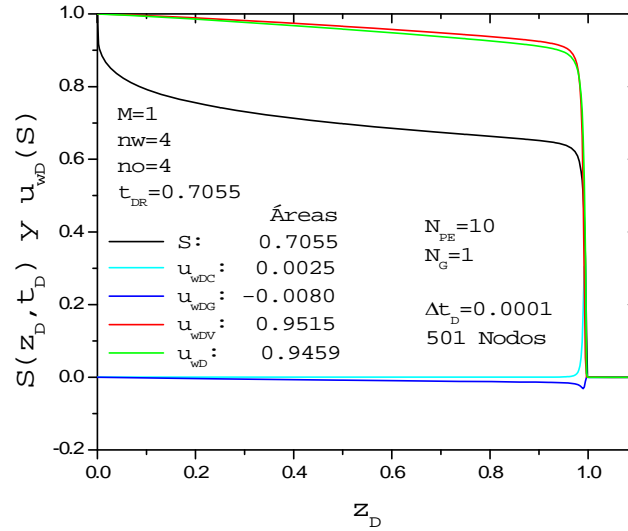


Figura 5.15: Caso II, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nw = 4$, $no = 4$.

La figura 5.15 muestra un escenario de flujo con $nw=no=n=4$ y $M=1$, donde las movilidades relativas de ambos fluidos son iguales, como en el caso de la figura 5.14, pero

con la variante que en este caso los exponentes de Corey son mayores, haciendo que la mojabilidad del medio poroso a ambas fases sea mayor, disminuyendo la facilidad de flujo de dos fases. De estas figuras se observa que al aumentar el exponente de Corey de $n = 2$ a $n = 4$, la recuperación de aceite en el momento de irrupción disminuye de 0.8257 a 0.7055 debido a que por fuerzas interfaciales el medio poroso dificulta el movimiento de los fluidos. También se observa que las contribuciones capilares y gravitacionales son afectadas ampliamente, de modo que el proceso de flujo es dominado prácticamente sólo por las fuerzas viscosas, cuando el exponente de Corey varía de $n = 2$ a $n = 4$. Entonces al aumentar n la recuperación disminuye al igual que las contribuciones capilares y gravitacionales.

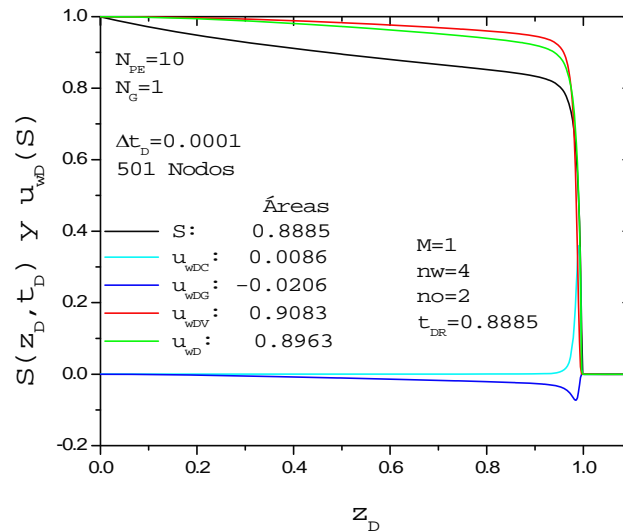


Figura 5.16: Caso III, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nw = 4$, $no = 2$.

La comparación de los escenarios mostrados por las figuras 5.14 y 5.16 muestra que la recuperación de aceite en el momento de irrupción aumenta de 0.8257 a 0.8885 con sólo aumentar el exponente de Corey para el agua de $nw = 2$ a $nw = 4$, lo cual disminuye la facilidad de flujo del agua a través del medio poroso permitiendo que el aceite se mueva con mayor facilidad que el agua. También se observa que al bajar la permeabilidad relativa al agua, las contribuciones de las fuerzas gravitacionales y capilares disminuyen,

aumentando las contribuciones viscosas en el proceso de desplazamiento. Por otro lado si el exponente de Corey para el agua se fija en 2 y el correspondiente al aceite es aumentado, se observa de las figuras 5.14 y 5.17 que la recuperación de aceite disminuye de 0.8257 a 0.6209 cuando el exponente de Corey cambia de $no=2$ a $no=4$. La disminución en la recuperación se debe a que el aceite se mueve con mayor dificultad que el agua debido al decremento en los valores de las permeabilidades relativas al aceite. Las contribuciones capilares y gravitacionales también son reducidas por el aumento en la mojabilidad del medio poroso al aceite, en cambio las contribuciones viscosas son beneficiadas con el incremento de no .

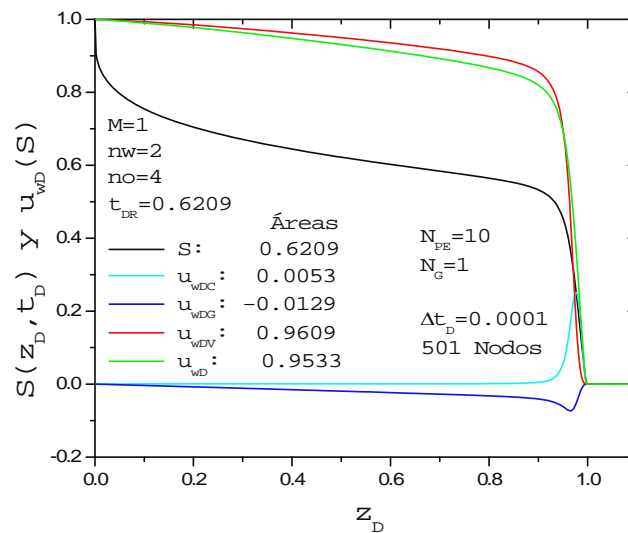


Figura 5.17: Caso IV, solución numérica en t_{DR} , para $M = 1$, $nw = 2$, $no = 4$.

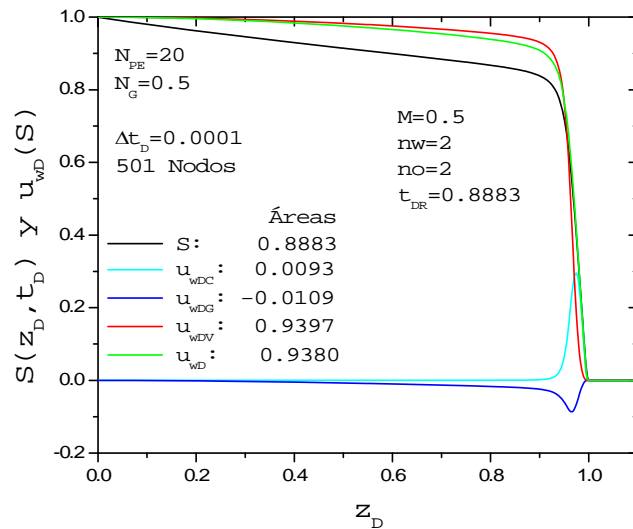


Figura 5.18: Caso V, solución numérica en t_{DR} , para $M = 0.5$, $nw = 2$, $no = 2$.

Finalmente, las figura 5.14 y 5.18 muestran el efecto de M en el perfil de saturaciones y en las contribuciones de las tres fuerzas que principalmente influyen en el flujo de fluidos a través de medios porosos. En estas figuras la relación de movilidades en sus puntos finales es variada de $M = 1$ a $M = 0.5$, y por consiguiente los números adimensionales de Peclet y gravedad son cambiados a $N_{PE} = 20$ y $N_G = 0.5$, debido a que los tres números adimensionales son función de la movilidad relativa del agua en su punto final, λ_{rw}^* , ver ecuaciones (3.34), (3.35) y (3.39). Entonces el decremento de M disminuye la movilidad relativa al agua y/o aumenta la correspondiente al aceite, por consiguiente al comprar los casos I y V la recuperación de aceite aumenta de 0.8257 a 0.8883. Con respecto a las contribuciones de las fuerzas capilares y gravitacionales, se observa que el área bajo la curva de contribución capilar disminuye de 0.0144 a 0.0093, y la correspondiente a la gravitacional disminuye de -0.0256 a -0.0109; mientras que las viscosas aumentan de 0.9114 a 0.9397.

Entonces complementando lo mencionado en el capítulo 3 de esta sección se puede concluir que reducir las permeabilidades relativas al agua y/o aceite disminuye las contribuciones de las fuerzas capilares y gravitacionales al proceso de desplazamiento bifásico inmiscible. Las recuperaciones de aceite se incrementan en la medida que la

permeabilidad relativa al agua disminuye. Los procesos de desplazamiento recomendados son los que establecen una relación de movilidades en sus puntos finales lo más pequeña posible en donde los efectos viscosos son dominantes.

Capítulo 6

EFFECTOS CAPILARES, GRAVITACIONALES Y VISCOSOS EN EL DESPLAZAMIENTO DE ACEITE POR AGUA

Introducción.

En el proceso de desplazamiento de aceite por agua en un medio poroso, las fuerzas convectivas son el resultado de la interacción entre las fuerzas viscosas y gravitacionales. La teoría más estudiada y empleada hasta la fecha para la predicción de las recuperaciones finales en el proceso de invasión de agua, es la teoría desarrollada por Buckley-Leverett (BL), que considera un proceso de flujo controlado sólo por fuerzas convectivas; siendo las fuerzas viscosas las principales en el proceso de inyección. Por lo que en este capítulo, con los conceptos de la teoría de BL y el método de solución de Welge, se analizan primeramente los efectos convectivos, y posteriormente se incorporan los efectos capilares para su análisis.

Viscosidad del aceite	5	cp
Constante de la función de presión capilar	5	kPa
Permeabilidad	1000	mD
Densidad del agua	1	g/cm ³
Densidad del aceite	0.8	g/cm ³
Aceleración de la gravedad	9.81	m/s ²
Punto final de permeabilidad relativa al agua	0.15	-
Punto final de permeabilidad relativa al aceite	1	-
Exponente de Corey para el agua	2	-
Exponente de Corey para el aceite	2	-
Porosidad efectiva	0.2	-

Tabla 6.1: Propiedades de flujo.

El modelo numérico en diferencias finitas con el criterio de corriente arriba en ambos términos de la ecuación de flujo es empleado para calcular los perfiles de saturaciones que son necesarios para estudiar los efectos capilares, así como la contribución de cada fuerza a la velocidad del agua durante el desplazamiento.

6.1 Propiedades de flujo

Como el modelo no-lineal de flujo utilizado se define en variables adimensionales, entonces, se usan datos reales de flujo de fluidos y medio poroso para estudiar la contribución de cada fuerza al desplazamiento con parámetros realistas para los números y variables adimensionales, y así calcular los perfiles de saturaciones y posteriormente las contribuciones de las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas a la velocidad adimensional del agua. Para la elección de los datos empleados en las simulaciones se tomaron de referencia algunos trabajos publicados [^{11,14}], los datos que se mantienen constantes a lo largo del análisis de este capítulo son mostrados en la tabla 6.1. Las expresiones analíticas de las permeabilidades relativas para el agua y el aceite son mostradas en la figura 6.1 y se puede observar que el medio poroso es fuertemente mojado por agua; de igual forma la figura 6.2 muestra la expresión analítica y la gráfica de la función de presión capilar.

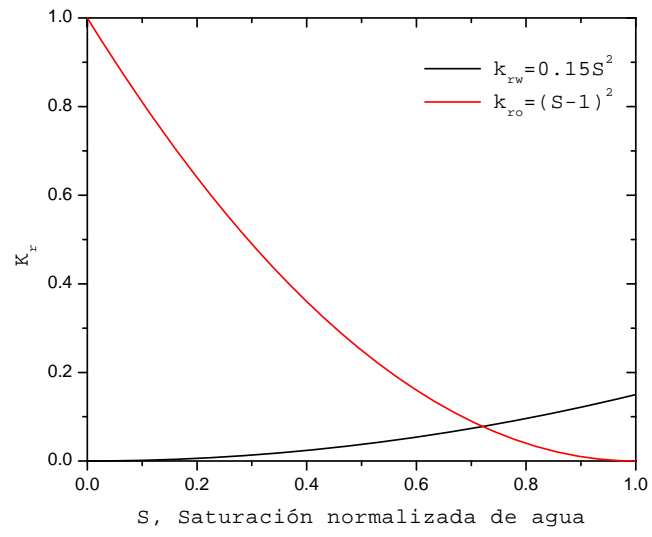


Figura 6.1: Curvas de permeabilidades relativas para agua y aceite.

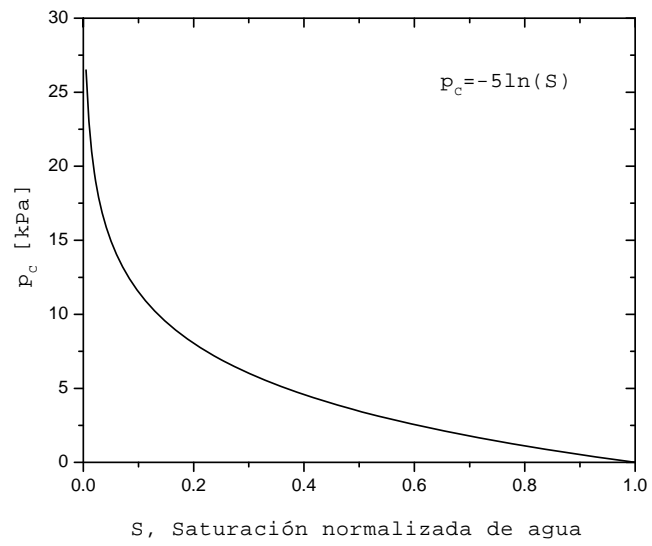


Figura 6.2: Curva de presión capilar entre agua y aceite.

6.2 Efectos Viscosos

Para observar los efectos convectivos se ignora al término capilar de la ecuación (3.41), la cual describe la aportación las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas a la velocidad adimensional del agua. Se estudian primero los efectos viscosos, que son los que dominan el proceso de desplazamiento cuando el gasto de inyección es alto o el flujo es en dirección horizontal. Entonces, despreciando los efectos capilares en la ecuación (3.41), estableciendo $N_G = 0$, y fijando las potencias de las permeabilidades relativas en acuerdo con la tabla 6.1, se tiene que:

$$f_w = u_{wDV} = V(S) = \frac{MS^2}{MS^2 + (1-S)^2} \quad (6.1)$$

donde,

$$M = \frac{k_{rw}^* / \mu_w}{k_{ro}^* / \mu_o}. \quad (3.39)$$

La ecuación anterior muestra que el modelo adimensional depende solamente de la relación de movilidades en sus puntos finales, M , y a su vez, éste número adimensional depende de otras propiedades de flujo, ver ecuación (3.39); por lo que, dado un conjunto de propiedades petrofísicas de un sistema roca-fluido, sólo se puede variar la viscosidad del agua a inyectar.

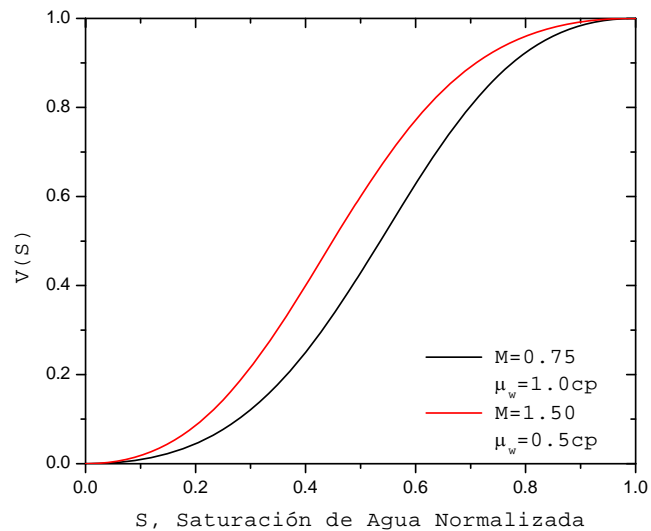


Figura 6.3: Curva de flujo fraccional para flujo viscoso.

Una forma directa de observar el efecto de la viscosidad del agua en el desplazamiento viscoso es empleando en la ecuación (6.1) dos valores diferentes para M , como lo muestra la figura 6.3, en donde se considera un caso favorable ($\mu_w = 1.0 \text{ cp}$) y otro desfavorable ($\mu_w = 0.5 \text{ cp}$). Se observa en esta figura que la velocidad del desplazamiento es mayor cuando la viscosidad del agua disminuye, como consecuencia de disminuir la resistencia al flujo del agua, obteniéndose recuperaciones menores de aceite.

Se puede derivar una expresión analítica para el cálculo de la saturación promedio detrás del frente discontinuo de desplazamiento en función de la relación de movilidades en sus puntos finales, mediante los fundamentos del método gráfico de Welge desarrollado para el flujo viscoso. En el Apéndice J se describe detalladamente el desarrollo, que parte de la ecuación de flujo fraccional (6.1), posteriormente se determina la pendiente de la recta de Welge, la cual es el inverso de la saturación promedio del perfil de saturaciones, $1/\bar{S}$, que describe el frente de desplazamiento viscoso y se relaciona con la relación de movilidades en sus puntos finales como sigue:

$$\bar{S} = 2 \frac{[\sqrt{1+M} - 1]}{M} \quad (6.2)$$

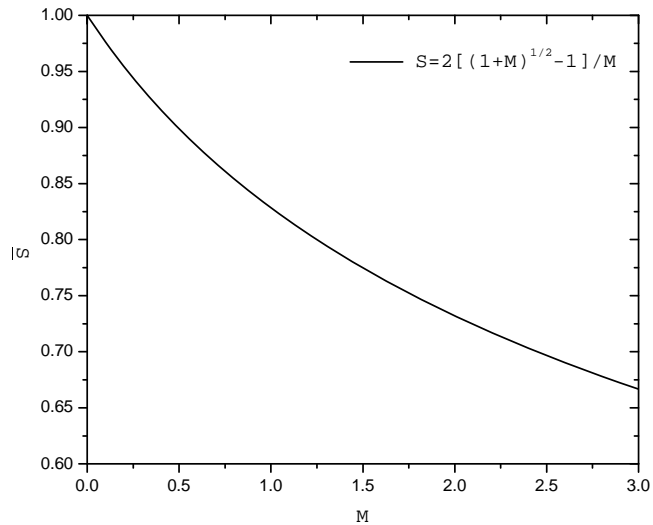


Figura 6.4: Relación analítica de \bar{S} con M para el flujo viscoso.

La expresión matemática anterior, (6.2), es ilustrada en la figura 6.4, mostrando que, a medida que la relación de movilidades en sus puntos finales disminuye, el promedio de saturación detrás del frente de desplazamiento aumenta. La ecuación (6.2) es trascendente ya que en base al valor de viscosidad del agua inyectada se determina el valor de la recuperación hasta el momento del rompimiento, para flujo viscoso.

Para corroborar lo antes mencionado, obsérvese la figura 6.5, que considera los escenarios de flujo de la figura 6.3 y muestra tres perfiles de saturaciones a tres tiempos adimensionales progresivos. Puede verse claramente que los frentes de desplazamiento correspondientes al de viscosidad menor viajan más rápido y por consiguiente su promedio de saturaciones detrás del frente es menor.

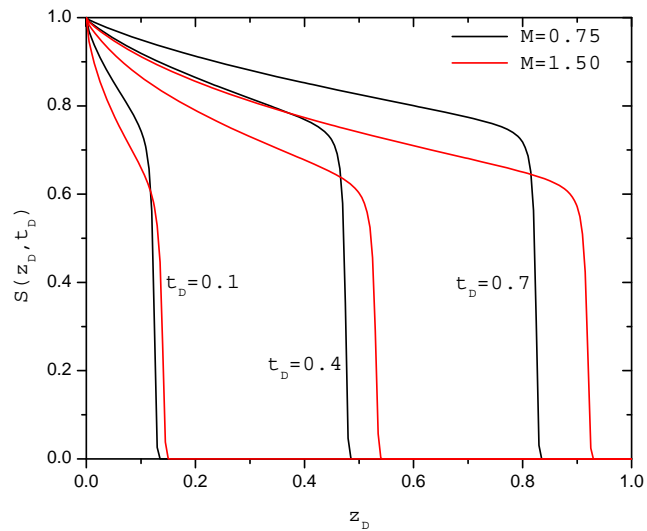


Figura 6.5: Perfiles de saturaciones para flujo viscoso.

Como se ha mencionado, el modelo de flujo está escrito en variables adimensionales, pero cuando estos resultados son transformados a variables reales, se observa que el tiempo de recuperación del desplazamiento también depende de la velocidad de inyección y de la longitud del medio poroso como lo muestra la ecuación (3.29), la cual es una variable muy importante para los procesos de escalamiento e indica que a medida que el gasto de inyección aumenta, los tiempos de recuperación disminuyen y cuando la longitud del medio (así como la porosidad efectiva) aumenta, los tiempos de recuperación aumentan (ya que hay mayor cantidad de fluido desplazado).

$$t_D = \frac{u_i}{\phi^* L} t \quad (3.29)$$

6.3 Efectos Convectivos

Para analizar la influencia de los efectos gravitacionales, se aumenta sólo el término gravitacional de acuerdo en la ecuación (3.41) y análogamente como en la ecuación (6.1) se

incorporan los datos de la tabla 6.1, y así la ecuación que describe la velocidad adimensional del agua en el proceso de desplazamiento convectivo es:

$$f_w = u_{wDG} + u_{wDV} = \frac{MS^2 - N_G(1-S)^2 S^2}{MS^2 + (1-S)^2} \quad (6.3)$$

$$N_G = \frac{k k_{rw}^* \Delta \gamma}{\mu_w u_t} \frac{\partial H_D}{\partial z_D}, \quad (3.35)$$

Al incorporar el término gravitacional en la ecuación de flujo fraccional se observa que el modelo adimensional depende de un número adimensional adicional que relaciona a las fuerzas gravitacionales con las viscosas, N_G . Con este número, además de incorporar el efecto de la viscosidad del agua, también se puede incluir el efecto de la velocidad de inyección, por lo que dos números adimensionales son variados en el estudio de los efectos convectivos.

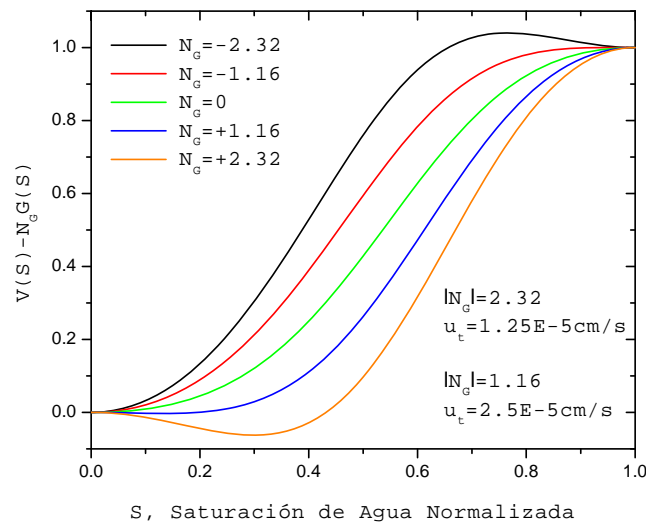


Figura 6.6: Curva de flujo fraccional para flujo convectivo a $\mu_w = 1 \text{ cp}$.

Debido a que la viscosidad del agua afecta a los dos números adimensionales de la manera que lo muestran las ecuaciones (3.35) y (3.39), entonces primero se varía la velocidad de inyección que sólo afecta al número adimensional de gravedad, y así fijando el valor de la viscosidad del agua a $\mu_w = 1.0 \text{ cp}$, y variando los valores de la velocidad de inyección de acuerdo a lo especificado en la figura 6.6, donde también se observa la influencia de la dirección de inyección como lo especifica el signo del número de gravedad, se puede identificar que cuando la inyección es en contra del campo gravitacional se obtienen mejores recuperaciones que en el caso contrario e incluso cuando no existe la influencia gravitacional. El gasto de inyección influye fuertemente en el desplazamiento, de manera que a medida que el gasto de inyección disminuye el número gravitacional aumenta, disminuyendo la influencia de las fuerzas viscosas. Entonces la influencia gravitacional es importante en el proceso de inyección de agua cuando la inyección es en sentido contrario a la gravedad y cuando el proceso se realiza a gastos bajos de inyección. Los tiempos de recuperación de aceite son la limitante técnica que determinan que tan bajo se puede inyectar agua en el yacimiento.

Como se puede observar de la figura 6.6, las curvas de flujo fraccional pueden tomar valores mayores que uno o menores que cero según sea la dirección de flujo, y lo anterior mencionado sólo se presenta cuando en el proceso de inyección de agua actúan las fuerzas gravitacionales y viscosas como lo muestra la ecuación (6.3). Como la función de flujo fraccional es igual en magnitud a la velocidad total adimensional del agua, y puede tomar valores mayores que uno y menores que cero, aparentemente la velocidad del agua a lo largo del medio poroso es la siguiente; la velocidad del agua puede ser mayor que la velocidad de inyección de agua o, que en algún punto y momento del proceso de inyección la velocidad del agua cambie de signo y por lo mismo cambie de dirección, pero analizando los perfiles de saturaciones tomados a un tiempo adimensional dado de la figura 6.7 y que corresponden a los casos de la figura 6.6, se observa que la curva de flujo fraccional que tiene valores mayores a uno representa un proceso de desplazamiento cuya saturación máxima es la correspondiente a un valor de flujo fraccional unitario, $S = 0.65$, y por otro lado, la curva de flujo fraccional que toma valores negativos representa un proceso con

saturación mínima distinta de cero, $S = 0.43$, que corresponde a un valor de flujo fraccional nulo como lo muestra las figuras 6.6 y 6.7.

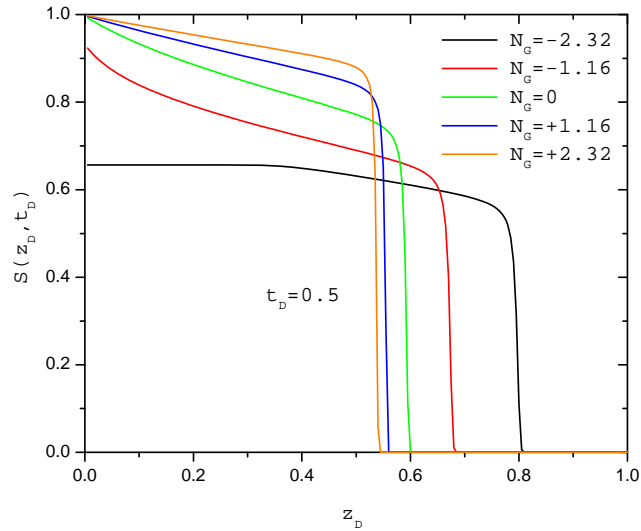


Figura 6.7: Perfiles de saturaciones para flujo convectivo con $\mu_w = 1.0$ cp a $t_D = 0.5$.

De los casos en los que interviene la gravedad, los que proporcionan mayores recuperaciones son en los que la gravedad se opone al desplazamiento, entonces para analizar la contribución de las fuerzas viscosas y gravitacionales a la velocidad del agua, se considera un caso, de los cinco mostrados en la figura 6.7, el cual considera el escenario con mayor intervención gravitacional para disminuir el movimiento de los fluidos, y así, obtener mayor recuperación de aceite. Entonces, tomando el caso en el cual $N_G = +2.32$, en la figura 6.8 se ilustra la evolución temporal del proceso de desplazamiento por medio de tres perfiles de saturaciones a diferentes tiempos adimensionales. La misma figura muestra la contribución de cada fuerza a la velocidad del agua, donde la componente gravitacional de la velocidad del agua actúa contra de la dirección de flujo y, por el peso de los fluidos tiende a retrasar el movimiento del agua, aumentado la aportación en la vecindad detrás del frente de desplazamiento, es decir en la zona de contacto agua-aceite, lo cual ocasiona la acumulación de los fluidos en la vecindad del frente, permitiendo que la

saturación en el frente sea alta. A pesar de que la gravedad juega un papel importante en este desplazamiento, el proceso tiene que ser dominado por las fuerzas viscosas para que el agua desplace al aceite como se observa en la figura 6.8 que compara de manera gráfica a las velocidades por fuerzas viscosas y gravitacionales (u_{wDV} y u_{wDG}).

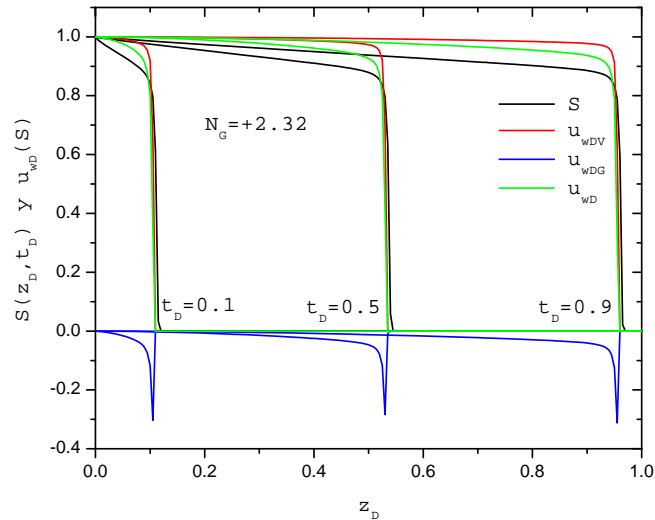


Figura 6.8: Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con, $N_G = 2.32$.

Analizando la componente gravitacional de la velocidad adimensional del agua podemos comparar su efecto en los casos donde $N_G = 2.32$ y $N_G = 1.16$ en las figuras 6.8 y 6.9 respectivamente, y claramente se observa que la influencia gravitacional sobre la velocidad del agua es menor en el segundo caso, en el cual el número de gravedad es menor.

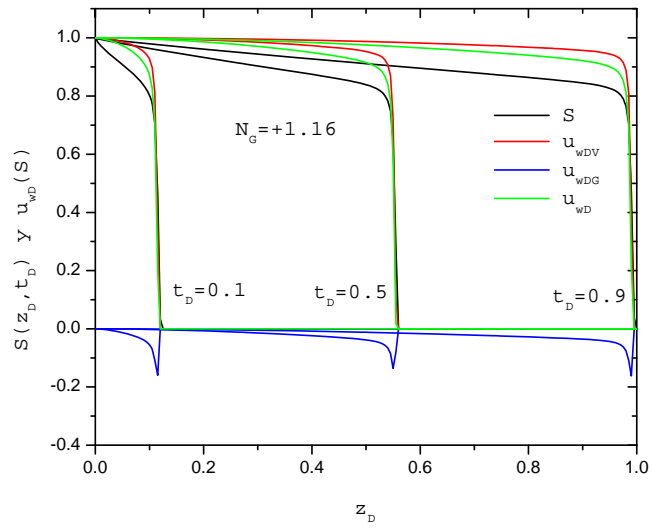


Figura 6.9: Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con, $N_G = 1.16$.

Para observar la influencia de la viscosidad del agua en el desplazamiento, considérese dos casos en los cuales sólo la viscosidad del agua varía. En párrafos anteriores se mencionó que la viscosidad del agua afecta a los números adimensionales de relación de movilidades en sus puntos finales y al número de gravedad, entonces las curvas de flujo fraccional muestran que M es el número adimensional que principalmente influye sobre el desplazamiento convectivo, como lo muestra la figura 6.10, que entre otros casos contempla dos con N_G positivo y se observa que el caso que proporciona mayor recuperación es el que tiene un N_G más pequeño. Lo anterior se debe a que dicho caso contiene una relación de movilidades en sus puntos finales menor. Entonces, si sólo se varía la viscosidad del agua en los desplazamientos convectivos con gravedad, el desplazamiento que proporciona mayor recuperación es el que incluya un sistema de fluidos con la viscosidad de agua más alta, a pesar de que el número de gravedad sea el más pequeño, lo cual aparentemente contradice lo concluido cuando sólo el gasto de inyección varía y la viscosidad del agua se mantiene constante.

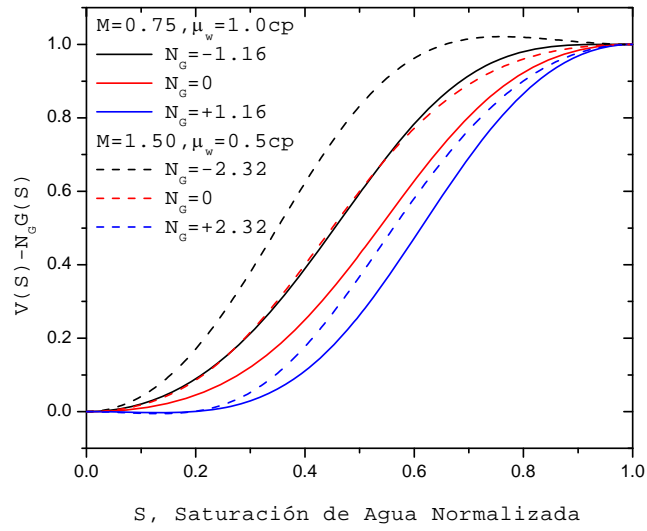


Figura 6.10: Curva de flujo fraccional para flujo convectivo con $u_t = 2.5 \cdot 10^{-5}$ cm/s.

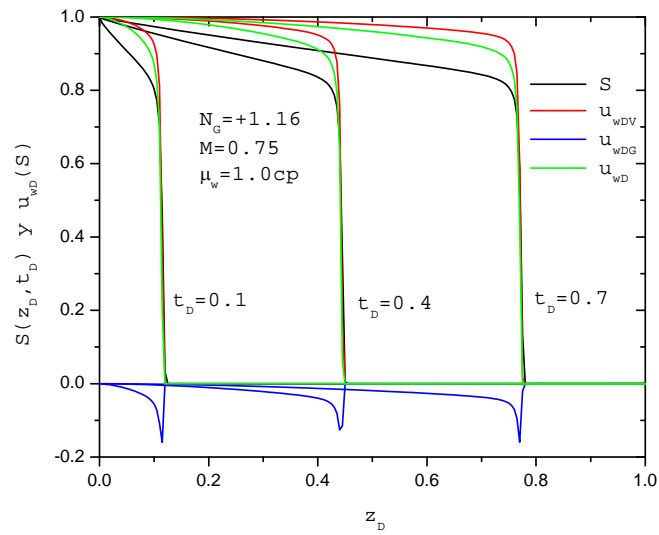


Figura 6.11: Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con $\mu_w = 1.0$ cp.

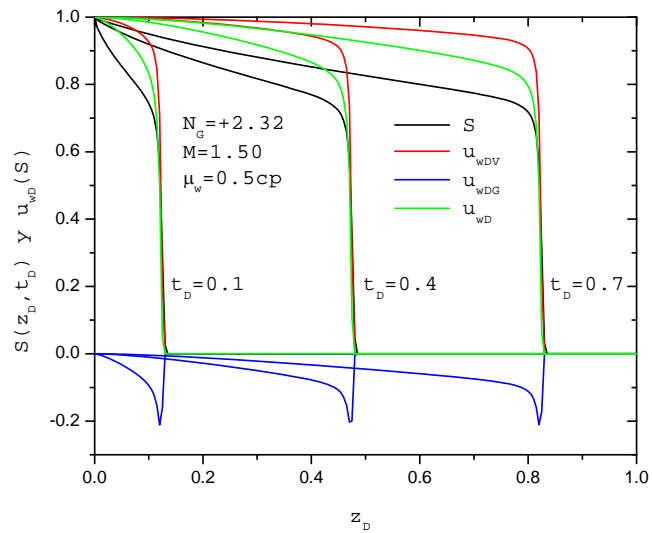


Figura 6.12: Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento convectivo con $\mu_w = 0.5 \text{ cp}$

Las figuras 6.11 y 6.12 muestran la evolución de los perfiles de saturaciones para los casos en estudio. Comparan de manera gráfica y corroboran que el proceso más eficiente es el que contempla la viscosidad de agua más alta. También presentan la contribución de la gravedad a la velocidad del agua y se puede observar que en el proceso más eficiente la influencia gravitacional es menor, lo que aparentemente contradice lo concluido cuando el gasto de inyección es el parámetro a variar

La figura 6.13 ilustra el comportamiento del tiempo adimensional en el momento del rompimiento para varios escenarios establecido por la viscosidad del agua y la velocidad de inyección. Como se ha mencionado, el tiempo adimensional es igual a la recuperación de aceite en forma de la cantidad de fluido extraído del medio poroso a dicho tiempo, debido a que los fluidos son incompresibles la cantidad de agua inyectada es igual a la cantidad de aceite recuperada. La figura 6.13 muestra el tiempo adimensional requerido para que ocurra la irrupción en el flujo gravitacional/viscoso para varios valores de velocidad de inyección y para tres valores de viscosidad del agua inyectada. Dicha figura corrobora lo comentado

en los párrafos anteriores donde se discutió la influencia al variar el gasto de inyección de agua o la viscosidad del agua inyectada, en el movimiento de los fluidos y en la recuperación de aceite durante el flujo gravitacional/viscoso. Es decir, para un valor de viscosidad de agua dado, se observa que la recuperación aumenta en la medida que la velocidad de inyección disminuye. También se concluyó que para una velocidad de inyección dada el escenario que proporciona mayor recuperación es el que corresponde a la mayor viscosidad de agua, a pesar de que el número de gravedad sea el menor, como lo muestran los datos de la tabla 6.2, entonces se puede concluir que para casos con viscosidades de agua mayores los efectos gravitacionales son menores, en flujo gravitacional/viscoso.

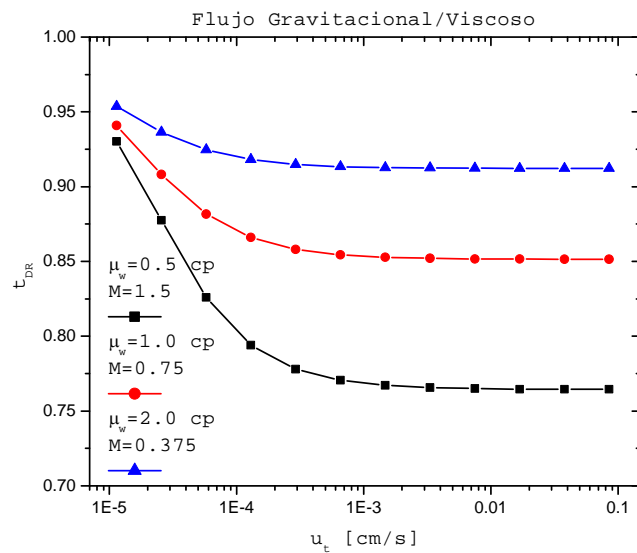


Figura 6.13: Tiempo adimensional en el momento del rompimiento, t_{DR} , para varias velocidades de inyección.

	$M = 1.5$		$M = 0.75$		$M = 0.375$	
u_t [cm/s]	N_G	t_{DR}	N_G	t_{DR}	N_G	t_{DR}
1.14E-05	5.100	0.9303	2.550	0.9409	1.275	0.9537
2.56E-05	2.267	0.8775	1.133	0.9082	0.567	0.9365
5.77E-05	1.007	0.8260	0.504	0.8816	0.252	0.9246
1.30E-04	0.448	0.7940	0.224	0.866	0.112	0.9181
2.92E-04	0.199	0.7780	0.099	0.8581	0.050	0.9149
6.57E-04	0.088	0.7705	0.044	0.8545	0.022	0.9134
1.48E-03	0.039	0.7671	0.020	0.8528	0.010	0.9128
3.33E-03	0.017	0.7656	0.009	0.8521	0.004	0.9125
7.48E-03	0.008	0.7650	0.004	0.8517	0.002	0.9124
1.68E-02	0.003	0.7646	0.002	0.8516	0.001	0.9123
3.79E-02	0.002	0.7646	0.001	0.8515	0.000	0.9122
8.52E-02	0.001	0.7645	0.000	0.8514	0.000	0.9122
\bar{S} Ec. (6.2)	0.000	0.7748	0.000	0.8610	0.000	0.9205

Tabla 6.2: Datos de la figura 6.13. La última fila es \bar{S} de la ecuación (6.2).

6.4 Efectos Capilares y Viscosos

A continuación se agrega el fenómeno capilar al proceso de flujo, el cual tiende a suavizar el perfil de desplazamiento y es el factor que principalmente minimiza la eficiencia de barrido en un proceso de inyección de agua [3]. La ecuación (6.4) indica que al considerar a los efectos capilares se introduce un nuevo número adimensional N_{PE} , el cual relaciona a los efectos viscosos con los capilares, se puede observar de la ecuación (3.34) que éste número adimensional también depende de la viscosidad del agua y del gasto de inyección, así como de la longitud del medio poroso y de la presión capilar. Tomando como base los datos de la tabla 6.1, en la ecuación (6.4) y con la libertad de variar la velocidad de inyección, la viscosidad del agua y la longitud del medio poroso, se puede analizar el efecto de dichos parámetros en la recuperación de aceite cuando las fuerzas capilares están presentes en el proceso de inyección.

$$u_{wD} = -\frac{1}{N_{pe}} \frac{(1-S)^2 S^1}{(1-S)^2 + MS^2} \frac{\partial S}{\partial z_D} + \frac{MS^2}{MS^2 + (1-S)^2} \quad (6.4)$$

$$N_{pe} = \frac{u_t \mu_w L}{k k_{rw}^* p_c^*}, \quad (3.34)$$

	$M = 1.5$		$M = 0.75$		$M = 0.375$	
u_t [cm/s]	N_{PE}	t_{DR}	N_{PE}	t_{DR}	N_{PE}	t_{DR}
1.00E-06	0.007	0.0465	0.014	0.0655	0.027	0.0907
2.25E-06	0.015	0.0678	0.030	0.0955	0.061	0.1359
5.06E-06	0.034	0.1015	0.068	0.1431	0.137	0.2028
1.14E-05	0.077	0.1516	0.154	0.2139	0.308	0.3018
2.56E-05	0.173	0.2244	0.346	0.3160	0.692	0.4433
5.77E-05	0.390	0.3267	0.779	0.4547	1.558	0.6180
1.30E-04	0.876	0.4530	1.753	0.6063	3.506	0.7606
2.92E-04	1.972	0.5745	3.944	0.7210	7.888	0.8397
6.57E-04	4.437	0.6609	8.874	0.7867	17.748	0.8782
1.48E-03	9.983	0.7115	19.966	0.8202	39.933	0.8963
3.33E-03	22.462	0.7383	44.924	0.8366	89.848	0.9047
7.48E-03	50.540	0.7518	101.079	0.8444	202.159	0.9087
1.68E-02	113.714	0.7585	227.429	0.8482	454.858	0.9106
3.79E-02	255.857	0.7617	511.715	0.8499	1023.430	0.9115
8.52E-02	575.679	0.7632	1151.359	0.8508	2302.717	0.9119

Tabla 6.3a: Datos de la figura 6.14, para $L = 1m$.

El tener al modelo no-lineal de flujo en variables adimensionales tiene la ventaja de que el tiempo adimensional en el momento de la irrupción, t_{DR} , es igual en magnitud a la saturación promedio del perfil de saturaciones a dicho tiempo, \bar{S}_R . Entonces, en el momento de la irrupción y a una velocidad de inyección dada, una saturación promedio, $\bar{S}_R = t_{DR}$, es determinada, y a su vez también la recuperación de aceite en el momento de la irrupción.

u_t [cm/s]	$M = 1.5$		$M = 0.75$		$M = 0.375$	
	N_{PE}	t_{DR}	N_{PE}	t_{DR}	N_{PE}	t_{DR}
1.00E-06	0.034	0.1015	0.068	0.1431	0.135	0.2013
2.25E-06	0.076	0.1507	0.152	0.2126	0.304	0.2999
5.06E-06	0.171	0.2231	0.342	0.3142	0.684	0.4409
1.14E-05	0.385	0.3248	0.769	0.4522	1.539	0.6154
2.56E-05	0.866	0.4511	1.731	0.6041	3.462	0.7589
5.77E-05	1.948	0.5729	3.895	0.7196	7.791	0.8389
1.30E-04	4.382	0.6599	8.764	0.7860	17.529	0.8778
2.92E-04	9.860	0.7109	19.720	0.8199	39.440	0.8961
6.57E-04	22.185	0.7380	44.370	0.8364	88.739	0.9046
1.48E-03	49.916	0.7517	99.832	0.8444	199.663	0.9086
3.33E-03	112.311	0.7584	224.621	0.8481	449.242	0.9105
7.48E-03	252.699	0.7616	505.397	0.8499	1010.795	0.9115
1.68E-02	568.572	0.7631	1137.144	0.8508	2274.289	0.9119
3.79E-02	1279.287	0.7638	2558.575	0.8511	5117.150	0.9121
8.52E-02	2878.397	0.7642	5756.793	0.8513	11513.587	0.9122

Tabla 6.3b: Datos de la figura 6.14, para $L = 5m$.

En la ecuación (3.34) se observa que al aumentar la velocidad de inyección se aumenta el número adimensional de Peclet, el cual determina la importancia de las fuerzas capilares en el desplazamiento. El desplazamiento convectivo es mayor cuando el término de la segunda derivada en el modelo de flujo es despreciable, entonces podemos decir que cuando el número de Peclet tiende a infinito el desplazamiento tiende a ser completamente convectivo. Lo anterior es ilustrado en la figura 6.14, y en los datos de la tabla 6.3, donde se observa que a velocidades de inyección altas el flujo es dominado completamente por los efectos viscosos y que a medida que la longitud del medio y/o la viscosidad del agua inyectada aumentan, la zona dominada por fuerzas viscosas en la figura 6.14 aumenta, permitiendo que se empleen gastos de inyección más bajos con mejores recuperaciones.

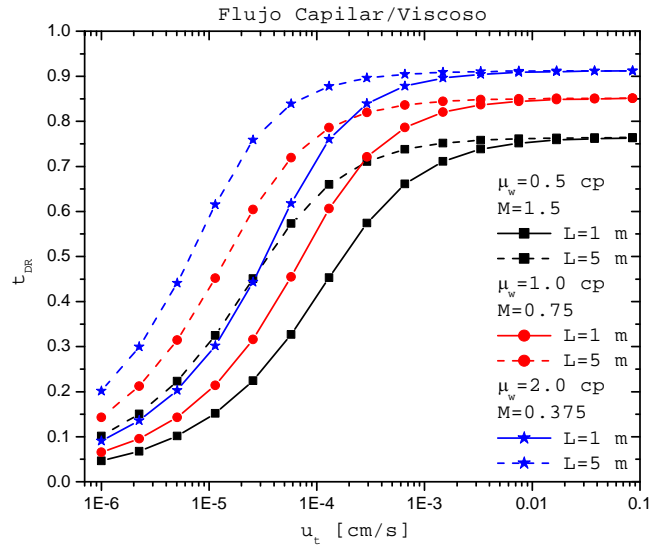


Figura 6.14: Tiempo adimensional en el momento de irrupción, t_{DR} , para varias velocidades de inyección, ver tabla 6.3.

La relación que se observa entre la saturación promedio al momento de la irrupción y la velocidad de inyección, puede interpretarse como una relación entre la saturación promedio y el número de Peclet, correspondiente a la velocidad de inyección, como lo muestran los datos de la tabla 6.3. Por lo tanto, las curvas de la figura 6.14, son similares a las reportadas por Rapoport y Leas [22], las cuales relacionan la recuperación de aceite en el momento del rompimiento con un factor de escalamiento, $Lu_t \mu_w$, análogo al número del Peclet, ecuación (3.34). Estos autores mencionan que la forma de las curvas es parecida si se varía por separado cualquiera de los tres parámetros que intervienen en su factor de escalamiento. Por lo anterior, se puede esperar que al variar sólo un parámetro a la vez, en el número de Peclet se obtengan curvas con formas similares.

El límite superior para la saturación promedio en el momento del rompimiento debe ser el obtenido cuando sólo se considera a las fuerzas viscosas. Las saturaciones promedio obtenidas para estos casos son las correspondientes a efectos capilares despreciables, y se puede decir que por más que el número de Peclet aumente la saturación promedio tenderá a ser la obtenida para el desplazamiento viscoso (ver tabla 6.3).

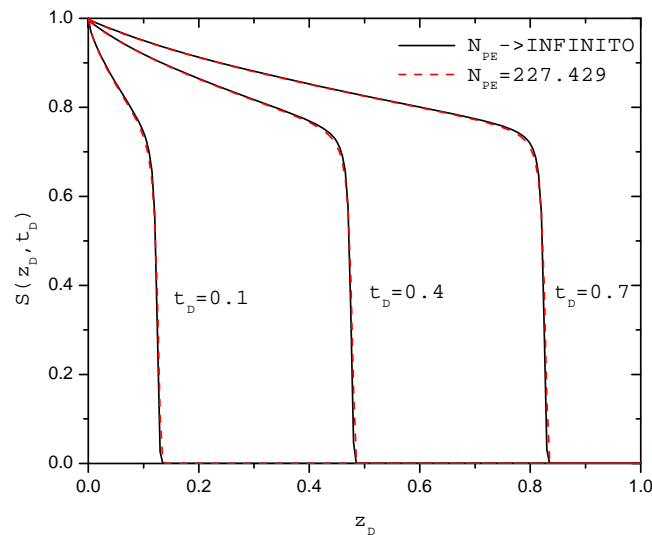


Figura 6.15: Perfiles de saturaciones que compara desplazamiento viscoso con desplazamiento viscoso/capilar.

Para observar el efecto de un número de Peclet grande en el perfil de saturaciones para el flujo capilar/viscoso considérese el caso de la figura y tabla anterior que corresponden al número de Peclet de 227.42 con longitud del medio de un metro y viscosidad de agua de $1cp$. La figura 6.15 ilustra tres perfiles que comparan de forma gráfica a los perfiles de saturaciones para dicho número de Peclet con los perfiles para el desplazamiento viscosos a los mismos tiempos adimensionales y se puede ver que los perfiles prácticamente son similares. Los valores de la velocidad de inyección de agua en los cuales dominan los efectos viscosos disminuyen en la medida que la viscosidad del agua inyectada y la longitud del medio aumentan, como lo muestra la figura 6.14.

En los perfiles de saturaciones mostrados hasta este punto, la importancia de los efectos capilares ha sido despreciable. En el siguiente caso se considera un escenario en el cual las contribuciones capilares y viscosas son comparables en orden de magnitud, y para obtener este caso se requiere que la velocidad de inyección de agua sea muy baja, como lo muestra la figura 6.16, que también ilustra la evolución de los perfiles de saturaciones en tres

tiempos adimensionales. Igualmente muestra la contribución de los efectos capilares y viscosos en la velocidad adimensional del agua, así como la distribución de velocidades a lo largo del medio poroso. La componente de la velocidad por efectos capilares tiene forma de campana y está sesgada hacia la zona de transición del frente de desplazamiento, lo contrario ocurre con la curva de distribución de velocidades por efecto viscosos; por lo que se puede decir de esta figura que en las zonas delanteras del perfil de saturaciones las fuerzas capilares dominan al flujo, mientras que las fuerzas viscosas dominan en las zonas traseras del perfil de saturaciones. De la misma figura se puede observar que al principio del desplazamiento, éste es dominado por los efectos capilares y en la medida que evoluciona el proceso, los efectos viscosos dominan el flujo. Para ver la influencia de la viscosidad del agua sobre la contribución capilar a la velocidad del agua (ver el primer término de la ecuación 6.4), ésta se reduce a la mitad, 0.5 cp , y como muestra la figura 6.17 se observa que el número de Peclet es también reducido a la mitad, y por lo mismo la contribución capilar es incrementada, lo que ocasiona que el desplazamiento sea menos eficiente que el anterior, figura 6.16. También se ilustra que los efectos capilares dominan ampliamente al principio del flujo y a pesar de que dominan durante todo el proceso, su influencia disminuye a medida que avanza el desplazamiento.

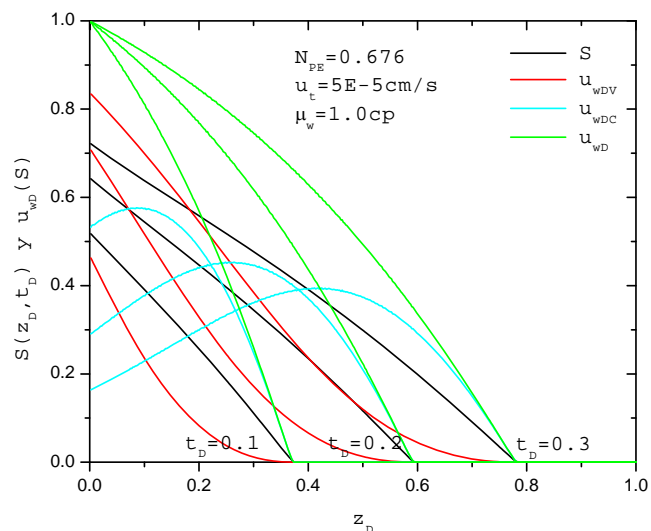


Figura 6.16: Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento viscoso/capilar.

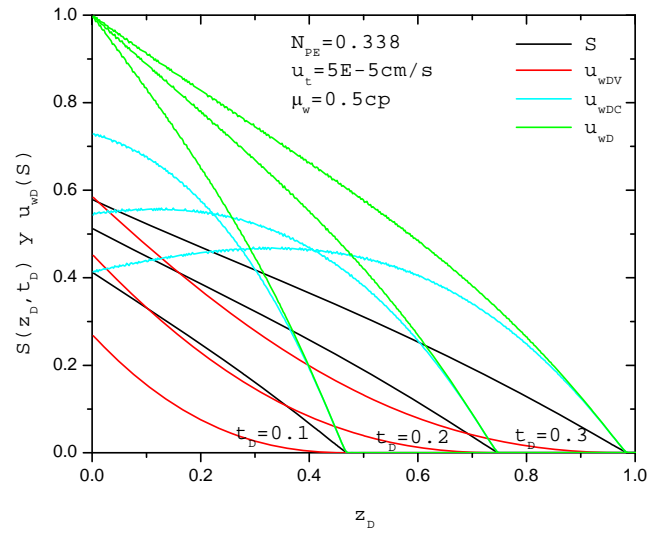


Figura 6.17: Perfiles de saturaciones y velocidades adimensionales del agua durante el desplazamiento viscoso/capilar dominado por capilaridad.

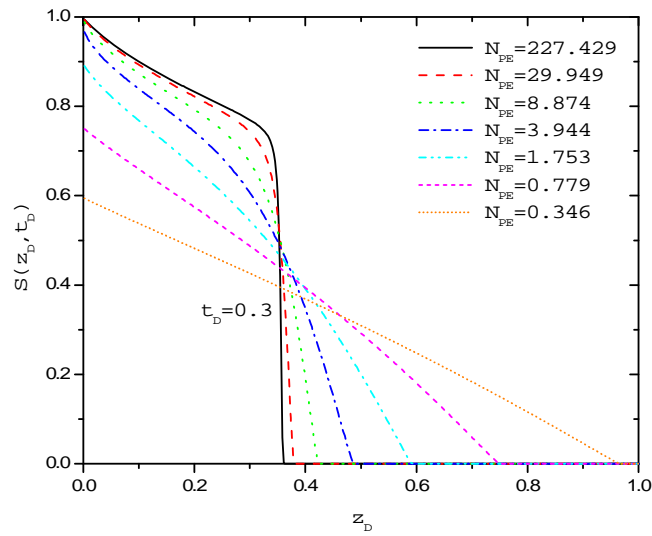


Figura 6.18: Transición de perfiles de saturaciones capilares hasta viscosos.

Del las figuras 6.16 y 6.17 para gastos de inyección bajos, en las cuales los efectos capilares son dominantes, se observa que los gradientes de saturaciones son “casi constantes” resultando en perfiles de saturaciones casi lineales, y a medida que evoluciona el proceso los valores de saturaciones incrementan generando curvas de saturaciones en cada tiempo que son casi paralelas entre sí, lo cual concuerda con lo mencionado en la referencia [39].

Finalmente la figura 6.18 incluye perfiles de saturaciones para un tiempo adimensional dado de $t_D = 0.3$, y muestran la transición de perfiles controlados por fuerzas capilares a perfiles controlados por fuerzas viscosas. Por la definición matemática del tiempo adimensional, (3.29), en un proceso de flujo a un tiempo (t) dado el volumen adimensional total de agua inyectado en un medio poroso es igual al tiempo adimensional correspondiente al mismo tiempo (t), por lo que, el área cubierta por el perfil de saturaciones en el tiempo (t), es igual en magnitud al tiempo adimensional, t_D . Entonces, como todos los perfiles de saturaciones mostrados en la figura 6.18 son calculados para el mismo tiempo adimensional, los volúmenes adimensionales totales de agua inyectados al medio poroso son los mismos, a pesar de que los procesos de flujo sean diferentes según lo especifican los valores del número de Peclet en cada proceso de dicha figura, por lo que al variar el número de Peclet lo que cambia es la forma en la que se distribuye el perfil de saturaciones a lo largo del medio poroso.

Analizando la figura 6.18 se observa que en un proceso de flujo capilar/viscoso, al aumentar el número de Peclet el término difusivo disminuye su influencia en la ecuación de flujo y por consiguiente en su solución, de manera que; a números de Peclet muy grandes (lo suficiente para que el término difusivo casi se ignore) el proceso de flujo es controlado prácticamente por las fuerzas viscosas y la forma del perfil de saturaciones corresponde a un perfil discontinuo casi de tipo pistón con recuperaciones de aceite altas. Por el contrario, al disminuir el número de Peclet la influencia del término difusivo en la ecuación de flujo aumenta, incrementando las contribuciones capilares que suavizan la forma del perfil de saturaciones y reducen las recuperaciones de aceite. Los números de Peclet usados para la figura 6.18 son mostrados en la tabla 6.3a para el caso de $M = 0.75$.

6.5 Efectos Capilares, Gravitacionales y Viscosos

En esta sección se analizan los resultados de los efectos capilares, gravitacionales y viscosos cuando actúan simultáneamente en el proceso de inyección de agua. La recuperación obtenida del proceso de inyección es determinada por la simulación del modelo de flujo desarrollado en el capítulo 3, donde se observó que no se puede determinar de manera directa la contribución de cada fuerza a la recuperación total. Sin embargo, sí se puede determinar la contribución de cada fuerza a la velocidad adimensional del agua según la ecuación (3.41). Si se desea determinar el incremento en la recuperación al considerar o no a fuerzas capilares y/o gravitacionales, esto puede evaluarse calculando la diferencia de las recuperaciones cuando las fuerzas en cuestión son consideradas y cuando no lo son.

	$M = 1.5$			$M = 0.75$			$M = 0.375$		
u_t [cm/s]	N_{PE}	N_G	t_{DR}	N_{PE}	N_G	t_{DR}	N_{PE}	N_G	t_{DR}
1.00E-06	0.007	58.090	0.0490	0.014	29.045	0.0689	0.027	14.523	0.0952
2.25E-06	0.015	25.818	0.0711	0.030	12.909	0.1001	0.061	6.454	0.1425
5.06E-06	0.034	11.475	0.1064	0.068	5.737	0.1500	0.137	2.869	0.2125
1.14E-05	0.077	5.100	0.1589	0.154	2.550	0.2241	0.308	1.275	0.3160
2.56E-05	0.173	2.267	0.2347	0.346	1.133	0.3302	0.692	0.567	0.4624
5.77E-05	0.390	1.007	0.3403	0.779	0.504	0.4720	1.558	0.252	0.6359
1.30E-04	0.876	0.448	0.4672	1.753	0.224	0.6205	3.506	0.112	0.7696
2.92E-04	1.972	0.199	0.5849	3.944	0.099	0.7285	7.888	0.050	0.8433
6.57E-04	4.437	0.088	0.6665	8.874	0.044	0.7901	17.748	0.022	0.8796
1.48E-03	9.983	0.039	0.7141	19.966	0.020	0.8217	39.933	0.010	0.8968
3.33E-03	22.462	0.017	0.7395	44.924	0.009	0.8372	89.848	0.004	0.9049
7.48E-03	50.540	0.008	0.7524	101.079	0.004	0.8447	202.159	0.002	0.9088
1.68E-02	113.714	0.003	0.7587	227.429	0.002	0.8483	454.858	0.001	0.9106
3.79E-02	255.857	0.002	0.7618	511.715	0.001	0.8500	1023.430	0.000	0.9115
8.52E-02	575.679	0.001	0.7632	1151.359	0.000	0.8508	2302.717	0.000	0.9119

Tabla 6.4a: Datos de la figura 6.19, para $L = 1m$ y $N_{CG} = 0.3924$.

u_t [cm/s]	$M = 1.5$			$M = 0.75$			$M = 0.375$		
	N_{PE}	N_G	t_{DR}	N_{PE}	N_G	t_{DR}	N_{PE}	N_G	t_{DR}
1.00E-06	0.034	58.090	0.1333	0.068	29.045	0.1876	0.135	14.523	0.2628
2.25E-06	0.076	25.818	0.1963	0.152	12.909	0.2763	0.304	6.454	0.3882
5.06E-06	0.171	11.475	0.2873	0.342	5.737	0.4016	0.684	2.869	0.5505
1.14E-05	0.385	5.100	0.4058	0.769	2.550	0.5490	1.539	1.275	0.7004
2.56E-05	0.866	2.267	0.5292	1.731	1.133	0.6745	3.462	0.567	0.7999
5.77E-05	1.948	1.007	0.6259	3.895	0.504	0.7561	7.791	0.252	0.8558
1.30E-04	4.382	0.448	0.6882	8.764	0.224	0.8025	17.529	0.112	0.8847
2.92E-04	9.860	0.199	0.7244	19.720	0.099	0.8270	39.440	0.050	0.8990
6.57E-04	22.185	0.088	0.7441	44.370	0.044	0.8395	88.739	0.022	0.9059
1.48E-03	49.916	0.039	0.7544	99.832	0.020	0.8458	199.663	0.010	0.9092
3.33E-03	112.311	0.017	0.7596	224.621	0.009	0.8488	449.242	0.004	0.9108
7.48E-03	252.699	0.008	0.7622	505.397	0.004	0.8502	1010.795	0.002	0.9116
1.68E-02	568.572	0.003	0.7634	1137.144	0.002	0.8509	2274.289	0.001	0.9119
3.79E-02	1279.287	0.002	0.7640	2558.575	0.001	0.8512	5117.150	0.000	0.9121
8.52E-02	2878.397	0.001	0.7642	5756.793	0.000	0.8513	11513.587	0.000	0.9122

Tabla 6.4b: Datos de la figura 6.19, para $L = 5\text{ m}$ y $N_{CG} = 1.9620$.

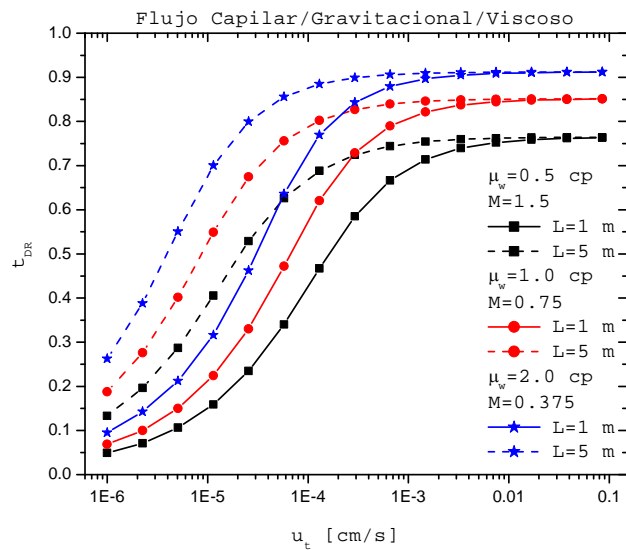


Figura 6.19: Recuperación de aceite en el momento de la irrupción, t_{DR} , para varios escenarios de μ_w , L y u_t , en el flujo capilar/gravitacional/viscoso.

El primer análisis de esta sección se basa en analizar el tiempo adimensional en el momento de la irrupción como las recuperaciones finales, en procesos influenciados simultáneamente por las tres fuerzas principales, bajo diferentes escenarios establecidos por la viscosidad del agua, la longitud del medio poroso y la velocidad de inyección de agua.

Los resultados de la figura 6.19 muestran el comportamiento de la recuperación de aceite bajo diferentes escenarios, y se observa que para un valor de viscosidad del agua y de longitud del medio poroso, el incremento en la velocidad de inyección del agua aumenta las recuperaciones hasta cierto límite establecido por la viscosidad de agua sin importar la longitud del medio poroso. Lo anterior establece que la viscosidad del agua es el parámetro más importante para obtener recuperaciones altas a velocidades de inyección altas que establezcan flujo viscoso, es decir, que minimicen los efectos capilares y gravitacionales. La longitud del medio tiene un papel importante en zonas donde los efectos gravitacionales no son minimizados, es decir, en zonas con velocidades de inyección de agua donde el flujo viscoso no domine completamente. A medida que la longitud del medio aumenta las recuperaciones son favorecidas, debido a que el aumento de la longitud del medio minimiza a los efectos capilares permitiendo que los efectos gravitacionales intervengan favorablemente en la recuperación. Entonces la disminución de la velocidad de inyección del agua disminuye los efectos viscosos, ocasionando que el impacto de los efectos capilares y gravitacionales en el flujo sea mayor; pero para que los efectos gravitacionales sean más favorecidos que los capilares, se aumenta la longitud del medio poroso según lo observado en la figura 6.19. Cabe mencionar que estas observaciones son relevantes en el diseño e interpretación de pruebas de laboratorio, donde los citados efectos son considerados.

Para observar los incrementos en la recuperación de aceite al considerar los efectos gravitacionales, considérense a los escenarios con longitud del medio de cinco metros (en los cuales la gravedad tiene mayor impacto que los correspondientes a un metro de longitud). La figura 6.20 muestra los resultados de las recuperaciones de aceite en el momento de la irrupción, cuando se considera la influencia de la gravedad y cuando es

ignorada. Se observa que la presencia de la gravedad aumenta la recuperación principalmente en zonas de velocidades de inyección intermedias, donde los flujos viscosos y capilares no son los dominantes como en altas y bajas velocidades respectivamente.

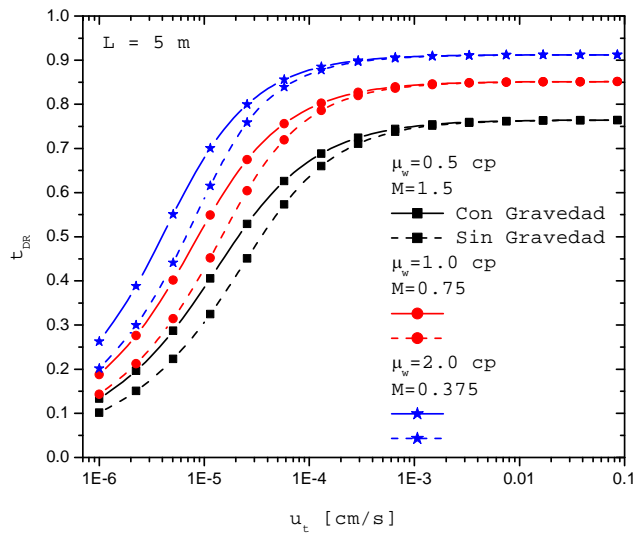


Figura 6.20 Recuperación de aceite en el momento de la irrupción, t_{DR} , para varios escenarios de μ_w , u_t , en el flujo capilar/gravitacional/viscoso y capilar/viscoso.

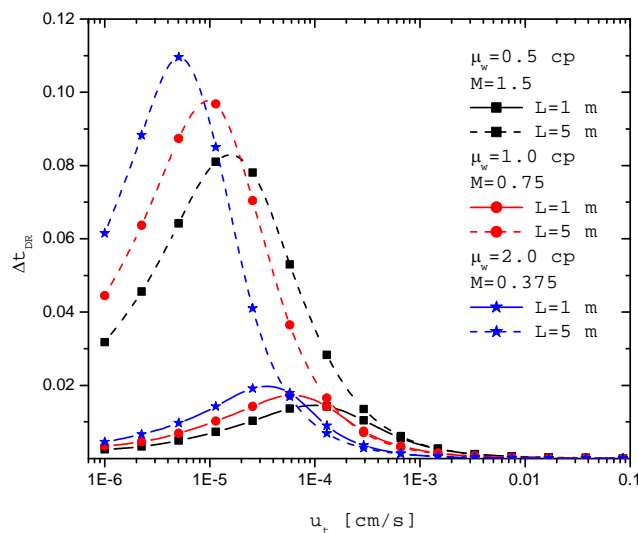


Figura 6.21 Incremento en t_{DR} por la presencia de fuerzas gravitacionales, en los escenarios de la figura 6.18.

Para confirmar lo anterior, la figura 6.21 muestra el incremento en la recuperación obtenido por considerar a los efectos gravitacionales en el flujo capilar/viscoso. El análisis abarca los escenarios de la figura 6.19 y se ratifica que en los medios porosos largos las contribuciones gravitacionales son superiores y los mayores incrementos ocurren a velocidades de inyección más bajas que en los medios más cortos. La influencia de la viscosidad del agua en el incremento de la recuperación de aceite consiste en emplear viscosidades de agua bajas para obtener incrementos de recuperación mayores.

En esta sección se ha analizado el proceso de inyección de agua por medio de la recuperación de aceite en el momento del rompimiento y para ampliar todo lo anterior se estudia el efecto que el gasto de inyección de agua, la viscosidad del agua y la longitud del medio poroso tienen sobre las contribuciones de las tres fuerzas al desplazamiento de agua y aceite. Estos tres parámetros mencionados influyen sobre los números adimensionales que rigen la dinámica de fluidos en el desplazamiento de aceite por agua como se ha visto a lo largo de este capítulo, por lo que a través de los números adimensionales se establecen los escenarios de producción y las tendencias de cada fuerza sobre el desplazamiento. Para estudiar las contribuciones de las tres fuerzas que actúan en los procesos de flujo de fluidos en medios porosos se emplea la ecuación (6.5) de la velocidad adimensional total de agua, u_{wD} , la cual es la suma algebraica de la velocidad adimensional por contribuciones capilares u_{wDC} , gravitacionales u_{wDG} , y viscosas u_{wDV} a la velocidad adimensional total de agua.

$$u_{wD} = -\frac{1}{N_{Pe}} \frac{(1-S)^2 S^1}{(1-S)^2 + MS^2} \frac{\partial S}{\partial z_D} - N_G \frac{(1-S)^2 S^2}{MS^2 + (1-S)^2} + \frac{MS^2}{MS^2 + (1-S)^2} \quad (6.5)$$

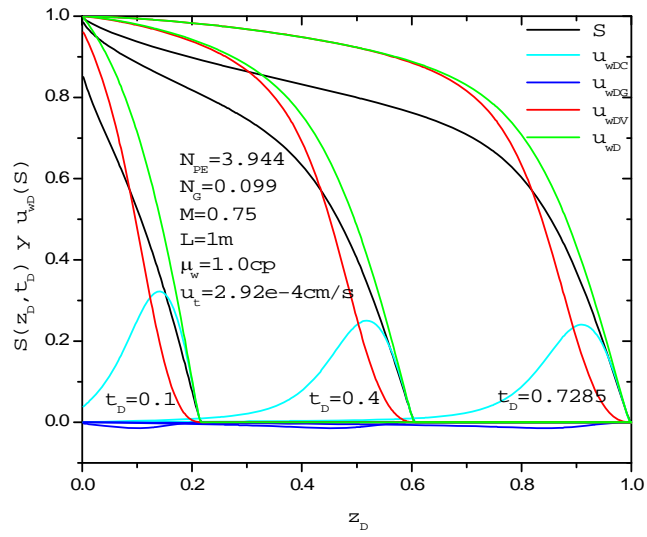


Figura 6.22: Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 3.944$, $N_G = 0.099$ y $M = 0.75$.

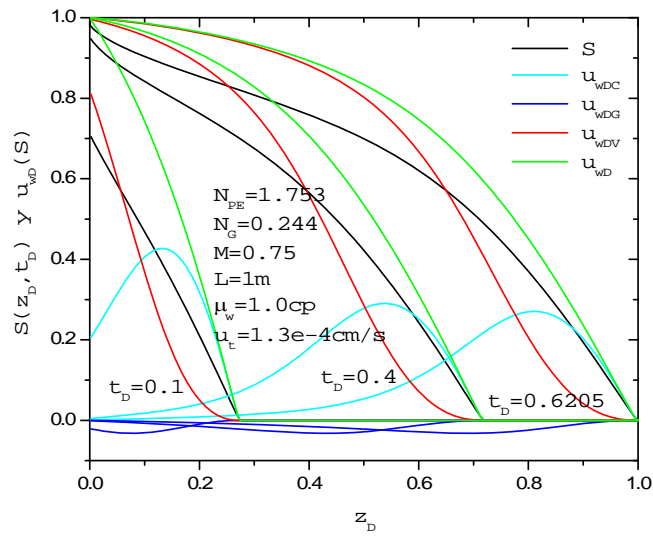


Figura 6.23: Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 1.753$, $N_G = 0.244$ y $M = 0.75$.

En la figura 6.19 se observó que, para una viscosidad de agua y longitud del medio poroso dados, el gasto de inyección de agua influye en la recuperación de modo que al disminuir el gasto de inyección de agua, las fuerzas viscosas pierden influencia en el desplazamiento, disminuyendo así, la recuperación de aceite al momento del rompimiento. Las figuras 6.22 y 6.23 muestran el efecto de variar el gasto de inyección de agua en el perfil de saturaciones, velocidad adimensional del agua y en las tres contribuciones a la velocidad adimensional de agua, y se observa que cuando el gasto de inyección disminuye el número adimensional de Peclet disminuye también, mientras que el número adimensional de gravedad aumenta. A pesar que el número de gravedad aumenta la recuperación disminuye debido al decremento en el número de Peclet que incrementa las contribuciones difusivas y disminuye las convectivas, haciendo menos eficiente el proceso de recuperación de aceite.

Los perfiles de saturaciones de las figuras 6.22 y 6.23 ilustran que al disminuir el gasto de inyección, los perfiles se tornan menos convectivos, incrementando las contribuciones capilares y gravitacionales. En la sección 6.3 de efectos convectivos se mencionó que el incremento en las fuerzas gravitacionales causan un incremento en la recuperación de aceite, pero cuando las fuerzas capilares son apreciables y se intensifican por la disminución del gasto de inyección de agua, las fuerzas de gravedad ayudan a que los decrementos en la recuperación por la presencia de capilaridad sean menores, como lo muestra la figura 6.20.

Cuando la capilaridad está presente en procesos de flujo bifásico, la longitud del medio poroso juega un papel importante, influyendo en la aportación del término difusivo en la ecuación de flujo; y por lo tanto en las fuerzas capilares y convectivas. A diferencia del efecto que ocasiona el gasto de inyección de agua, la longitud del medio poroso sólo afecta al número adimensional de Peclet. Las figuras 6.23 y 6.24 ilustran el efecto de la longitud en el proceso de desplazamiento, de manera que al aumentar L las contribuciones de las fuerzas capilares disminuyen y las convectivas aumentan por el aumento en el número de Peclet. Las figuras también muestran que la recuperación de aceite es mayor cuando se aumenta la longitud (a invadir por agua) de un metro a cinco metros y la recuperación aumenta de 0.6005 a 0.8025. El incremento en la recuperación se debe a que el

desplazamiento es más convectivo en el medio de cinco metros haciendo un barrido de aceite más eficiente.

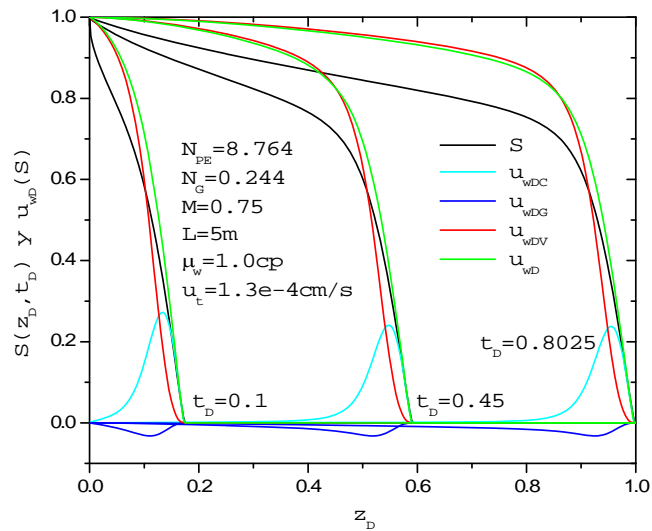


Figura 6.24: Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 8.764$, $N_G = 0.244$ y $M = 0.75$.

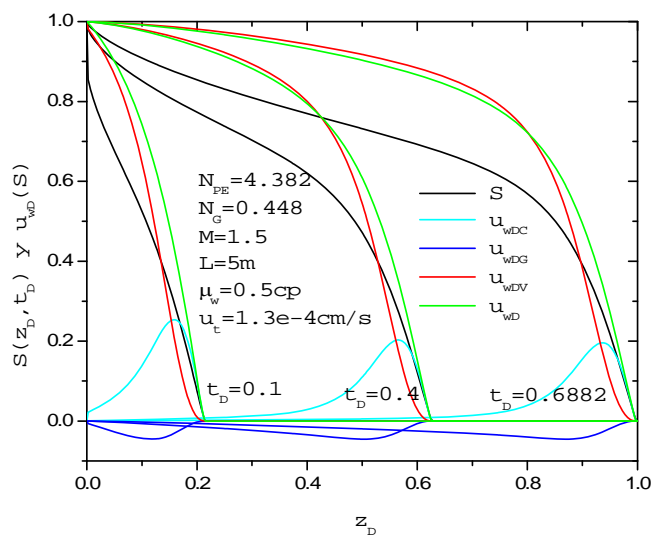


Figura 6.25: Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 4.382$, $N_G = 0.448$ y $M = 1.5$.

Como último parámetro a analizar se considera a la viscosidad del fluido inyectado. A lo largo de este capítulo se ha comentado que lo conveniente para el proceso de inyección de agua en un yacimiento de aceite es que la viscosidad del agua inyectada sea lo suficientemente baja para permitir que el aceite se mueva con mayor facilidad que ésta. En esta sección se estudia el efecto de la viscosidad del agua en el proceso de desplazamiento cuando las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas están presentes. La viscosidad del agua es un parámetro que influye en los tres números adimensionales mencionados en este capítulo; por lo que al variar dicho parámetro, los tres números adimensionales cambian como lo muestran las figuras 6.24 y 6.25, en donde también se observa que el perfil de saturaciones es menos convectivo y por lo mismo la recuperación disminuye de 0.8025 a 0.6882 cuando la viscosidad del agua disminuye de 1 *cp* a 0.5 *cp*. Además, al bajar la viscosidad del agua inyectada, las fuerzas capilares y gravitacionales se manifiestan con mayor intensidad, haciendo que las contribuciones viscosas disminuyan, como lo muestran dichas figuras.

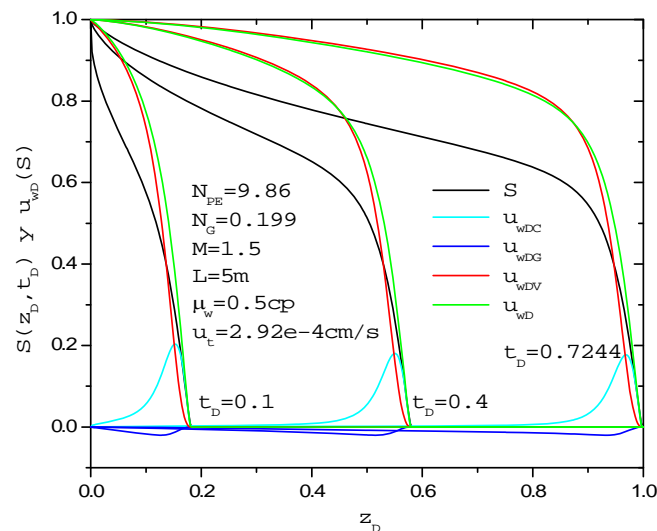


Figura 6.26: Perfil de saturaciones para $N_{PE} = 9.86$, $N_G = 0.199$ y $M = 1.5$.

Durante esta sección se observa que cuando las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas están presentes en el proceso de inyección de agua, el incremento en las contribuciones

gravitacionales por el aumento de la longitud a invadir por agua no es grande, como lo muestra la definición del número de gravedad que depende de la diferencia de densidades del par fluidos a desplazar. Entonces, al desplazar agua y aceite las contribuciones gravitacionales serán menores que al desplazar un sistema líquido/gas, en el cual las contribuciones gravitacionales se espera que sean grandes. Sin embargo, para el caso de inyección de agua, el proceso es más eficiente cuando la longitud a invadir es mayor. De hecho, en un proceso con relación de movilidades en sus puntos finales desfavorable ($M = 1.5$) y una longitud de $L = 5m$ se puede obtener prácticamente la misma recuperación que en uno favorable ($M = 0.75$) y $L = 1m$, como lo muestran las figuras 6.22 y 6.26, donde el escenario desfavorable tiene lugar en un medio poroso lo suficientemente largo como para lograr una recuperación de aceite de aproximadamente $t_{DR} \approx 0.72$, lo cual confirma la importancia del parámetro L en el proceso de inyección de agua. También se observa que en el proceso favorable las contribuciones capilares son mayores que en el proceso desfavorable, mientras que las contribuciones gravitacionales se comportan de forma contraria, teniendo una mayor participación en el proceso desfavorable debido a que es un medio más largo. Analizando la curva de la contribución viscosa y la velocidad adimensional del agua en ambas figuras 6.22 y 6.26, se puede distinguir que en el proceso desfavorable las curvas correspondientes a las contribuciones viscosas y total de la velocidad adimensional del agua se aproximan más, entre sí, que en el proceso favorable, por lo que en el proceso desfavorable el desplazamiento es más convectivo y eficiente que en el favorable, lo que subraya la importancia de la influencia en el proceso de inyección de agua de la longitud a invadir por agua.

Capítulo 7

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Introducción.

En el desarrollo de esta tesis se examinó analíticamente y numéricamente el proceso de desplazamiento bifásico en un medio poroso. Simulando numéricamente el modelo de flujo de tipo difusivo-convectivo se exploraron varios escenarios de producción, determinando así los parámetros de flujo importantes para obtener mejores recuperaciones. El proceso de flujo estudiado en este trabajo considera los efectos capilares, gravitacionales y viscosos de modo que las contribuciones de cada tipo de fuerza son analizadas. Mediante un análisis del error en la aproximación, los desempeños de las formulaciones en diferencias finitas y elemento finito al enfrentar problemas difusivos-convectivos fueron estudiados.

7.1 Conclusiones.

El trabajo presentado en esta tesis contiene estudios teóricos y de experimentación numérica que ayudan a la comprensión de la dinámica de flujo de fluidos a través de medios porosos. Como resultado de esta investigación las siguientes conclusiones y observaciones son presentadas.

1. Se realizó una revisión bibliográfica para establecer los conceptos teóricos y ecuaciones fundamentales relacionados con el flujo de fluidos en medios porosos. Con el estudio de los trabajos de investigación relacionados con el flujo bifásico en medios porosos se estableció el punto de partida para el modelo de flujo.
2. Considerando efectos capilares, gravitacionales y viscosos, una ecuación general de flujo fue desarrollada para describir el flujo bifásico de fluidos inmiscibles que fluyen simultáneamente en un medio poroso unidimensional. Usando las relaciones de tipo Corey para las permeabilidades relativas y una función logarítmica para la función de presión capilar, el modelo general de flujo es transformado a un modelo

no-lineal de flujo de tipo difusivo-convectivo con parámetros y variables adimensionales.

3. Tres números adimensionales fueron definidos, los cuales, dadas las propiedades de flujo (petrofísicas, fluidos, medio poroso y gasto de inyección), son una medida de la relación entre las tres fuerzas que actúan en los procesos de inyección de fluidos. Un cuarto número adimensional es establecido, el cual relaciona la movilidad del fluido inyectado con el desplazado, M .
4. Se definieron tres coeficientes no-lineales adimensionales para el modelo matemático no-lineal de flujo, los cuales proporcionan información sobre el impacto de las tres fuerzas en este modelo y así poder inferir el comportamiento del proceso de desplazamiento.
5. Basado en el comportamiento de los coeficientes no-lineales con respecto a las relaciones de Corey, se puede concluir que al aumentar la mojabilidad del medio poroso por los fluidos, por medio del incremento de los exponentes de Corey y/o al disminuir los valores de las permeabilidades relativas en sus puntos finales, los coeficientes adimensionales $G(S)$ y $D_c(S)$ disminuyen. En la medida, en que el medio poroso es preferentemente mojado por el fluido inyectado, el comportamiento de la función viscosa, $V(S)$, muestra escenarios de recuperación favorables, lo contrario ocurre cuando el medio es mojado por la fase desplazada. Escenarios favorables según la relación de movilidades en sus puntos finales, incrementan los valores tomados por los coeficientes $G(S)$ y $D_c(S)$.
6. Cuando se inyecta agua en dirección contraria a la gravedad para desplazar aceite, se obtienen mejores recuperaciones, debido a la acumulación de los fluidos por el peso de éstos.
7. Para el cálculo de los perfiles de saturaciones en el proceso de desplazamiento. Se emplearon los métodos de diferencias finitas (DF) y elemento finito, en este último método se consideraron dos casos uno en el que se utilizan funciones con base lineal (EFL) y el otro la base es cuadrática (EFC). Como punto de partida el modelo no-lineal de flujo de tipo difusivo-convectivo es simplificado al modelo de flujo difusión-convección con el propósito de estudiar el desempeño de los modelos numéricos en DF, EFL y EFC, y posteriormente expandir sus aplicaciones al modelo no-lineal de flujo.

8. En los modelos numéricos lineales se encontró que sólo las discretizaciones en espacio para DF y EFL son algebraicamente iguales. El desempeño de las tres formulaciones numéricas es evaluado por medio del análisis estadístico del error en las soluciones numéricas, al compararse con la solución analítica del problema de difusión-convección para el caso semi-infinito. Se concluye que cuando el proceso es dominado por difusión las tres formulaciones funcionan muy bien, pero en la medida que el proceso tiende a ser dominado por convección las formulaciones en EF son más eficientes que las respectivas a DF. De las formulaciones en elemento finito la EFC tiene mayor exactitud que la de EFL.
9. Se determinó matemáticamente que al aproximarse la ecuación de convección en diferencias finitas centrales en espacio y regresivas en tiempo, un término dispersivo aparece de forma natural en la aproximación de la ecuación de convección. Dicho término dispersivo es conocido como dispersión numérica, la cual surge de forma natural en las aproximaciones de ecuaciones de convección o de difusión-convección con la formulación mencionada.
10. Expandiendo la aplicación de las formulaciones en DF, EFL y EFC al modelo no-lineal de flujo, tres modelos no-lineales numéricos fueron desarrollados, uno para cada formulación. Debido a la no-linealidad de los sistemas de ecuaciones, el método de Newton iterativo fue aplicado para linealizar dichos sistemas.
11. Los algoritmos numéricos correspondientes a cada formulación fueron validados por medio de la solución analítica al problema de difusión-convección y para representar dicho problema con el modelo no-lineal de flujo los coeficientes no-lineales se fijaron como $D_c = 1$, $G = 0$ y $V = S$. Se encontró que, para las tres formulaciones los errores generados por los modelos no-lineales numéricos son muy similares a los producidos por los modelos lineales numéricos, validando así el algoritmo de solución para cada formulación.
12. Para validar el simulador numérico del modelo no-lineal de flujo se empleó la teoría de Buckley y Leverett. Dos soluciones analíticas con el perfil de saturaciones explícito, es decir de la forma $S = S(z, t)$, que fueron derivadas en este trabajo. La primera para flujo viscoso; y otra, para flujo viscoso-gravitacional. Al comparar, las soluciones numérica y analítica se determinó indiscutiblemente la necesidad de incorporar el criterio de evaluación corriente arriba en el término convectivo de la

ecuación no-lineal de flujo. Mediante el tiempo adimensional, el cual es equivalente a la cantidad de fluido inyectado, se encontró que las soluciones numéricas que contemplan el criterio de evaluación corriente arriba sólo en el término convectivo proporcionan soluciones erróneas, por lo que el criterio de evaluación corriente arriba fue incorporado al término difusivo, y así en toda la ecuación de los modelos numéricos no-lineales de DF y EFL.

13. Con la capacidad de obtener perfiles de saturaciones que describan el proceso de desplazamiento se complementó lo mencionado en el capítulo 3. De modo que al aumentar la mojabilidad del medio poroso por el agua y/o aceite disminuyen las contribuciones de las fuerzas capilares y gravitacionales al proceso de desplazamiento. Las recuperaciones de aceite aumentan en la medida que el medio poroso es mojado por el agua. Los procesos de desplazamiento recomendados son los que establecen una relación de movilidades en sus puntos finales lo más pequeña posible en donde los efectos viscosos son dominantes.
14. En el flujo viscoso el parámetro que principalmente influye en la recuperación es la relación de movilidades en sus puntos finales. A medida que este parámetro disminuye las recuperaciones aumentan, y esto es válido para todo tipo de desplazamiento, es decir, flujo viscoso, viscoso-gravitacional, viscoso-capilar y viscoso-gravitacional-capilar.
15. Cuando se tiene flujo gravitacional-viscoso, además de la relación de movilidades en sus puntos finales, el gasto de inyección juega un papel importante en las contribuciones gravitacionales. De modo que a menores valores del gasto de inyección la recuperación obtenida aumenta.
16. Para el flujo viscoso-capilar además de la relación de movilidades en sus puntos finales y el gasto de inyección, la longitud del medio poroso influye directamente en las contribuciones capilares. De modo que a medida que el gasto de inyección y longitud del medio poroso aumentan la recuperación de aceite aumenta.
17. En el flujo viscoso-gravitacional-capilar, medios porosos largos y viscosidades de agua altas son escenarios en los que se obtienen las mayores recuperaciones, ya que en medios porosos largos los efectos capilares disminuyen y con viscosidades de agua altas el flujo de agua disminuye. Cabe mencionar que cuando coexisten las tres fuerzas en el desplazamiento, el aumento en la contribución gravitacional por disminuir el gasto de inyección no se observa, debido a que al bajar el gasto de

inyección las contribuciones capilares aumentan, disminuyendo el término convectivo en la ecuación de flujo.

7.2 Recomendaciones.

Esta tesis contribuye a una mejor comprensión del proceso de desplazamiento bifásico en medios porosos, al analizar las contribuciones independientes de las tres fuerzas que principalmente están presentes en el flujo de fluidos en medios porosos, así como las ventajas y desventajas de los métodos de diferencias finitas (DF) y elemento finito (EF) en el desarrollo de simuladores de flujo bifásico. Sin embargo, una variedad de sugerencias pueden enlistarse para mejorar el presente trabajo. Algunas se mencionan a continuación:

El modelo no-lineal de flujo puede extenderse a los casos de dos y tres dimensiones, de modo que se consiga simular el desplazamiento en yacimientos de formas complicadas y observar el desempeño numérico de DF y EF en problemas de flujo más complejos.

Investigar la forma de eliminar la dispersión numérica para el modelo no-lineal de flujo, de modo que la solución numérica requiera de menos nodos y pasos de tiempo no tan refinados, minimizando los esfuerzos computacionales.

Incorporar el criterio de evaluación corriente arriba en el término difusivo de la ecuación de flujo, discretizada con la formulación en elemento finito con funciones base cuadrática.

El modelo no-lineal de flujo puede extenderse al caso de inyección de agua en medios fracturados, al aumentar un término fuente en la ecuación de flujo que describa el gasto por capilaridad de la matriz a la fractura.

A pesar que el modelo no-lineal de flujo es desarrollado para dos fases inmiscibles, las ecuaciones pueden extenderse al caso de flujo de tres fases (agua, aceite y gas), de modo que se obtengan dos ecuaciones de flujo, una para el agua y otra para el gas, y generar un sistema de ecuaciones que dependa de las saturaciones de estas, que por simulación numérica pueda resolverse, determinándose los perfiles de saturaciones y recuperaciones de aceite.

Nomenclatura

C	Función de convección, $C(S) = N_G G(S) - V(S)$.
D_C	Función capilar
E_A	Error en la aproximación numérica (área entre curva analítica y numérica).
f	Flujo fraccional
G	Función de gravedad
g	Aceleración de la gravedad, $L T^{-2}$
H	Función de posición, L
H	Función de posición adimensional
i	Contador de nodos en la aproximación numérica.
I	Número de nodos totales en la aproximación numérica.
k	Permeabilidad absoluta, L^2
k_r	Permeabilidad relativa
k_r^*	Permeabilidad relativa en su punto final
L	Longitud, L
M	Relación de movilidades
N_{CG}	Número adimensional capilar/gravedad
N_G	Número adimensional de gravedad
N_{PE}	Numero adimensional de Peclet
N_{PET}	Numero adimensional de Peclet total.
no	Exponente de Corey para el aceite
nw	Exponente de Corey para el agua
p	Presión, $M T^{-2} L^{-1}$
p_c	Presión capilar, $M T^{-2} L^{-1}$
p_c^*	Constante para la función de presión capilar, $M T^{-2} L^{-1}$
q	Gasto volumétrico, $L^3 T^{-1}$
R	Vector de residuos, método de iteración Newtoniana.
S	Saturación ó Saturación normalizada de agua
\bar{S}	Saturación promedio detrás del frente
S_f	Saturación en el frente

\hat{S}	Función aproximada, para el método de elemento finito.
t	Tiempo, T
t_D	Tiempo adimensional
u	Velocidad, L T ⁻¹
u_t	Velocidad total, L T ⁻¹
u_{wD}	Velocidad adimensional del agua
u_{wDC}	Velocidad adimensional del agua por contribución capilar
u_{wDG}	Velocidad adimensional del agua por contribución gravitacional
u_{wDV}	Velocidad adimensional del agua por contribución viscosa
z	Distancia, L
z_D	Distancia adimensional
V	Función de viscosidad

Griego

α_h	Difusividad hidráulica, L ² T
β	Factor de peso
Δ	Operador de diferencias.
ϵ_L	Error local de truncamiento.
Ψ	Índice de distribución de tamaños de poro
ϕ	Porosidad
ϕ^*	Porosidad efectiva
φ	Función base, para el método de elemento finito.
γ	Peso específico, M L ⁻² T ⁻²
λ	Movilidad, L ³ M ⁻¹ T
λ_D	Movilidad del fluido que desplaza, L ³ M ⁻¹ T
λ_d	Movilidad del fluido desplazado, L ³ M ⁻¹ T
λ_{rt}	Movilidad relativa total
λ_{ro}	Movilidad relativa al aceite
λ_{rw}	Movilidad relativa al agua
μ	Viscosidad, M T ⁻¹ L ⁻¹

ρ	Densidad, M L ⁻³
θ	Angulo de contacto
ω	Parámetro de peso, evaluación de criterio corriente arriba.
σ	Tensión interfacial, M T ⁻²

Subíndice

f	fluido
iw	intersticial o irreducible
o	Aceite
or	Aceite residual o remanente
w	Agua

Referencias

1. Latin, M.: *Enhanced Oil Recovery*, Gulf Publishing Company, Editions Technip, Paris (1980).
2. Lake, L. W.: *Enhanced Oil Recovery*, Prentice Hall, 1989, ISBN 0-13-281601-6.
3. Green, D. W.; Willhite, G. P.: *Enhanced Oil Recovery*, SPE Textbook Series Vol. 6, 1998, ISBN 1-55563-077-4.
4. Scheidegger, A., E.: *The Physics of Flow Through Porous Media*, Third Edition, University of Toronto Press (1974), ISBN 0-8020-1849-1.
5. Bear, J.: *Dynamics of fluids in porous media*, American Elsevier Publishing (1972) company, inc., ISBN 0-444-00114-X.
6. Craig, F. F.: *The Reservoir Engineering Aspects of Waterflooding*, SPE Monograph Series Vol. 3, 1971.
7. Dake, L. P.: *Fundamentals of Reservoir Engineering*, Elsevier, 1978, Vol. 8, ISBN 0-444-41830-X.
8. Honarpour, M., Koederitz, L., and Harvey, A. H., *Relative Permeability of Petroleum Reservoirs*, 1986, ISBN 0-8493-5739-X.
9. Marle, C., M., *Multiphase Flow in Porous Media*, Gulf Publishing Company, Edition Technip, Paris (1981).
10. Kelkar, B., G.: *Water Flooding Computations in One-Dimensional Reservoir*, paper SPE 16466, (January 1987).
11. Pooladi-Darvish, M., and Firoozabadi, A.: *Cocurrent and countercurrent imbibition in a water-wet matrix block*, SPE 38443, (March 2000).
12. Kashchiev, D., and Firoozabadi, A.: *Analytical Solution for 1-D Countercurrent Imbibition in Water-Wet Media*, SPE 75166 (April 2002).
13. Rosado, F., Rangel, E., and Rodriguez, F.: *Analytical Model for Oil-Water Displacement under Combined Viscous, Capillary and Gravity Effects*, SPE 100659 (May 2006).
14. Allen, F. R. and Puckett, D. A.: *Theoretical and Experimental Studies of Rate-Dependent Two-Phase Immiscible Flow*, SPE 10972 (January 1986).

15. Tavassoli, Z., Zimmerman, R. W. and Blunt, M. J.: *Analytical Analysis for Oil Recovery during Counter-Current Imbibition in Strongly Water-Wet Systems*, Trans. Porous Media (2005) 58: 173-189.
16. Perez, C., Perez, F., and Cruz, J.: *Waterflooding as a Convection-Dispersion Process*, SPE 18732 (Aug 1988).
17. Vakili, A., et al: *On the Adjoint of a Nonlinear Diffusion-Convection Equation to Describe Flow in Porous Media*, SPE 93566 (March 2005).
18. Cruz, J., and Perez, C.: *Imbibition as a Dispersion Process*, SPE 23748 (March 1992).
19. Rangel, E., and Kovscek, A.: *Water Infiltration in Fractured System: Experiments and Analytical Model*, SPE 71618 (September 2001).
20. Bird, R., B., Stewart, W., E. and Lightfoot, E., N.: *Transport Phenomena*, Second Edition, John Wiley & Sons, Inc., 2002, ISBN 0-471-41077-2.
21. Buckley, S., E., and Leverett, M., C.: *Mechanism of Fluid Displacement in Sands*, Trans. AIME, (1942) **146**, 107.
22. Rapoport, L, A., and Leas, W., J.: *Properties of Linear Waterfloods*, Trans. AIME, (1953) **198**, 139.
23. Handly, L., L., and Hadley, G.: *A Theoretical and Experimental Study of the Steady State Capillary End Effect*, SPE 707-G (Oct. 1956).
24. Welge, H., J.: *A Simplified Method for Computing Oil Recovery by Gas or Water Drive*, Trans. AIME (1952) **195**, 91.
25. Terwilliger, P. L., Wilsey, L. E., Hall, H. N., Bridges, P. M. and Morse, R. A.: *An Experimental and Theoretical Investigation of Gravity Drainage Performance*, Trans. AIME (1951) Vol. 192, 258.
26. Douglas, J., Jr., Blair, P., M., and Wagner, R., J.: *Calculation of Linear Waterflood Behavior Including the Effects of Capillary Pressure*, Trans. AIME (1958) **213**, 96.
27. Fayers, F., J., and Sheldon, J., W.: *The Effect of Capillary Pressure and Gravity on Two Phase Fluid Flow in a Porous Medium*, Trans. AIME (1959) Vol. 216, 147.
28. Hovanessian, S., A., and Fayer, F., J.: *Linear Water Flood with Gravity and Capillary Effects*, SPEJ, 32-36 1960.
29. Yortsos, Y., C., and Fokas, A., S.: *An Analytical Solution for Linear Waterflood Including the Effects of Capillary Pressure*, SPEJ (Feb. 1983) 115-124.

30. Chen, Z., X.: *Some Invariant Solution to Two-Phase Fluid Displacement Problem Including Capillary Effects*, SPERE (May. 1988) 691-700.
31. Chen, Z., Bodvarsson, G., S., and Witherspoon, P., A.: *An Integral Equation Formulation for Two-Phase Flow and Other Nonlinear Flow Problems Through Porous Media*, SPE 20517 (Sep. 1990).
32. Allen Myron. B, Herrera I and Pinder G. F. “*Numerical Modeling in Science and Engineering*”.
33. Aziz K. “*Petroleum Reservoir Simulation*”.
34. Pinder G. F. And Gray W. G. “*Finite Element Simulation and Surface Hydrology*”.
35. Peaceman D. W. “*Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation*”.
36. Vreugdenhil C.B. “*Computational Hydraulics*”.
37. Abou-Kassen J. H. at all. “*Basic Applied Reservoir Simulation*”.
38. Press, W., H., at all.: *Numerical Recipes in C*, Second Edition, Cambridge, (1997).
39. Dong, M., and Dullien, F., A., L.: *Effect of Capillary Forces on Immiscible Displacement in Porous Media*, SPE 56676 (October 1999).

Apéndice A

SOLUCIÓN ANALÍTICA DE LA “EDC” PARA EL CASO SEMI-INFINITO

A.1 Solución Analítica.

La ecuación lineal de difusión-convección (EDC) en variables adimensionales es la siguiente:

$$\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial^2 S}{\partial z_D^2} - \frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0. \quad (\text{A.1})$$

Y particularizando el problema al caso semi-infinito, por medio de las siguientes condiciones de frontera e inicial:

$$\begin{aligned} S(z_D, t_D = 0) &= 0 \\ S(z_D = 0, t_D) &= 1 \\ \text{Lím}_{z_{DR} \rightarrow \infty} [S(z_D = z_{DR}, t_D)] &= 0 \\ 0 < z_D < \infty \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Para resolver la ecuación diferencial parcial lineal se emplea la transformada de Laplace, por lo que se define la siguiente transformada.

$$\bar{S}(z_D, p) = \int_0^{\infty} e^{-pt_D} S(z_D, t_D) dt_D \quad (\text{A.3})$$

Aplicando la transformación a la ecuación diferencial parcial, ecuación (A.1).

$$\frac{1}{N_{PE}} \frac{d^2 \bar{S}}{dz_D^2} - \frac{d\bar{S}}{dz_D} - p\bar{S} = 0 \quad (\text{A.4})$$

Este tipo de ecuaciones tiene como solución general la siguiente expresión:

$$\bar{S}(z_D, p) = A_1 e^{m_1 z_D} + A_2 e^{m_2 z_D} \quad (\text{A.5})$$

Donde m_1 y m_2 son las raíces de la ecuación característica.

$$\frac{1}{N_{PE}} m^2 - m - p = 0 \quad (\text{A.6})$$

Para la condición de frontera cuando z_D tiende a infinito, S es igual a cero, y al aplicar la transformada a esta condición de frontera, tiene como resultado que; \bar{S} también es igual a cero. Por lo que la raíz positiva de la ecuación (A.6) se descarta, debido a que se necesita una solución que sea cero cuando z_D tiende a infinito, y como $m_2 > 0$ no lo cumple, entonces $A_2 = 0$. Así de la condición de frontera interna o en $z_D = 0$, se tiene que:

$$A_1 = \bar{S}(0, p) = \frac{1}{p} \quad (\text{A.7})$$

Y la ecuación (A.5) se convierte en:

$$\bar{S}(z_D, p) = \frac{1}{p} \text{Exp} \left[\left(\frac{N_{PE}}{2} - \sqrt{\frac{N_{PE}^2}{4} - N_{PE} p} \right) z_D \right] \quad (\text{A.8})$$

Para invertir la ecuación (A.8) del espacio de Laplace, se hace uso del teorema de convolución debido a que de tablas se conocen las transformadas inversas de los productos $\left(\frac{1}{p}\right)$ y de la exponencial $\text{Exp}[m_1 z_D]$, entonces se tiene que la solución de la ecuación (A.1) con condiciones (A.2), es:

$$S(z_D, t_D) = \frac{z_D}{2} \sqrt{\frac{N_{PE}}{\pi}} \int_0^{t_D} \frac{\text{Exp}\left[-\frac{N_{PE}(z_D - \theta)^2}{4\theta}\right]}{\theta^{3/2}} d\theta \quad (\text{A.9})$$

Definiendo los siguientes cambios de variables:

$$y = \frac{z_D - \theta}{2} \sqrt{\frac{N_{PE}}{\theta}} \quad y \quad w = \frac{z_D + \theta}{2} \sqrt{\frac{N_{PE}}{\theta}} \quad (\text{A.10})$$

$$dy = -\frac{w}{2\theta} d\theta \quad y \quad dw = -\frac{y}{2\theta} d\theta \quad (\text{A.11})$$

$$(dy + dw) = -\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2} \frac{z_D}{\theta^{3/2}} d\theta \quad (\text{A.12})$$

Con los cambios de variables la ecuación (A.9) se convierte en:

$$S(z_D, t_D) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{t_D} \text{Exp}[-y^2] (dy + dw) \quad (\text{A.13})$$

$$S(z_D, t_D) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\int_0^{t_D} \text{Exp}[-y^2] dy + \text{Exp}[N_{PE} z_D] \int_0^{t_D} \text{Exp}[-w^2] dw \right] \quad (\text{A.14})$$

$$S(z_D, t_D) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\int_{+\infty}^{\left(\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D - t_D]\right)} \text{Exp}[-y^2] dy + \text{Exp}(N_{PE} z_D) \int_{+\infty}^{\left(\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D + t_D]\right)} \text{Exp}[-w^2] dw \right] \quad (\text{A.15})$$

$$S(z_D, t_D) = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \text{erf} \left(\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D - t_D] \right) \right) + \text{Exp}(N_{PE} z_D) \left(1 - \text{erf} \left(\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D + t_D] \right) \right) \right] \quad (\text{A.16})$$

$$S(z_D, t_D) = \frac{1}{2} \left[\text{erfc} \left(\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D - t_D] \right) + \text{Exp}(N_{PE} z_D) \text{erfc} \left(\frac{\sqrt{N_{PE}}}{2\sqrt{t_D}} [z_D + t_D] \right) \right] \quad (\text{A.17})$$

Y la ecuación (A.17) es la solución analítica buscada para el problema planteado por la ecuación (A.1) con condiciones (A.2).

Apéndice B

DESARROLLO DEL MODELO ANALÍTICO DEL DESPLAZAMIENTO DE ACEITE POR AGUA

B.1 Ecuaciones generales

Para el desarrollo del modelo matemático que describe el flujo de aceite y agua en un medio poroso lineal, inicialmente saturado con ambos fluidos se requiere el uso de las leyes de conservación de la masa y Darcy. En este modelo se supone que los fluidos son inmiscibles, homogéneos e incompresibles, y que el medio poroso es homogéneo, incompresible e isotrópico.

La ley de conservación de la masa o de continuidad establece que una cantidad de fluido no puede ser creada ni destruida, entonces aplicando este principio a un elemento de medio poroso, infinitesimal de volumen, $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$, con porosidad de ϕ , área transversal al flujo, $\Delta x \Delta y$, y longitud, Δz , en la dirección de flujo. Entonces, el gasto másico de agua que entra al elemento de volumen en z a un intervalo de tiempo Δt es

$$[\rho_w u_w \Delta x \Delta y]_z. \quad (\text{B.1})$$

Análogamente, el gasto másico de agua que sale del elemento de volumen en el punto $z + \Delta z$ a un intervalo de tiempo Δt es

$$[\rho_w u_w \Delta x \Delta y]_{z+\Delta z}. \quad (\text{B.2})$$

El gasto másico de agua acumulado en el elemento de volumen al intervalo de tiempo Δt , cuando este tiende a cero, es

$$\phi \Delta V \frac{\partial}{\partial t} (S_w \rho_w). \quad (\text{B.3})$$

El gasto másico de agua que entra menos el que sale del elemento de volumen, por el principio de conservación, es iguala al gasto másico de agua acumulado en ΔV . Así se tiene que:

$$[\rho_w u_w \Delta x \Delta y]_z - [\rho_w u_w \Delta x \Delta y]_{z+\Delta z} = \phi \Delta V \frac{\partial}{\partial t} (S_w \rho_w) \quad (\text{B.4})$$

Por la definición de derivada, la ecuación anterior se reescribe como:

$$-\frac{\partial(\rho_w u_w \Delta x \Delta y)}{\partial z} \Delta z = \phi \Delta V \frac{\partial}{\partial t} (S_w \rho_w). \quad (\text{B.5})$$

Simplificando la ecuación (B.5) y considerando que los fluidos son incompresibles, la ecuación de continuidad para el agua es

$$\frac{\partial u_w}{\partial z} + \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = 0 \quad (\text{B.6})$$

De forma semejante, para el aceite se tiene que:

$$\frac{\partial u_o}{\partial z} + \phi \frac{\partial S_o}{\partial t} = 0 \quad (\text{B.7})$$

Debido a que los poros del medio están completamente ocupados por agua y aceite, la ecuación (B.8) de restricción se debe cumplir.

$$S_w + S_o = 1 \quad (\text{B.8})$$

Considerando la ecuación (B.8), al sumar término a término de las ecuaciones (B.6) y (B.7) se tiene que la suma de las velocidades del agua y aceite resulta en una velocidad total constante, u_t , en todo el medio poroso y en cualquier instante del proceso de flujo.

$$\frac{\partial(u_w + u_o)}{\partial z} = 0 \quad (\text{B.9a})$$

o bien

$$u_w + u_o = u_t \quad (\text{B.9b})$$

La definición de presión capilar es requerida ya que el flujo de agua y aceite es inmisible, entonces:

$$p_c(S_w) = p_o - p_w \quad (\text{B.10})$$

La ecuación que describe la velocidad de un fluido en un medio poroso, es la expresión matemática de la ley de Darcy y, aplicándola al flujo simultáneo de agua y aceite, es como sigue:

$$u_w = -k\lambda_{rw}(S_w) \left[\frac{\partial p_w}{\partial z} + \gamma_w \frac{\partial H}{\partial z} \right] \quad (\text{B.11})$$

$$u_o = -k\lambda_{ro}(S_w) \left[\frac{\partial p_o}{\partial z} + \gamma_o \frac{\partial H}{\partial z} \right] \quad (\text{B.12})$$

Donde u_w y u_o son las velocidades de Darcy del agua y aceite respectivamente, λ_{rw} y λ_{ro} son las movilidades relativas a cada fase respectivamente.

B.2 Modelo general de flujo.

Las ecuaciones de la sección anterior forman el sistema de ecuaciones requerido para resolver problemas de desplazamiento bifásico de fluidos inmiscibles. Las ecuaciones

generales de flujo principalmente dependen de las presiones y saturaciones de los fluidos, pero con la combinación esas ecuaciones se pueden reducir el número de incógnitas, de modo que la ecuación de flujo dependa sólo de la saturación de agua.

Reescribiendo las ecuaciones (B.11) y (B.12) de forma que posteriormente la definición de presión capilar sea incorporada.

$$\frac{u_w}{k\lambda_{rw}} = -\frac{\partial p_w}{\partial z} - \gamma_w \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{B.13})$$

$$-\frac{u_o}{k\lambda_{ro}} = \frac{\partial p_o}{\partial z} + \gamma_o \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{B.14})$$

Sumando las ecuaciones anteriores

$$\frac{u_w}{k\lambda_{rw}} - \frac{u_o}{k\lambda_{ro}} = \frac{\partial p_o}{\partial z} - \frac{\partial p_w}{\partial z} - (\gamma_w - \gamma_o) \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{B.15})$$

Considerando la ecuación (B.9b) para eliminar a la velocidad del aceite, y derivando parcialmente la ecuación de presión capilar, (B.10), con respecto a la coordenada espacial zeta, se tiene que:

$$\frac{u_w}{k\lambda_{rw}} - \frac{u_t - u_w}{k\lambda_{ro}} = \frac{\partial p_c}{\partial z} - (\gamma_w - \gamma_o) \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{B.16})$$

Agrupando los términos que contiene la velocidad del agua en el lado izquierdo de la ecuación y multiplicando toda la ecuación por la permeabilidad del medio poroso, se llega a

$$u_w \left[\frac{1}{\lambda_{rw}} + \frac{1}{\lambda_{ro}} \right] = k \left[\frac{\partial p_c}{\partial z} - (\gamma_w - \gamma_o) \frac{\partial H}{\partial z} \right] + \frac{u_t}{\lambda_{ro}} \quad (\text{B.17})$$

Por lo que la ecuación que describe la velocidad del agua se expresa de la siguiente manera:

$$u_w = k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial z} - k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \Delta\gamma \frac{\partial H}{\partial z} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t, \quad (\text{B.18})$$

donde $\lambda_{rt} = \lambda_{rw} + \lambda_{ro}$ es la movilidad relativa total, la cual es una medida de la resistencia del medio al flujo multifásico, y $\Delta\gamma = \gamma_w - \gamma_o$ es la diferencia de los pesos específicos del agua y aceite. Cada uno de los tres términos de la ecuación (B.18) está relacionado con una de las tres fuerzas que principalmente influye en el flujo de fluidos a través de medios porosos, como sigue:

$$k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial z} : \quad \text{Contribución de las fuerzas capilares a la velocidad del agua.}$$

$$k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \Delta\gamma \frac{\partial H}{\partial z} : \quad \text{Contribución de las fuerzas gravitacionales a la velocidad de agua.}$$

$$\frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t : \quad \text{Contribución de las fuerzas viscosas a la velocidad del agua.}$$

Introduciendo la ecuación para la velocidad del agua, (B.18), en la ecuación de continuidad para el agua (B.6).

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS_w} \frac{\partial S_w}{\partial z} - k\lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \Delta\gamma \frac{\partial H}{\partial z} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t \right) = 0 \quad (\text{B.19})$$

La expresión (B.19) es la ecuación diferencial parcial no-lineal de tipo parabólica que con condiciones de frontera e inicial adecuadas, puede describir la distribución de saturaciones del agua en el medio poroso durante cualquier proceso de desplazamiento bifásico de fluidos inmiscibles, en donde las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas pueden actuar de forma simultánea o individual. Dicha ecuación es general por que describir desplazamiento lineal co-corriente y contra-corriente.

B.3 Modelo analítico adimensional.

Para escribir el modelo de flujo en variables adimensionales, de modo que se puedan obtener soluciones generales al problema de desplazamiento, se hace uso del concepto de saturación normalizada de agua, (B.20), el cual esta asociado sólo a la cantidad de fluido móvil.

$$S = \frac{S_w - S_{wi}}{1 - S_{or} - S_{wi}} \quad (\text{B.20})$$

donde S_w y S_{wi} son la saturación de agua total e inicial respectivamente, mientras que S_{or} es la saturación de aceite residual.

$$\phi(1 - S_{or} - S_{wi}) \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS} \frac{\partial S}{\partial z} - k \lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \Delta \gamma \frac{\partial H}{\partial z} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} u_t \right) = 0 \quad (\text{B.21})$$

La ecuación (B.21) incorpora el concepto de saturación normalizada de agua en la ecuación (B.19), e introduce un nuevo concepto conocido como porosidad efectiva que también se relaciona con la cantidad de fluido movible, de modo que la porosidad es reducida por un factor de $(1 - S_{or} - S_{wi})$. Entonces la porosidad efectiva se reescribe como:

$$\phi^* = \phi(1 - S_{or} - S_{wi}) \quad (\text{B.22})$$

Dividiendo la ecuación (B.21) entre la velocidad total e introduciendo los cambios de variables, (B.23) y (B.24), en la coordenada espacial, se llega a la ecuación (B.25).

$$z_D = \frac{z}{L} \quad (\text{B.23})$$

$$H_D = \frac{H}{L} \quad (\text{B.24})$$

$$\frac{\phi^*}{u_i} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z_D} \left(k \lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{u_i L \lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS} \frac{\partial S}{\partial z_D} - k \lambda_{ro} \frac{\lambda_{rw}}{u_i \lambda_{rt}} \Delta \gamma \frac{\partial H_D}{\partial z_D} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \right) = 0 \quad (\text{B.25})$$

Multiplicando toda la ecuación por la longitud del medio poroso, se establece el cambio de variable para la coordenada temporal.

$$t_D = \frac{u_i}{\phi^* L} t \quad (\text{B.26})$$

Y la ecuación adimensional luce de la siguiente manera:

$$\frac{\partial S}{\partial t_D} + \frac{\partial}{\partial z_D} \left(\frac{k}{u_i L} \frac{\lambda_{ro} \lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS} \frac{\partial S}{\partial z_D} - \frac{k \Delta \gamma}{u_i} \frac{\lambda_{ro} \lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{\partial H_D}{\partial z_D} + \frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \right) = 0 \quad (\text{B.27})$$

Si las movilidades relativas y permeabilidades relativas a ambos fluidos, así como la presión capilar dependen de la saturación normalizada de agua de la siguiente forma:

$$\lambda_{rw} = \lambda_{rw}^* S^{nw} = \frac{k_{rw}^*}{\mu_w} S^{nw} \quad (\text{B.28})$$

$$\lambda_{ro} = \lambda_{ro}^* (1 - S)^{no} = \frac{k_{ro}^*}{\mu_o} (1 - S)^{no} \quad (\text{B.29})$$

$$p_c = -p_c^* \ln(S) \quad (\text{B.30})$$

La ecuación (B.27) puede reducir su número de variables dependientes a sólo la saturación normalizada de agua. Entonces, incorporando las expresiones para las relaciones de movilidades del agua y aceite en función de la saturación normalizada de agua en el término correspondiente a efectos viscosos de la ecuación (B.27).

$$\frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} = \frac{\lambda_{rw}^*}{\lambda_{ro}^*} \frac{S^{nw}}{(1 - S)^{no} + \lambda_{rw}^* S^{nw} / \lambda_{ro}^*} \quad (\text{B.31})$$

De la ecuación anterior se puede definir la relación de movilidades en sus puntos finales como:

$$M = \frac{\lambda_{rw}^*}{\lambda_{ro}^*} \quad (\text{B.32})$$

Y la ecuación (B.31) se reescribe en función de la relación de movilidades en sus puntos finales como sigue:

$$\frac{\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} = \frac{MS^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}} \quad (\text{B.33})$$

De forma análoga se incorpora las relaciones (B.28) y (B.29) en el siguiente término relacionado con las contribuciones gravitacionales y se tiene que:

$$\frac{\lambda_{ro}\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} = \lambda_{rw}^* \frac{(1-S)^{no} S^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}} \quad (\text{B.34})$$

Para el término relacionado con contribuciones capilares, aparte de las ecuaciones para las movilidades relativas al agua y aceite se requiere la ecuación de la presión capilar, (B.30).

$$\frac{\lambda_{ro}\lambda_{rw}}{\lambda_{rt}} \frac{dp_c}{dS} = -\lambda_{rw}^* p_c^* \frac{(1-S)^{no} S^{nw-1}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}} \quad (\text{B.35})$$

Sustituyendo las ecuaciones (B.33), (B.34) y (B.35) en la ecuación (B.27) se llega a:

$$\frac{\partial}{\partial z_D} \left(\frac{k\lambda_{rw}^* p_c^*}{u_i L} \frac{(1-S)^{no} S^{nw-1}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}} \frac{\partial S}{\partial z_D} + \frac{k\Delta\gamma\lambda_{rw}^*}{u_i} \frac{\partial H_D}{\partial z_D} \frac{(1-S)^{no} S^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}} - \frac{MS^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}} \right) = \frac{\partial S}{\partial t_D} \quad (\text{B.36})$$

De esta última ecuación se pueden definir las siguientes funciones y números adimensionales:

$$N_{Pe} = \frac{u_i L}{k \lambda_{rw}^* P_c^*}, \quad \text{Número adimensional de Peclet.} \quad (\text{B.37})$$

$$N_G = \frac{k \lambda_{rw}^* \Delta \gamma}{u_i} \frac{\partial H_D}{\partial z_D}, \quad \text{Número adimensional de gravedad.} \quad (\text{B.38})$$

$$D_C(S) = \frac{(1-S)^{no} S^{nw-1}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}}, \quad \text{Función capilar.} \quad (\text{B.39})$$

$$G(S) = \frac{(1-S)^{no} S^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}}, \quad \text{Función de gravedad.} \quad (\text{B.40})$$

$$V(S) = \frac{MS^{nw}}{(1-S)^{no} + MS^{nw}}, \quad \text{Función de viscosidad.} \quad (\text{B.41})$$

Y así la ecuación (B.36) se escribe de forma más simplificada como sigue:

$$\frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{Pe}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} + N_G G(S) - V(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (\text{B.42})$$

La ecuación (B.42) junto con condiciones de frontera e inicial adecuadas puede resolver una gran variedad de problemas de inyección de un fluido para desplazamiento bifásico con fluidos inmiscibles. Con el mismo procedimiento, a partir de la ecuación (B.18) se puede derivar la ecuación para la velocidad adimensional del agua, (B.43), que considera las contribuciones de las fuerzas capilares, gravitacionales y viscosas.

$$u_{wD} = -\frac{1}{N_{Pe}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} - N_G G(S) + V(S) \quad (\text{B.43a})$$

$$u_{wD} = u_{wDC} + u_{wDG} + u_{wDV} \quad (\text{B.43b})$$

donde

$$u_{wD} = \frac{u_w}{u_t} \quad (\text{B.44})$$

$$u_{wDC} = -\frac{1}{N_{Pe}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z_D} \quad \text{Contribución capilar a la } u_{wD}. \quad (\text{B.45})$$

$$u_{wDG} = -N_G G(S) \quad \text{Contribución gravitacional a la } u_{wD}. \quad (\text{B.46})$$

$$u_{wDV} = V(S) \quad \text{Contribución viscosa a la } u_{wD}. \quad (\text{B.47})$$

Con la ecuación (B.43) se puede estudiar las curvas correspondientes a las contribuciones capilares, gravitacionales y viscosas por separado, y así determinar las zonas y escenarios que favorecen a cada una de las tres fuerzas mencionadas. En presencia sólo de efectos convectivos, o dicho de otra forma, cuando los efectos capilares son despreciados la ecuación para la velocidad adimensional del agua puede ser usada para calcular perfiles de saturaciones a diferentes tiempos y recuperaciones de aceite durante el proceso de desplazamiento viscoso con o sin gravedad, mediante la teoría de B-L y el método de Welge.

Apéndice C

TEORÍA DE APROXIMACIÓN POLINOMIAL

C.1 Interpolación por Polinomios de Lagrange.

La teoría de aproximación polinomial es el fundamento de los métodos numéricos de diferencias finitas y elemento finito. La aproximación consiste en encontrar un polinomio $P_n(z)$ de grado n que interpole los valores de la función $f(z)$ en un segmento discretizado o elemento finito comprendido entre el intervalo $[a, b]$. Es decir,

$$P_n(z_i) = f(z_i), \quad (\text{C.1})$$

donde

$$P_n(z) = \sum_{i=0}^n l_i(z) f(z_i), \quad (\text{C.2})$$

La cantidad de sumandos requeridos es igual a la cantidad de nodos requeridos para aproximarse al valor de la función en el nodo z_i . El polinomio $l_i(z)$ tiene la siguiente forma

$$l_i(z) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{z - z_j}{z_i - z_j}, \quad z \in [a, b] \quad (\text{C.3})$$

La cantidad de multiplicandos en la ecuación anterior es determinada por el grado del polinomio de interpolación. Por lo que de cierta manera la cantidad de nodos requeridos y el grado del polinomio de interpolación determinan el grado de aproximación.

La aproximación de $P_n(z)$ a $f(z)$ es conocida como polinomio de interpolación de Lagrange, y la función $l_i(z)$ es conocida como polinomio base de Lagrange. Los polinomios base más sencillos son el lineal ($n = 1$) y el cuadrático ($n = 2$) ver Figura C.1.

La función base cúbica, al igual que la cuadrática y lineal mencionadas arriba, son usadas en aplicaciones prácticas, sin embargo, polinomios base de Lagrange de mayor grado rara vez son usados [34]. Como las funciones base son consideradas sobre un segmento o elemento de discretización, la cantidad de nodos requeridos por segmento discretizado o elemento finito depende del grado del polinomio de interpolación (ver Fig. C.1), es conveniente introducir un sistema de coordenadas locales para cada elemento que simplifique las operaciones matemáticas de integración por elemento que se realizan para determinar la aproximación, por lo que para reescalar cada elemento se introduce un sistema de coordenadas locales ξ tal que $\xi \in [-1,+1]$. Para distinguir la función base en coordenadas globales $l_i(z)$ de la función base en coordenadas locales, se define a $\hat{l}_i(\xi)$. Ambas funciones a pesar de ser diferentes funciones proporcionan los mismos resultados en las operaciones sobre un elemento finito dado.

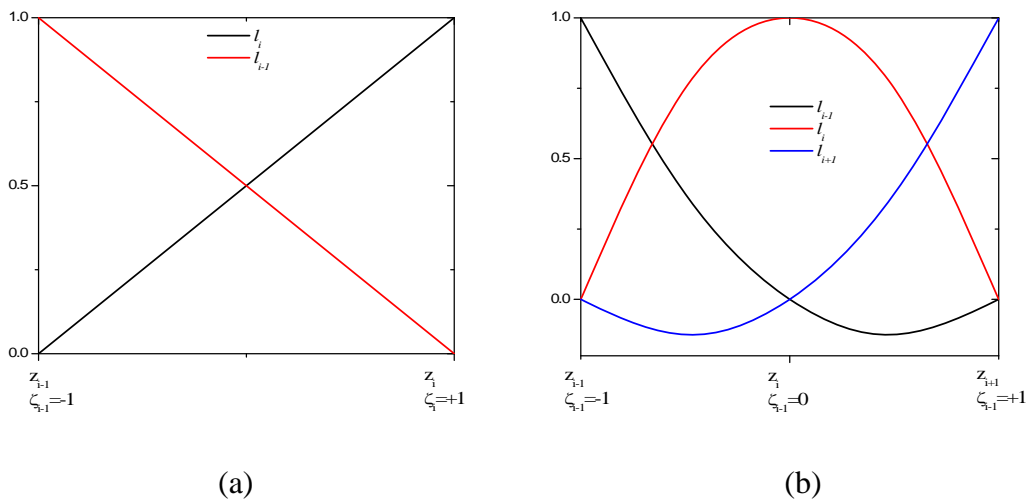


Figura C.1: (a) Función base lineal “chapeau” l_i , en coordenadas locales $\xi \in [-1,+1]$. (b) Función base cuadrática l_i .

Al determinar las expresiones analíticas de las funciones base en coordenadas locales para los casos lineal y cuadrático, se hace uso del polinomio de interpolación de Lagrange para cada caso. Empezando por el caso más sencillo se establece la siguiente expresión:

$$P_1(\xi) = \hat{l}_{i-1} f_{i-1} + \hat{l}_i f_i. \quad \text{Caso lineal} \quad (\text{C.4a})$$

$$P_2(\xi) = \hat{l}_{i-1} f_{i-1} + \hat{l}_i f_i + \hat{l}_{i+1} f_{i+1}. \quad \text{Caso Cuadrático} \quad (\text{C.4b})$$

La función polinomial para el caso lineal en función de las coordenadas locales se puede escribir de la siguiente forma:

$$P_1(\xi) = A + B\xi. \quad (\text{C.5})$$

Debido a que las funciones bases lineal tiene el valor unitario en los nodo, entonces se puede establecer las siguientes condiciones $P_1(-1) = f_{i-1}$ y $P_1(+1) = f_i$, y junto a la ecuación (C.5) se establece un sistema de ecuaciones que tiene la siguiente solución.

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{i-1} \\ f_i \end{bmatrix} \quad (\text{C.6})$$

Sustituyendo (C.6) en (C.5) y con ayuda de (C.4) se determinan las funciones base en coordenadas locales para los polinomios de interpolación lineal.

$$\hat{l}_i(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi) \quad (\text{C.7a})$$

$$\hat{l}_{i+1}(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi) \quad (\text{C.7b})$$

Generalmente los polinomios de interpolación cuadráticos proporcionan mejor aproximación que los lineales. Para este tipo de elementos se definen elementos con tres puntos nodales como se observa en la figura. C.1b. Usando un procedimiento análogo al del

caso lineal se puede definir una función polinomial de interpolación en coordenadas locales como sigue:

$$P_2(\xi) = A + B\xi + C\xi^2 \quad (\text{C.8})$$

Como en el caso anterior se establecen las condiciones de la función polinomial en los nodos, entonces $P_2(-1) = f_{i-1}$, $P_2(0) = f_i$ y $P_2(+1) = f_{i+1}$, y junto con la última ecuación se genera un sistema de ecuaciones que tiene la siguiente solución:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & -1 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{i-1} \\ f_i \\ f_{i+1} \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

Sustituyendo la solución del sistema de ecuaciones (C.9) en la ecuación (C.8) y reacomodando los términos se obtienen las funciones base para los elementos cuadráticos.

$$\hat{l}_{i-1}(\xi) = -\frac{1}{2}\xi(1-\xi) \quad (\text{C.10a})$$

$$\hat{l}_i(\xi) = (1-\xi)(1+\xi) \quad (\text{C.10a})$$

$$\hat{l}_{i+1}(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1+\xi) \quad (\text{C.10b})$$

Para extender los resultados a funciones bases de mayor grado se puede seguir un procedimiento similar al de los casos lineales y cuadráticos presentados arriba. La forma general de las funciones bases en coordenadas locales es:

$$\hat{l}_i(\xi) = \begin{cases} \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{\xi - \xi_j}{\xi_i - \xi_j}, & (-1 \leq \xi \leq +1) \\ 0, & (-\infty < \xi < -1) \cup (+1 < \xi < +\infty) \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

Apéndice D

APROXIMACIONES EN DIFERENCIAS FINITAS

D.1 Aproximación por interpolación de polinomios.

En el método de diferencias finitas la ecuación diferencial es aproximada en puntos discretos usando los polinomios de interpolación. De todas las técnicas numéricas para resolver ecuaciones diferenciales, la aproximación en diferencias finitas es por mucho la más sencilla de entender e implementar, sin embargo, en comparación con la técnica de elemento finito, con diferencias finitas las aproximaciones a una solución continua son definidas en los nodos, y con elemento finito la solución aproximada es definida sobre todo el dominio. Esto es debido a que el método de diferencias finitas reemplaza las derivadas parciales de la ecuación diferencial parcial por sus aproximaciones en diferencias finitas, y el método de elemento finito aproxima una función polinomial a la solución exacta, continua en todo en el elemento discretizado.

Para determinar las aproximaciones de las derivadas en diferencias finitas, considérese el intervalo $[a, b]$ mostrado en la figura D.1.

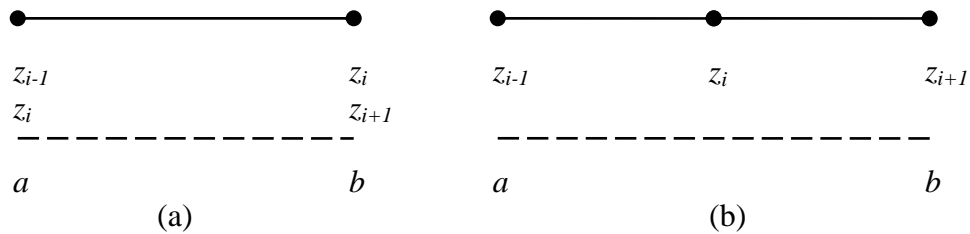


Figura D.1: (a) Discretización en dos nodos para diferencias finitas progresivas o regresivas; (b) Discretización en tres nodos para las diferencias centrales.

Empleando la interpolación polinomial de Lagrange siguiente:

$$P_1(z) = l_{i-1}(z)f(z_{i-1}) + l_i(z)f(z_i) = \frac{1}{z_i - z_{i-1}} [(z_i - z)f(z_{i-1}) + (z - z_{i-1})f(z_i)] \quad (D.1)$$

Diferenciando la aproximación $f(z) = P_1(z) + E_1(z)$ con respecto a z en el nodo z_{i-1} .

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_{i-1}} = \frac{1}{z_i - z_{i-1}} [f_i - f_{i-1}] + \left. \frac{dE_1}{dz} \right|_{z_{i-1}} \quad \text{Aproximación en diferencias progresivas} \quad (D.2)$$

El error que se obtiene de la aproximación en la ecuación (D.2), se puede determinar mediante la ecuación (D.3) [32].

$$\left. \frac{dE_1}{dz} \right|_{z_{i-1}} = \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{2!} (z - z_{i-1})(z - z_i) \frac{d^2 f}{dz^2} \right]_{z_{i-1}} = -\frac{\Delta z}{2!} \frac{d^2 f}{dz^2} = O(\Delta z) \quad (D.3)$$

De manera análoga pero apoyándose en el nodo z_{i+1} .

$$P_1(z) = l_i(z)f(z_i) + l_{i+1}(z)f(z_{i+1}) = \frac{1}{z_{i+1} - z_i} [(z_{i+1} - z)f(z_i) + (z - z_i)f(z_{i+1})] \quad (D.4)$$

Diferenciando la aproximación $f(z) = P_1(z) + E_1(z)$ con respecto a z en el nodo z_{i+1} .

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_{i+1}} = \frac{1}{z_{i+1} - z_i} [f_{i+1} - f_i] + \left. \frac{dE_1}{dz} \right|_{z_{i+1}} \quad \text{Aproximación en diferencias regresivas} \quad (D.5)$$

El término de error en la expresión (D.5), y análogamente al caso anterior, es el siguiente.

$$\left. \frac{dE_1}{dz} \right|_{z_{i+1}} = \frac{\Delta z}{2!} \frac{d^2 f}{dz^2} = O(\Delta z) \quad (D.6)$$

Los errores de las aproximaciones progresivas y regresivas son de primer orden y de signos opuestos. Otra aproximación que es comúnmente empleada es diferencias centrales, la cual tiene menor grado de error, es decir tiene una aproximación de segundo orden es la aproximación en diferencias centrales, y para obtener la expresión de la aproximación en diferencias centrales considérese la figura D.1 (b). En esta aproximación se consideran tres puntos de interpolación como muestra la figura, y empleando polinomios lineales, se tiene que:

$$\begin{aligned}
 P_2(z) &= l_{z_{i-1}} f(z_{i-1}) + l_{z_i} f(z_i) + l_{z_{i+1}} f(z_{i+1}) \\
 &= \frac{1}{2\Delta z^2} [(z - z_i)(z - z_{i+1})f(z_{i-1}) - 2(z - z_{i-1})(z - z_{i+1})f(z_i) + (z - z_{i-1})(z - z_i)f(z_{i+1})] \quad (D.7)
 \end{aligned}$$

Diferenciando la ecuación $f = P_2 + E_2$ para obtener la aproximación:

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} = \left. \frac{dP_2}{dz} \right|_{z_i} + \left. \frac{dE_2}{dz} \right|_{z_i} = \frac{1}{2\Delta z} [f_{i+1} - f_{i-1}] + \left. \frac{dE_2}{dz} \right|_{z_i} \quad (D.8)$$

La aproximación anterior tiene el siguiente error:

$$\left. \frac{dE_2}{dz} \right|_{z_i} = \frac{\Delta z^2}{3!} \frac{d^3 f}{dz^3} = O(\Delta z^2) \quad (D.9)$$

Del error obtenido en la aproximación en diferencias centrales se observa que tiene mayor grado de exactitud que las aproximaciones regresivas y progresivas, ya que su error es de segundo orden, $O(\Delta z^2)$.

Las aproximaciones en diferencias finitas para derivadas de mayor orden se derivan análogamente de la misma manera a la descrita arriba. De la misma forma que para la derivación de la ecuación (D.8) la aproximación de segundo orden en la derivada [³²], es:

$$\left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} = \frac{1}{\Delta z^2} [f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}] + \left. \frac{d^2 E_2}{dz^2} \right|_{z_i} \quad (D.10)$$

con un error de;

$$\left. \frac{d^2 E_2}{dz^2} \right|_{z_i} = -\frac{2\Delta z^2}{3!} \left. \frac{d^4 f}{dz^4} \right|_{z_i} = O(\Delta z^2). \quad (\text{D.11})$$

D.2 Aproximación por las Series de Taylor.

Otro camino para determinar las aproximaciones de las derivadas en el método de diferencias finitas es el uso de las expansiones en series de Taylor. Expandiendo las funciones f_{i-1} y f_{i+1} en series de Taylor alrededor del nodo i .

$$f_{i-1} = f_i - \left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} \Delta z + \left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \left. \frac{d^3 f}{dz^3} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + \left. \frac{d^4 f}{dz^4} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^4}{4!} - \dots \quad (\text{D.12})$$

$$f_{i+1} = f_i + \left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} \Delta z_D + \left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \left. \frac{d^3 f}{dz^3} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + \left. \frac{d^4 f}{dz^4} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^4}{4!} + \dots \quad (\text{D.13})$$

Restando la ecuación (D.13) y (D.12) y se obtiene la aproximación para $\partial f_i / \partial z$.

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta z_D} - \left. \frac{d^3 f}{dz^3} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z_D)^2}{3!} + \dots \quad (\text{D.14})$$

La ecuación anterior se puede interpretar de la siguiente manera

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta z} \quad (\text{D.15})$$

Resultando en un residuo o error local de truncamiento de la serie de

$$O(\Delta z^2) = -\frac{d^3 f_i}{dz^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + \dots \quad (\text{D.16})$$

Debido a que este residuo se aproxima a cero en la misma medida que lo hace $(\Delta z_D)^2$, esto hace que el error de la aproximación sea de segundo orden. A esta aproximación se le conoce como aproximación de df_i/dz mediante diferencias centrales.

Para determinar la aproximación de $d^2 f_i/dz^2$ se procede de manera similar al caso anterior, con la variante de que ahora se suman las ecuaciones (D.13) y (D.12) dando como resultado lo siguiente

$$\left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta z)^2} + \left. \frac{\partial^4 f}{\partial z^4} \right|_{z_i} \frac{(\Delta z)^2}{12} + \dots \quad (\text{D.17})$$

Y se puede observar que la aproximación en diferencias centrales de $d^2 f_i/dz^2$ tiene un error de truncamiento de segundo orden, al que igual que el caso anterior. Truncando la serie se obtiene la aproximación en diferencias centrales.

$$\left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{z_i} \approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta z)^2} \quad (\text{D.18})$$

Apéndice E

APROXIMACIÓN EN ELEMENTO FINITO CON FUNCIONES BASE LINEAL

E.1 Elemento finito de Galerkin con aproximación lineal.

Como primer paso para la aplicación del MEEG se define el operador diferencial que actúa sobre la ecuación diferencial (4.1).

$$L[S] = \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial S}{\partial z_D} - S \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (\text{E.1})$$

Empleando la ecuación (4.11) y tomando en cuenta el concepto de Galerkin se define la siguiente ecuación.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] - \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i(z_D) \right\rangle = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, I). \quad (\text{E.2})$$

Para reducir el orden de las derivadas en la ecuación anterior por lo general se emplea el teorema de Green, pero en el caso de una dimensión en la variable espacial, basta con una integración por partes.

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle + \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] \varphi_i \Bigg|_{z_D=0}^{z_D=z_{DR}} = 0 \quad (\text{E.3})$$

(i=1, 2, 3, ..., I)

La ecuación anterior sólo se aplica en los nodos donde se desea aproximar la función desconocida, entonces en problemas como el que se está resolviendo con condiciones de frontera tipo Dirichlet, la ecuación (E.3) no se aplica para los nodos en las fronteras, es

decir los valore de i se restringen a $i=2, 3, \dots, I-1$, y al no contemplar a $\varphi_{i=1}$ y $\varphi_{i=I}$ que son las funciones base distintas de cero en las fronteras internas y externas respectivamente el último término de la ecuación (E.3) es cero. Si alguna de las fronteras no tuviera condiciones de frontera tipo Dirichlet no se anularía el tercer término de la ecuación (E.3).

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (E.4)$$

Seleccionando la función base lineal para la aproximación en la ecuación anterior y considerando que los parámetros a determinar son dependientes del tiempo se puede escribir a la ecuación (4.8) de la siguiente forma.

$$\hat{S}(z_D, t_D) = \sum_{j=1}^I S_j(t_D) \varphi_j(z_D) \quad (E.5)$$

Combinando el par de ecuaciones anteriores se obtiene el sistema algebraico de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas.

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left\{ -S_j \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_j}{dz_D} - \varphi_j \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (E.6)$$

Debido a que se tiene funciones bases lineales, para determinar la información en el nodo i se requiere el uso de los nodos adyacentes, es decir $i-1$ e $i+1$. Entonces para funciones bases lineales el contador de la sumatoria en la ecuación (E.6) se reducen a.

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left\{ -S_j \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_j}{dz_D} - \varphi_j \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (E.7)$$

Discretizando la parte temporal de la misma forma que para el caso de diferencias finitas en el Capitulo 4, donde se aplica el método general que abarca desde el esquema explícito hasta el implícito pasando por el CN.

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left\{ - \left[(\theta) S_j^{n+1} - (\theta - 1) S_j^n \right] \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_j}{dz_D} - \varphi_j \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (\text{E.8})$$

(i = 2, 3, ..., I-1)

Lo siguiente es resolver las integrales relacionadas a la ecuación anterior, y para esto las integrales se resuelven en el espacio de las coordenadas locales ξ , en vez de las coordenadas globales z_D , debido a que las integrales se resuelven por elementos, y en general, en funciones bases de mayor orden en la aproximación, o elementos de discretización más complejos las integrales son más sencillas en el espacio de las coordenadas locales. Ahora para relacionar las coordenadas locales con las globales se requiere de una transformación que está desarrollada en el Apéndice C.

$$\Omega_i(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 + \xi) \\ \frac{1}{2}(1 - \xi) \end{cases} \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{E.9})$$

De la función de transformación entre los tipos de coordenadas solo se requiere la derivada de la coordenada global con respecto a la coordenada local y es la siguiente.

$$\frac{dz_D}{d\xi} = \frac{\Delta z_D}{2} \quad (\text{E.10})$$

Para diferenciar las integrales en el espacio de las coordenadas locales correspondientes a los elementos vecinos del nodo i se denotaran como $e1$ y $e2$; siendo $e1$, el elemento que se encuentra entre los nodos $i-1$ e i y por consiguiente i e $i+1$ encierran a $e2$.

De acuerdo con las ecuaciones (E.8), (E.9) y (E.10) se plantean y resuelvan las integrales generadas por los valores tomados por j en la ecuación (E.8), como sigue.

Caso 1: $j=i-1$

$$\begin{aligned}
\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} - \varphi_{i-1} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D} - \Omega_{i-1} \right], \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \left[\left(\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\Omega_{i-1}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} - \Omega_{i-1} \right) \frac{d\Omega_i}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \right] \frac{dz_D}{d\xi} d\xi &= \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \left[\frac{-1}{2} \left(\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} + \frac{1}{2} (1 - \xi) \right) \right] d\xi &= \frac{-1}{2} \left(1 + \frac{2}{N_{PE} \Delta z_D} \right)
\end{aligned} \tag{E.11}$$

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_{i-1}, \varphi_i \rangle &= \langle \Omega_{i-1}, \Omega_i \rangle^1 = \int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \Omega_{i-1} \Omega_i \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \frac{1}{2} (1 - \xi) \frac{1}{2} (1 + \xi) \frac{\Delta z_D}{2} d\xi &= \frac{\Delta z_D}{6}
\end{aligned} \tag{E.12}$$

Caso 2: $j=i$

$$\begin{aligned}
\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_i}{dz_D} - \varphi_i \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\Omega_i}{dz_D} - \Omega_i \right], \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 + \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\Omega_i}{dz_D} - \Omega_i \right], \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \left[\left(\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} - \frac{1}{2} (1 + \xi) \right) \frac{1}{2} \right] d\xi &+ \int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \left[\left(\frac{-1}{N_{PE} \Delta z_D} - \frac{1}{2} (1 - \xi) \right) \frac{-1}{2} \right] d\xi = \frac{2}{N_{PE} \Delta z_D}
\end{aligned} \tag{E.13}$$

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_{i-1}, \varphi_i \rangle &= \langle \Omega_i, \Omega_i \rangle^1 + \langle \Omega_i, \Omega_i \rangle^2 = \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \frac{1}{4} (1 + \xi)^2 \frac{\Delta z_D}{2} d\xi &+ \int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \frac{1}{4} (1 - \xi)^2 \frac{\Delta z_D}{2} d\xi = \frac{2\Delta z_D}{3}
\end{aligned} \tag{E.14}$$

Caso 3: $j=i+1$

$$\begin{aligned}
\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D} - \varphi_{i+1} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\Omega_{i+1}}{dz_D} - \Omega_{i+1} \right], \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \left[\left(\frac{1}{N_{PE}} \frac{d\Omega_{i+1}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} - \Omega_{i+1} \right) \frac{d\Omega_i}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \right] \frac{dz_D}{d\xi} d\xi &= \\
\int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \left[\frac{-1}{2} \left(\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} - \frac{1}{2} (1 + \xi) \right) \right] d\xi &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{N_{PE} \Delta z_D} \right)
\end{aligned} \tag{E.15}$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{i+1}, \varphi_i \rangle &= \langle \Omega_{i+1}, \Omega_i \rangle^1 = \int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \Omega_{i+1} \Omega_i \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ & \int_{\xi=-1}^{\xi=+1} \frac{1}{2} (1 + \xi) \frac{1}{2} (1 - \xi) \frac{\Delta z_D}{2} d\xi = \frac{\Delta z_D}{6} \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

Incorporando el resultado de la serie de integrales a la ecuación (E.8) se llega al siguiente sistema de ecuaciones.

$$\begin{aligned} & \theta \left\{ S_{i-1} \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} + \frac{1}{2} \right] - S_i \left[\frac{2}{N_{PE} \Delta z_D} \right] + S_{i+1} \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{n+1} \\ & - (\theta - 1) \left\{ S_{i-1} \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} + \frac{1}{2} \right] - S_i \left[\frac{2}{N_{PE} \Delta z_D} \right] + S_{i+1} \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} - \frac{1}{2} \right] \right\}^n \\ & - \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} \frac{\Delta z_D}{6} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \frac{2\Delta z_D}{3} - \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} \frac{\Delta z_D}{6} = 0 \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

Como en el caso de la aproximación en diferencias finitas, el esquema que interesa es el implícito, por lo que $\theta = 1$ y dividiendo la ecuación anterior por Δz_D .

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} + \frac{1}{2\Delta z_D} \right] S_{i-1}^{n+1} - \left[\frac{2}{N_{PE} \Delta z_D^2} \right] S_i^{n+1} + \left[\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} - \frac{1}{2\Delta z_D} \right] S_{i+1}^{n+1} \\ & - \frac{1}{6} \left[\frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 4 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} \right] = 0 \end{aligned} \quad (i=2, 3, \dots, I-1) (\text{E.17})$$

Esta última ecuación genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas, derivado por el MEEG con funciones base lineales.

Apéndice F

APROXIMACIÓN EN ELEMENTO FINITO CON FUNCIONES BASE CUADRÁTICAS

F.1 Elemento finito de Galerkin con aproximación cuadrática.

Como primer paso para la aplicación del MEFQ se define el operador diferencial que actúa sobre la ecuación diferencial (4.1).

$$L[S] = \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial S}{\partial z_D} - S \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (\text{F.1})$$

Empleando la ecuación (4.11) y tomando en cuenta el concepto de Galerkin se define la siguiente ecuación.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] - \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i(z_D) \right\rangle = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, I). \quad (\text{F.2})$$

Para reducir el orden de las derivadas en la ecuación anterior por lo general se emplea el teorema de Green, pero en el caso de una dimensión en la variable espacial, basta con una integración por partes.

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle + \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D} - \hat{S} \right] \varphi_i \Bigg|_{z_D=0}^{z_D=z_{DR}} = 0 \quad (\text{F.3})$$

(i=1, 2, 3, ..., I)

La ecuación anterior sólo se aplica en los nodos donde se desea aproximar la función desconocida, entonces en problemas como el que se está resolviendo con condiciones de frontera tipo Dirichlet, la ecuación (F.3) no se aplica para los nodos en las fronteras, es

decir los valore de i se restringen a $i=2, 3, \dots, I-1$, y al no contemplar a $\varphi_{i=1}$ y $\varphi_{i=I}$ que son las funciones base distintas de cero en las fronteras internas y externas respectivamente el último término de la ecuación (F.3) es cero. Si alguna de las fronteras no tuviera condiciones de frontera tipo Dirichlet no se anularía el tercer término de la ecuación (F.3).

$$-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial z_D}, \varphi_i \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i= 2, 3, \dots, I-1) \quad (F.4)$$

Seleccionando la función base cuadrática para la aproximación en la ecuación anterior y considerando que los parámetros a determinar son dependientes del tiempo se puede escribir a la ecuación (4.8) de la siguiente forma.

$$\hat{S}(z_D, t_D) = \sum_{j=1}^I S_j(t_D) \varphi_j(z_D) \quad (F.5)$$

Combinando el par de ecuaciones anterior se obtiene el sistema algebraico de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas.

$$\sum_{j=2}^{I-2} \left\{ \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle \right] S_j - \frac{dS}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (i= 2, 3, \dots, I-1) \quad (F.6)$$

Debido a que se tiene funciones bases cuadráticas, para determinar la información en el nodo i se requiere el uso de los cuatro nodos vecinos más cercanos al nodo i , es decir a los nodos $i-2$, $i-1$, $i+1$ e $i+2$. Entonces para funciones bases cuadráticas los términos de la sumatoria en la ecuación (F.6) se reducen a.

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left\{ \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle \right] S_j - \frac{dS}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (F.7)$$

(i= 2, 3, \dots, I-1)

Discretizando la parte temporal de la misma forma que para el caso de diferencias finitas en el Capitulo 4, en donde se aplica el método general que abarca desde el esquema explícito hasta el implícito pasando por el CN.

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left\{ [(\theta)S_j^{n+1} - (\theta-1)S_j^n] \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle \right] - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right\} = 0 \quad (\text{F.8})$$

(i = 2, 3, ..., I-1)

Lo siguiente es resolver las integrales relacionadas a la ecuación anterior, y para esto las integrales se resolverán en el espacio de las coordenadas locales ξ , en vez de las coordenadas globales z_D , debido a que las integrales se resuelven por elementos y en genera, en funciones bases de mayor orden en la aproximación o elementos de discretización más complejos, las integrales son más sencillas en el espacio de las coordenadas locales. Ahora para relacionar las coordenadas locales con las globales se requiere de una transformación que está desarrollada en el Apéndice C.

$$\Omega_i(\xi) = \begin{cases} +\frac{1}{2}\xi(1+\xi) \\ -\frac{1}{2}\xi(1-\xi) \end{cases} \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{F.9})$$

$$\Omega_{i-1}(\xi) = \Omega_{i+1}(\xi) = (1-\xi)(1+\xi) \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{F.10})$$

$$\Omega_{i-2}(\xi) = -\frac{1}{2}\xi(1-\xi) \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{F.11})$$

$$\Omega_{i+2}(\xi) = +\frac{1}{2}\xi(1+\xi) \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{F.12})$$

De la función de transformación entre los tipos de coordenadas sólo se requiere la derivada de la coordenada global con respecto a la coordenada local y es la siguiente.

$$\frac{dz_D}{d\xi} = \Delta z_D \quad (\text{F.13})$$

Para diferenciar a las integrales en el espacio de las coordenadas locales correspondientes a los elementos vecinos al nodo i se denotaran como $e1$ y $e2$; siendo $e1$, el elemento que se encuentra entre los nodos $i, i-1$ e $i-2$ y por consiguiente $i, i+1$ e $i+2$ encierran a $e2$.

De acuerdo con las ecuaciones (F.8), (F.9), (F.10), (F.11), (F.12) y (F.13) se plantean y resuelvan las integrales generadas por los valores tomados por j en la ecuación (E.8), como sigue.

Caso 1: $j=i-2$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-2}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \frac{d\Omega_i}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ &= \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \Delta z_D d\xi = \frac{1}{6\Delta z_D} \end{aligned} \quad (F.14)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle &= \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-2}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \Omega_i \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ &= \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = \frac{1}{6} \end{aligned} \quad (F.15)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{i-2}, \varphi_i \rangle &= \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-2}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \Omega_i \frac{dz_D}{d\xi} d\xi \\ &= \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = -\frac{\Delta z_D}{15} \end{aligned} \quad (F.16)$$

Caso 2: $j=i-1$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-1}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \frac{d\Omega_i}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ &= \int_{-1}^{+1} (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \Delta z_D d\xi = \frac{-4}{3\Delta z_D} \end{aligned} \quad (F.17)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle &= \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-1}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \Omega_i \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ & \int_{-1}^{+1} (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = \frac{-2}{3} \end{aligned} \quad (\text{F.18})$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{i-1}, \varphi_i \rangle &= \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-1}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \Omega_i \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ & \int_{-1}^{+1} (1 - \xi^2) \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \end{aligned} \quad (\text{F.19})$$

Caso 3: $j=i$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^{e1} + \left\langle \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^{e2} = \\ & \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2} + \xi \right)^2 \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) d\xi + \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right)^2 \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) d\xi = \frac{7}{3\Delta z_D} \end{aligned} \quad (\text{F.20})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle &= \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi + \\ & \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = 0 \end{aligned} \quad (\text{F.21})$$

$$\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right)^2 \Delta z_D d\xi + \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right)^2 \Delta z_D d\xi = \frac{8\Delta z_D}{15} \quad (\text{F.22})$$

Caso 4: $j=i+1$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^{e2} = \\ & \int_{-1}^{+1} (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) d\xi = \frac{-4}{3\Delta z_D} \end{aligned} \quad (\text{F.23})$$

$$\left\langle \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle = \int_{-1}^{+1} (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = \frac{2}{3} \quad (\text{F.24})$$

$$\langle \varphi_{i+1}, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left(1 - \xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{F.25})$$

Caso 5: $j=i+2$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \frac{d\Omega_{i-2}}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \frac{d\Omega_i}{d\xi} \frac{d\xi}{dz_D} \frac{dz_D}{d\xi} d\xi = \\ &= \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \Delta z_D d\xi = \frac{1}{6\Delta z_D} \end{aligned} \quad (\text{F.26})$$

$$\left\langle \frac{d\varphi_{i+2}}{dz_D}, \varphi_i \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = -\frac{1}{6} \quad (\text{F.27})$$

$$\langle \varphi_{i+2}, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \Delta z_D d\xi = -\frac{\Delta z_D}{15} \quad (\text{F.28})$$

Incorporando el resultado de la serie de integrales a la ecuación (F.8) se llega al siguiente sistema de ecuaciones.

$$\begin{aligned} &\theta \left\{ S_{i-2} \left[\frac{1}{6N_{PE}\Delta z_D} + \frac{1}{6} \right] + S_{i-1} \left[\frac{-4}{3N_{PE}\Delta z_D} - \frac{2}{3} \right] + S_i \left[\frac{7}{3N_{PE}\Delta z_D} \right] + S_{i+1} \left[\frac{-4}{3N_{PE}\Delta z_D} + \frac{2}{3} \right] + S_{i+2} \left[\frac{1}{6N_{PE}\Delta z_D} - \frac{1}{6} \right] \right\}^{n+1} \\ &- (\theta - 1) \left\{ S_{i-2} \left[\frac{1}{6N_{PE}\Delta z_D} + \frac{1}{6} \right] + S_{i-1} \left[\frac{-4}{3N_{PE}\Delta z_D} - \frac{2}{3} \right] + S_i \left[\frac{7}{3N_{PE}\Delta z_D} \right] + S_{i+1} \left[\frac{-4}{3N_{PE}\Delta z_D} + \frac{2}{3} \right] + S_{i+2} \left[\frac{1}{6N_{PE}\Delta z_D} - \frac{1}{6} \right] \right\}^n \\ &+ \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} \frac{\Delta z_D}{15} - \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} \frac{2\Delta z_D}{15} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \frac{8\Delta z_D}{15} - \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} \frac{2\Delta z_D}{15} + \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \frac{\Delta z_D}{15} = 0 \end{aligned} \quad (\text{F.29})$$

Como en el caso de la aproximación en diferencias finitas, el esquema que interesa es el implícito, por lo que $\theta = 1$ y multiplicando la ecuación anterior por $\frac{3}{2\Delta z_D}$.

$$\begin{aligned}
& S_{i-2} \left[\frac{1}{4N_{PE}\Delta z_D^2} + \frac{1}{4} \right] + S_{i-1} \left[\frac{-2}{N_{PE}\Delta z_D^2} - 1 \right] + S_i \left[\frac{7}{2N_{PE}\Delta z_D^2} \right] + S_{i+1} \left[\frac{-2}{N_{PE}\Delta z_D^2} + 1 \right] + S_{i+2} \left[\frac{1}{4N_{PE}\Delta z_D^2} - \frac{1}{4} \right] \\
& - \frac{1}{10} \left[-\frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8\frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right] = 0 \\
& \qquad \qquad \qquad (i=3, \dots, I-2) \quad (F.30)
\end{aligned}$$

Hasta este punto se tiene las ecuaciones que proporcionan información para determinar la aproximación en el nodo i , pero por la configuración de las funciones bases cuadráticas también se requiere de la ecuación que describe la información en el nodo $i-1$. Empleando la ecuación (F.6) para describir al nodo $i-1$ se tiene que.

$$\sum_{j=2}^{i-2} \left\{ \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle \right] S_j - \frac{dS}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right\} = 0 \quad (i=2, 4, \dots, I-1) \quad (F.31)$$

De todos los elementos de la sumatoria en la ecuación anterior los términos que no se hacen anular son los que están relacionados con los nodos $i-2$ e i .

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=i-2}^i \left\{ \left[(\theta)S_j^{n+1} - (\theta-1)S_j^n \right] \left[-\frac{1}{N_{PE}} \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle \right] - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right\} = 0 \\
& \qquad \qquad \qquad (i=2, 4, \dots, I-1) \quad (F.32)
\end{aligned}$$

Donde en la ecuación anterior se incorpora la discretización temporal.

Caso 1: $j=i-2$

$$\begin{aligned}
& \left\langle \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \frac{d\Omega_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D} \right\rangle^{e1} = \\
& \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \Delta z_D d\xi = -\frac{4}{3\Delta z_D}
\end{aligned} \quad (F.33)$$

$$\left\langle \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle = \left\langle \frac{d\Omega_{i-2}}{dz_D}, \Omega_{i-1} \right\rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) (1 - \xi^2) \Delta z_D d\xi = -\frac{2}{3} \quad (\text{F.34})$$

$$\langle \varphi_{i-2}, \varphi_{i-1} \rangle = \langle \Omega_{i-2}, \Omega_{i-1} \rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \left(-\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) (1 - \xi^2) \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{F.35})$$

Caso 2: $j=i-1$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D} \right\rangle^{e1} = \\ \int_{-1}^{+1} (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \Delta z_D d\xi &= \frac{8}{3\Delta z_D} \end{aligned} \quad (\text{F.36})$$

$$\left\langle \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle = \left\langle \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \Omega_{i-1} \right\rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) (1 - \xi^2) \Delta z_D d\xi = 0 \quad (\text{F.37})$$

$$\langle \varphi_{i-1}, \varphi_{i-1} \rangle = \langle \Omega_{i-1}, \Omega_{i-1} \rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} (1 - \xi^2)^2 \Delta z_D d\xi = \frac{16\Delta z_D}{15} \quad (\text{F.38})$$

Caso 3: $j=i$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle &= \left\langle \frac{d\Omega_i}{dz_D}, \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D} \right\rangle^{e1} = \\ \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) (-2\xi) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) \Delta z_D d\xi &= -\frac{4}{3\Delta z_D} \end{aligned} \quad (\text{F.39})$$

$$\left\langle \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \varphi_{i-1} \right\rangle = \left\langle \frac{d\Omega_i}{dz_D}, \Omega_{i-1} \right\rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \left(\frac{1}{\Delta z_D} \right) (1 - \xi^2) \Delta z_D d\xi = \frac{2}{3} \quad (\text{F.40})$$

$$\langle \varphi_{i-2}, \varphi_{i-1} \rangle = \langle \Omega_{i-2}, \Omega_{i-1} \rangle^{e1} = \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) (1 - \xi^2) \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{F.41})$$

Incorporando estas integrales a la ecuación (F.32), se tiene la siguiente ecuación.

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{2}{\Delta z_D^2 N_{PE}} - \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_{i-2} + \left[\frac{4}{\Delta z_D^2 N_{PE}} \right] S_{i-1} + \left[-\frac{2}{\Delta z_D^2 N_{PE}} + \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_i - \\ & - \frac{1}{10} \left[2 \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right] = 0 \end{aligned} \quad (F.42)$$

Las ecuaciones (F.30) y (F.42) forman el sistema de ecuación siguiente, que determina el valor de la función aproximada en los nodos, con funciones de interpolación cuadrática entre los nodos.

Ecuación para $i=3, 5, \dots, I-2$.

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{4N_{PE}\Delta z_D^2} + \frac{1}{4} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-2}{N_{PE}\Delta z_D^2} - 1 \right] S_{i-1} + \left[\frac{7}{2N_{PE}\Delta z_D^2} \right] S_i + \left[\frac{-2}{N_{PE}\Delta z_D^2} + 1 \right] S_{i+1} + \left[\frac{1}{4N_{PE}\Delta z_D^2} - \frac{1}{4} \right] S_{i+2} \\ & + \frac{1}{10} \left[-\frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right] = 0 \end{aligned} \quad (F.43a)$$

Ecuación para $i-1=2, 4, \dots, I-1$.

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{2}{\Delta z_D^2 N_{PE}} - \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_{i-2} + \left[\frac{4}{\Delta z_D^2 N_{PE}} \right] S_{i-1} + \left[-\frac{2}{\Delta z_D^2 N_{PE}} + \frac{1}{\Delta z_D} \right] S_i \\ & + \frac{1}{10} \left[2 \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right] = 0 \end{aligned} \quad (F.43b)$$

Esta última ecuación genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas, derivado por el MEFG con funciones bases cuadráticas.

Apéndice G

APROXIMACIONES DEL MODELO NO-LINEAL EN DIFERENCIAS FINITAS

G.1 Aproximación en diferencias finitas.

Retomando el modelo difusivo-convectivo no-lineal de flujo transitorio en una dimensión espacial. La discretización es elaborada por medio de la técnica de diferencias finitas empleando diferencias centrales en espacio y regresivas en tiempo, entonces la ecuación de diferencial que se desea aproximar numéricamente tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_c(S) \frac{\partial S}{\partial z} + C(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0. \quad (G.1)$$

Aplicando el esquema implícito para la discretización temporal sobre el término acumulativo de la ecuación de flujo anterior se tiene que:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_c(S) \frac{\partial S}{\partial z} + C(S) \right] \right\}_i^{n+1} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0. \quad (i=1,2,3,\dots, I) \quad (G.2)$$

Tomando al término difusivo (capilar) y convectivo de la ecuación de flujo para discretizarlo y apoyándose en las fronteras de la celda $i=-1/2$ e $i=+1/2$, con aproximación en diferencias centrales para el nodo i tenemos que:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial z_D} \left[D_c \frac{\partial S}{\partial z} + C \right] \right\}_i^{n+1} \approx \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ \left[D_c \frac{\partial S}{\partial z} + C \right]_{i+1/2} - \left[D_c \frac{\partial S}{\partial z} + C \right]_{i-1/2} \right\}^{n+1} \quad (G.3)$$

$(i=1,2,3,\dots, I)$

Considerando que el tamaño de celda es uniforme en todo el dominio y acomodando los términos, la ecuación anterior se escribe como:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_C \frac{\partial S}{\partial z_D} + C \right] \right\}_i^{n+1} \approx \left\{ \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D} [D_{C_{i+1/2}} (S_{i+1} - S_i) - D_{C_{i-1/2}} (S_i - S_{i-1})] + \frac{(C_{i+1/2} - C_{i-1/2})}{\Delta z_D} \right\}_i^{n+1} \quad (i=1,2,3,\dots, I) \quad (G.4)$$

Incorporando la discretización espacial a la ecuación (G.2).

$$\left\{ \frac{1}{\Delta z_D^2} [D_{C_{i+1/2}} (S_{i+1} - S_i) - D_{C_{i-1/2}} (S_i - S_{i-1})] + \frac{(C_{i+1/2} - C_{i-1/2})}{\Delta z_D} \right\}_i^{n+1} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \quad (i=1,2,3,\dots, I) \quad (G.5)$$

Como se puede observar de la ecuación anterior los coeficientes no-lineales requieren ser evaluados en las fronteras de los nodos, sin embargo en el Capítulo 5 se ilustra la forma de manejar al término convectivo por medio de la ecuación (G.6) y combinando dicha ecuación con la ecuación (G.5) se obtiene la ecuación (G.7).

$$\frac{(C_{i+1/2} - C_{i-1/2})}{\Delta z_D} \approx \frac{(1 - \omega)C_{i+1} + (2\omega - 1)C_i - \omega C_{i-1}}{\Delta z_D} \quad (G.6)$$

$$\frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ (D_{C_{i+1/2}} S_{i+1} - [D_{C_{i+1/2}} + D_{C_{i-1/2}}] S_i + D_{C_{i-1/2}} S_{i-1}) \right\}_i^{n+1} + \left\{ \frac{(1 - \omega)C_{i+1} + (2\omega - 1)C_i - \omega C_{i-1}}{\Delta z_D} \right\}_i^{n+1} - \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \quad (i=1,2,3,\dots, I) \quad (G.7)$$

El coeficiente no-lineal difusivo requiere un tratamiento para poder ser evaluado en las fronteras de las celdas. En la técnica estándar de diferencias finitas mayormente este problema se maneja con un promedio aritmético entre los valores de la función no-lineal en los nodos adyacentes a la frontera en cuestión. Por otro lado en el área de simulación numérica de yacimientos mayormente se aplica el criterio de corriente arriba a este término

de flujo, por lo que en este trabajo se emplea el modelo que se usó para el término convectivo, que consiste en emplear un parámetro de peso, α , para ponderar el valor de la función no-lineal en la frontera con los valores en los nodos adyacentes.

$$D_{C_{i+1/2}} = \alpha D_{C_i} + (1 - \alpha) D_{C_{i+1}} \quad (\text{G.8a})$$

$$D_{C_{i-1/2}} = \alpha D_{C_{i-1}} + (1 - \alpha) D_{C_i} \quad (\text{G.8b})$$

En el Capítulo 5 se investiga el valor óptimo de α . Con los cambios mencionados la ecuación (G.7) se convierte en:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \{ [\alpha D_{C_i} + (1 - \alpha) D_{C_{i+1}}] S_{i+1} - [(1 - \alpha) D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] S_i \\ & + [\alpha D_{C_{i-1}} + (1 - \alpha) D_{C_i}] S_{i-1} \}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z_D} \{ (1 - \omega) C_{i+1} + (2\omega - 1) C_i - \omega C_{i-1} \}^{n+1} - \quad (\text{G.9}) \\ & \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \end{aligned}$$

Debido a que se tiene una ecuación no lineal para el nodo i y para poder resolver el sistema de ecuaciones no lineales generados por la ecuación (G.9) se requiere el uso del método de Newton-Raphson para linealizar las ecuaciones y posteriormente resolverlo como el algoritmo de Thomas. Para el método de Newton se requiere definir la siguiente función de residuos:

$$\begin{aligned} R_i^{v-1}(S_{i-1}, S_i, S_{i+1}) = & \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \{ [\alpha D_{C_i} + (1 - \alpha) D_{C_{i+1}}] S_{i+1} - [(1 - \alpha) D_{C_{i+1}} + D_{C_i} + \alpha D_{C_{i-1}}] S_i \\ & + [\alpha D_{C_{i-1}} + (1 - \alpha) D_{C_i}] S_{i-1} \}^{v-1} + \frac{1}{\Delta z_D} \{ (1 - \omega) C_{i+1} + (2\omega - 1) C_i - \omega C_{i-1} \}^{v-1} - \frac{S_i^{v-1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0 \quad (\text{G.10}) \end{aligned}$$

El método de Newton se fundamenta en la expansión de la función de residuos R_i^{v-1} , en una serie de Taylor alrededor de la iteración $v-1$ y conservando solo los primeros términos de la

expansión llegamos a (G.11). Debido a que el método de Newton itera para el nivel de tiempo fijo $n+1$, ya no es necesario especificar el nivel de tiempo en las iteraciones.

$$R_i^v \approx R_i^{v-1} + \left(\frac{\partial R_i}{\partial S_{i-1}} \right)^{v-1} \delta S_{i-1}^v + \left(\frac{\partial R_i}{\partial S_i} \right)^{v-1} \delta S_i^v + \left(\frac{\partial R_i}{\partial S_{i+1}} \right)^{v-1} \delta S_{i+1}^v = 0 \quad (\text{G.11})$$

Donde v es el nivel de iteración en el método de Newton-Raphson.

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i+1}} = \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ [(1-\alpha)D_{Ci+1} + \alpha D_{Ci}] + (1-\alpha) \frac{\partial D_{Ci+1}}{\partial S_{i+1}} [S_{i+1} - S_i] \right\}^{v-1} + \frac{(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+1}^{v-1}}{\partial S_{i+1}} \quad (\text{G.12})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_i} &= \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \frac{\partial D_{Ci}}{\partial S_i} [\alpha S_{i+1} - S_i + (1-\alpha)S_{i-1}] - [(1-\alpha)D_{Ci+1} + D_{Ci} + \alpha D_{Ci-1}] \right\}^{v-1} \\ &+ \frac{(2\omega-1)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_i^{v-1}}{\partial S_i} - \frac{1}{\Delta t_D} \end{aligned} \quad (\text{G.13})$$

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i-1}} = \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ [(1-\alpha)D_{Ci} + \alpha D_{Ci-1}] + \alpha \frac{\partial D_{Ci-1}}{\partial S_{i-1}} [S_{i-1} - S_i] \right\}^{v-1} - \frac{\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}^{v-1}}{\partial S_{i-1}} \quad (\text{G.14})$$

El sistema de ecuaciones lineales generado por estas ecuaciones tiene la cualidad de ser tridiagonal y por las condiciones de frontera de tipo Dirichlet, el sistema contiene $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas y es resuelto empleando el algoritmo de Thomas.

Apéndice H

APROXIMACIÓN DEL MODELO NO-LINAL EN EFG CON FUNCIONES BASE LINEAL

H.1 Aproximación en elemento finito de Galerkin con funciones base lineal.

Como primer paso para la aplicación del MEFG se define el operador diferencial que actúa sobre la ecuación diferencial (5.1).

$$L[S] = \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z} + C(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (\text{H.1})$$

Empleando la ecuación (4.11), tomando en cuenta el concepto de Galerkin, se define la siguiente ecuación.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right] - \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i(z_D) \right\rangle = 0 \quad (i=1, 2, 3, \dots, I). \quad (\text{H.2})$$

Para reducir el orden de las derivadas en la ecuación anterior por lo general se emplea el teorema de Green, pero en el caso de una dimensión en la variable espacial basta con una integración por partes.

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle + \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right] \varphi_i \Big|_{z_D=0}^{z_D=z_{DR}} = 0 \quad (\text{H.3})$$

$(i=1, 2, 3, \dots, I)$

La ecuación anterior sólo se aplica en los nodos donde se desea aproximar la función desconocida, entonces en problemas como el que se está resolviendo con condiciones de frontera tipo Dirichlet, la ecuación (H.3) no se aplica para los nodos en las fronteras, es

decir los valore de i se restringen a $i=2, 3, \dots, I-1$, y al no contemplar a $\varphi_{i=1}$ y $\varphi_{i=I}$ que son las funciones base distintas de cero en las fronteras internas y externas respectivamente el último término de la ecuación (H.3) es cero. Si alguna de las fronteras no tuviera condiciones de frontera tipo Dirichlet no se anularía el tercer término de la ecuación (H.3).

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (H.4)$$

Seleccionando la función base lineal para la aproximación en la ecuación anterior y considerando que los parámetros a determinar son dependientes del tiempo se puede escribir a la ecuación (4.8) de la siguiente forma.

$$\hat{S}(z_D, t_D) = \sum_{j=1}^I S_j(t_D) \varphi_j(z_D) \quad (H.5)$$

Combinando el par de ecuaciones anterior se obtiene el sistema algebraico de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas.

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \left\langle \hat{D}_C \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \left\langle \hat{C}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (H.6)$$

Como los coeficientes $\hat{D}_C = \hat{D}_C(S)$ y $\hat{C} = \hat{C}(S)$ son función de S , las integrales pueden resolverse numéricamente o analíticamente por sustitución de una función que sea combinación lineal de polinomios, como la siguiente.

$$\hat{D}_C(z_D, t_D) = \sum_{k=1}^I D_{Ck}(t_D) \varphi_k(z_D) \quad (H.7a)$$

$$\hat{C}(z_D, t_D) = \sum_{k=1}^I C_k(t_D) \varphi_k(z_D) \quad (H.7b)$$

Introduciendo las aproximaciones anteriores en la ecuación (H.6) se tiene que:

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=2}^{I-1} \left\{ D_{Ck} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \sum_{k=2}^{I-1} C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0. \quad (\text{H.8})$$

$$(i=2, 3, \dots, I-1)$$

Debido a que se tiene funciones bases lineales tanto para aproximar la solución S como para aproximar los coeficientes no-lineales, entonces para determinar la información en el nodo i se requiere el uso de los nodos adyacentes, es decir $i-1$ e $i+1$. Entonces para funciones bases lineales los términos de la sumatoria en la ecuación (H.8) se reducen a.

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=i-1}^{i+1} \left\{ D_{Ck} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \sum_{k=i-1}^{i+1} C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{H.9})$$

$$(i=2, 3, \dots, I-1)$$

Discretizando la parte temporal con el esquema implícito como en el caso de diferencias finitas.

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j^{n+1} \sum_{k=i-1}^{i+1} \left\{ D_{Ck}^{n+1} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] (i=2, 3, \dots, I-1) (\text{H.10})$$

$$- \sum_{k=i-1}^{i+1} C_k^{n+1} \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0$$

Lo siguiente es resolver las integrales relacionadas a la ecuación anterior, y para esto las integrales se resuelven en el espacio de las coordenadas locales ξ , en vez de las coordenadas globales z_D , debido a que las integrales se resuelven por elementos, y en general, en funciones bases de mayor orden en la aproximación, o elementos de discretización más complejos las integrales son más sencillas en el espacio de las coordenadas locales. Ahora para relacionar las coordenadas locales con las globales se requiere de una transformación que está desarrollada en el Apéndice C.

$$\Omega_i(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1+\xi) \\ \frac{1}{2}(1-\xi) \end{cases} \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{H.11})$$

De la función de transformación entre los tipos de coordenadas solo se requiere la derivada de la coordenada global con respecto a la coordenada local y es la siguiente.

$$\frac{dz_D}{d\xi} = \frac{\Delta z_D}{2} \quad (\text{H.12})$$

Para diferenciar a las integrales en el espacio de las coordenadas locales correspondientes a los elementos vecinos al nodo i se denotaran como $e1$ y $e2$; siendo $e1$, el elemento que se encuentra entre los nodos $i-1$ e i y por consiguiente i e $i+1$ encierran a $e2$.

De acuerdo con las ecuaciones (H.10), (H.11) y (H.12) se plantean y resuelvan las integrales generadas por los valores tomados por j en la ecuación (H.10), como sigue.

Integrando los elementos del primer término:

Caso: $j=i-1$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i-1} \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = -\frac{1}{2\Delta z_D} \quad (\text{H.13a})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_i \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = -\frac{1}{2\Delta z_D} \quad (\text{H.13b})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i+1} \frac{d\Omega_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = 0 \quad (\text{H.13c})$$

$$\langle \varphi_{i-1}, \varphi_i \rangle = \langle \Omega_{i-1}, \Omega_i \rangle^1 = \frac{\Delta z_D}{6} \quad (\text{H.14})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i-1}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = \frac{1}{2} \quad (\text{H.15})$$

Caso: $j=i$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i-1} \frac{d\Omega_i}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 = \frac{1}{2\Delta z_D} \quad (\text{H.16a})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_i \frac{d\Omega_i}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 + \left\langle \Omega_i \frac{d\Omega_i}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = \frac{1}{\Delta z_D} \quad (\text{H.16b})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i+1} \frac{d\Omega_i}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = \frac{1}{2\Delta z_D} \quad (\text{H.16c})$$

$$\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = \langle \Omega_i, \Omega_i \rangle^1 + \langle \Omega_i, \Omega_i \rangle^2 = \frac{2\Delta z_D}{3} \quad (\text{H.17})$$

$$\left\langle \varphi_i, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_i, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^1 + \left\langle \Omega_i, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = 0 \quad (\text{H.18})$$

Caso: $j=i+1$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i-1} \frac{d\Omega_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = 0 \quad (\text{H.19a})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_i \frac{d\Omega_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = -\frac{1}{2\Delta z_D} \quad (\text{H.19b})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i+1} \frac{d\Omega_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = -\frac{1}{2\Delta z_D} \quad (\text{H.19c})$$

$$\langle \varphi_{i+1}, \varphi_i \rangle = \langle \Omega_{i+1}, \Omega_i \rangle^2 = \frac{\Delta z_D}{6} \quad (\text{H.20})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \left\langle \Omega_{i+1}, \frac{d\Omega_i}{dz_D} \right\rangle^2 = -\frac{1}{2} \quad (\text{H.21})$$

Incorporando el resultado de la serie de integrales a la ecuación (H.10) se llega al siguiente sistema de ecuaciones.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{C_{i+1}} + D_{C_i}}{2} \right] S_{i+1} - \left[\frac{D_{C_{i+1}} + 2D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_i + \left[\frac{D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_{i-1} \right\}^{n+1} \\ & + \left\{ \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z_D} \right\}^{n+1} - \frac{1}{6\Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (H.22)$$

Recordando el modelo para el término convectivo.

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z_D} \right|_i \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z_D} \approx \frac{(1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1}}{\Delta z_D} \quad (H.23)$$

Incorporándole al término de flujo convectivo, el modelo que evalúa el criterio de corriente arriba establecido en el Capítulo 5.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{C_{i+1}} + D_{C_i}}{2} \right] S_{i+1} - \left[\frac{D_{C_{i+1}} + 2D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_i + \left[\frac{D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_{i-1} \right\}^{n+1} \\ & + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1} \right\}^{n+1} - \\ & \frac{1}{6\Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (H.24)$$

Empleando el método de Newton-Raphson para linealizar el sistema de ecuaciones se llega al siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{aligned} & R^{v-1}(S_{i-1}, S_i, S_{i+1}) = \\ & \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{C_{i+1}} + D_{C_i}}{2} \right] S_{i+1} - \left[\frac{D_{C_{i+1}} + 2D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_i + \left[\frac{D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] S_{i-1} \right\}^{v-1} \\ & + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1} \right\}^{v-1} - \frac{1}{6\Delta t_D} \left\{ (S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n) + 4(S_i^{n+1} - S_i^n) + (S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (H.25)$$

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i+1}} = \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{C_{i+1}} + D_{C_i}}{2} \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial D_{C_{i+1}}}{\partial S_{i+1}} [S_{i+1} - S_i] \right\}^{v-1} + \frac{(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+1}^{v-1}}{\partial S_{i+1}} - \frac{1}{6\Delta t_D} \quad (\text{H.26})$$

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_i} = \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} \left[\frac{1}{2} S_{i+1} - S_i + \frac{1}{2} S_{i-1} \right] - \left[\frac{D_{C_{i+1}} + 2D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] \right\}^{v-1} + \quad (\text{H.27})$$

$$\frac{(2\omega-1)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_i^{v-1}}{\partial S_i} - \frac{4}{6\Delta t_D}$$

$$\frac{\partial R^{v-1}}{\partial S_{i-1}} = \frac{1}{N_{pe} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{D_{C_i} + D_{C_{i-1}}}{2} \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} [S_{i-1} - S_i] \right\}^{v-1} - \frac{\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}^{v-1}}{\partial S_{i-1}} - \frac{1}{6\Delta t_D}. \quad (\text{H.28})$$

Esta última ecuación genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas, derivado por el MEFG con funciones base lineal.

Apéndice I

APROXIMACIÓN DEL MODELO NO-LINAL EN EFG CON FUNCIONES BASE CUADRÁTICA

I.1 Aproximación en elemento finito de Galerkin con funciones base cuadrática.

Como primer paso para la aplicación del MEFG se define el operador diferencial que actúa sobre la ecuación diferencial (5.1).

$$L[S] = \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} D_C(S) \frac{\partial S}{\partial z} + C(S) \right] - \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (I.1)$$

Empleando la ecuación (4.11), tomando en cuenta el concepto de Galerkin, se define la siguiente ecuación.

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right] - \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i(z_D) \right\rangle = 0 \quad (i=1,2,3,\dots,I) \quad (I.2)$$

Para reducir el orden de las derivadas en la ecuación anterior por lo general se emplea el teorema de Green, pero en el caso de una dimensión en la variable espacial basta con una integración por partes.

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle + \frac{\partial}{\partial z_D} \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right] \varphi_i \Big|_{z_D=0}^{z_D=z_{DR}} = 0 \quad (I.3)$$

$(i=1, 2, 3, \dots, I)$

La ecuación anterior sólo se aplica en los nodos en los cuales se desea aproximar la función desconocida, entonces en problemas como el que se está resolviendo con condiciones de frontera tipo Dirichlet, la ecuación (I.3) no se aplica para los nodos en las fronteras, es decir

los valores de i se restringen a $i=2, 3, \dots, I-1$, y al no contemplar a $\varphi_{i=1}$ y $\varphi_{i=I}$ que son las funciones base distintas de cero en las fronteras internas y externas respectivamente el último término de la ecuación (I.3) es cero. Si alguna de las fronteras no tuviera condiciones de frontera tipo Dirichlet no se anularía el tercer término de la ecuación (I.3).

$$-\left\langle \left[\frac{1}{N_{PE}} \hat{D}_C \frac{\partial \hat{S}}{\partial z} + \hat{C} \right], \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \hat{S}}{\partial t_D}, \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (I.4)$$

Seleccionando la función base cuadrática para la aproximación en la ecuación anterior y considerando que los parámetros a determinar son dependientes del tiempo se puede escribir a la ecuación (4.8) de la siguiente forma.

$$\hat{S}(z_D, t_D) = \sum_{j=1}^I S_j(t_D) \varphi_j(z_D) \quad (I.5)$$

Combinando el par de ecuaciones anterior se obtiene el sistema algebraico de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas.

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \left\langle \hat{D}_C \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \left\langle \hat{C}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (i=2, 3, \dots, I-1) \quad (I.6)$$

Como los coeficientes $\hat{D}_C = \hat{D}_C(S)$ y $\hat{C} = \hat{C}(S)$ son función de S , las integrales pueden resolverse numéricamente o analíticamente por sustitución de una función que sea combinación lineal de polinomios, como la siguiente.

$$\hat{D}_C(z_D, t_D) = \sum_{k=1}^I D_{Ck}(t_D) \varphi_k(z_D) \quad (I.7a)$$

$$\hat{C}(z_D, t_D) = \sum_{k=1}^I C_k(t_D) \varphi_k(z_D) \quad (I.7b)$$

Introduciendo las aproximaciones anteriores en la ecuación (I.6) se tiene que:

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=2}^{I-1} \left\{ D_{Ck} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \sum_{k=2}^{I-1} C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0. \quad (I.8)$$

(i= 2, 3, ..., I-1)

Debido a que se tiene funciones bases cuadráticas, tanto para aproximar la solución S como para aproximar los coeficientes no-lineales, entonces para determinar la información en el nodo i se requiere el uso de los cuatro nodos vecinos más cercanos al nodo i , es decir a los nodos $i-2$, $i-1$, $i+1$ e $i+2$. Entonces para funciones bases cuadráticas los términos de la sumatoria en la ecuación (I.6) se reducen a.

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=i-2}^{i+2} \left\{ D_{Ck} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right] - \sum_{k=i-2}^{i+2} C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (I.9)$$

(i= 2, 3, ..., I-1)

Discretizando la parte temporal con el esquema implícito como en el caso de diferencias finitas.

$$\sum_{j=i-2}^{i+2} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j^{n+1} \sum_{k=i-2}^{i+2} \left\{ D_{Ck}^{n+1} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle \right]_{(i=2, 3, \dots, I-1)} (I.10)$$

$$- \sum_{k=i-2}^{i+2} C_k^{n+1} \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0$$

Lo siguiente es resolver las integrales relacionadas a la ecuación anterior, y para esto las integrales se resuelven en el espacio de las coordenadas locales ξ , en vez de las coordenadas globales z_D , debido a que las integrales se resuelven por elementos, y en general, en funciones bases de mayor orden en la aproximación, o elementos de discretización más complejos las integrales son más sencillas en el espacio de las coordenadas locales. Ahora para relacionar las coordenadas locales con las globales se requiere de una transformación que está desarrollada en el Apéndice C.

$$\Omega_i(\xi) = \begin{cases} +\frac{1}{2}\xi(1+\xi) \\ -\frac{1}{2}\xi(1-\xi) \end{cases} \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{I.11})$$

$$\Omega_{i-1}(\xi) = \Omega_{i+1}(\xi) = (1-\xi)(1+\xi) \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{I.12})$$

$$\Omega_{i-2}(\xi) = -\frac{1}{2}\xi(1-\xi) \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{I.13})$$

$$\Omega_{i+2}(\xi) = +\frac{1}{2}\xi(1+\xi) \quad -1 \leq \xi \leq +1 \quad (\text{I.14})$$

De la función de transformación entre los tipos de coordenadas solo se requiere la derivada de la coordenada global con respecto a la coordenada local y es la siguiente.

$$\frac{dz_D}{d\xi} = \Delta z_D \quad (\text{I.15})$$

Para diferenciar a las integrales en el espacio de las coordenadas locales correspondientes a los elementos vecinos al nodo i se denotaran como $e1$ y $e2$; siendo $e1$, el elemento que se encuentra entre los nodos i , $i-1$ e $i-2$ y por consiguiente i , $i+1$ e $i+2$ encierran a $e2$.

De acuerdo con las ecuaciones (I.10), (I.11), (I.12), (I.13), (I.14) y (I.15) se plantean y resuelvan las integrales generadas por los valores tomados por j en la ecuación (I.10), como sigue.

Caso 1: $j=i-2$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{7}{60\Delta z_D} \quad (\text{I.16a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{1}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.16b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{7}{60\Delta z_D} \quad (\text{I.16c})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.16d})$$

$$\left\langle \varphi_{i+2} \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.16e})$$

$$\langle \varphi_{i-2}, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \right] \Delta z_D d\xi = -\frac{\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.17})$$

$$\left\langle \varphi_{i-2}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = -\frac{1}{6} \quad (\text{I.18})$$

Caso 2: $j=i-1$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{1}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.19a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{8}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.19b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{11}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.19c})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.19d})$$

$$\left\langle \varphi_{i+2} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.19e})$$

$$\langle \varphi_{i-1}, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \right] \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.20})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{2}{3} \quad (\text{I.21})$$

Caso 3: $j=i$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{1}{20\Delta z_D} \quad (\text{I.22a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{3}{5\Delta z_D} \quad (\text{I.22b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi$$

$$+ \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2} \xi + \frac{1}{2} \xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{37}{30\Delta z_D} \quad (\text{I.22c})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{3}{5\Delta z_D} \quad (\text{I.22d})$$

$$\left\langle \varphi_{i+2} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{1}{20\Delta z_D} \quad (\text{I.22e})$$

$$\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \right] \Delta z_D d\xi +$$

$$\int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \right] \Delta z_D d\xi = \frac{8\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.23})$$

$$\left\langle \varphi_i, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi +$$

$$\int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = 0 \quad (\text{I.24})$$

Caso 4: $j=i+1$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.25a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.25b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{11}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.25c})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{8}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.25d})$$

$$\left\langle \varphi_{i+2} \frac{d\varphi_{i+1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$-\frac{1}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.25e})$$

$$\langle \varphi_{i+1}, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \right] \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.26})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = -\frac{2}{3} \quad (\text{I.27})$$

Caso 5: $j=i+2$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_{i+2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.28a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i+2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = 0 \quad (\text{I.28b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i+2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{7}{60\Delta z_D} \quad (\text{I.28c})$$

$$\left\langle \varphi_{i+1} \frac{d\varphi_{i+2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{1}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.28d})$$

$$\left\langle \varphi_{i+2} \frac{d\varphi_{i+2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{7}{60\Delta z_D} \quad (\text{I.28e})$$

$$\langle \varphi_{i+2}, \varphi_i \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \right] \Delta z_D d\xi = -\frac{\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.29})$$

$$\left\langle \varphi_{i+2}, \frac{d\varphi_i}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{1}{6} \quad (\text{I.30})$$

Incorporando el resultado de la serie de integrales a la ecuación (I.10) se llega al siguiente sistema de ecuaciones.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[\frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-1}{15\Delta z_D} D_{C_{i-2}} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{15\Delta z_D} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
& + \left[\frac{-1}{20\Delta z_D} D_{C_{i-2}} + \frac{3}{5\Delta z_D} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{30\Delta z_D} D_{C_i} + \frac{3}{5\Delta z_D} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{20\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\
& + \left[-\frac{11}{15\Delta z_D} D_{C_i} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} \\
& + \left. \left[\frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_i} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{n+1} + \left\{ -\frac{2}{3} [C_{i+1} - C_{i-1}] + \frac{1}{6} [C_{i+2} - C_{i-2}] \right\}^{n+1} \\
& - \frac{\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + \frac{8\Delta z_D}{15} \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \\
& + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{\Delta z_D}{15} \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{I.31}$$

Recordando el modelo para el término convectivo.

$$\frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z_D} \approx \frac{(1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1}}{\Delta z_D} \tag{I.32}$$

$$\frac{C_{i+2} - C_{i-2}}{4\Delta z_D} \approx \frac{(1-\omega)C_{i+2} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-2}}{2\Delta z_D} \tag{I.33}$$

Incorporándole al término de flujo convectivo el modelo de evaluación para el criterio de corriente arriba establecido en el Capítulo 5.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[\frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-1}{15\Delta z_D} D_{C_{i-2}} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{15\Delta z_D} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
& + \left[\frac{-1}{20\Delta z_D} D_{C_{i-2}} + \frac{3}{5\Delta z_D} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{30\Delta z_D} D_{C_i} + \frac{3}{5\Delta z_D} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{20\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\
& + \left. \left[-\frac{11}{15\Delta z_D} D_{C_i} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} + \left[\frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_i} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{60\Delta z_D} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{n+1} \\
& - \frac{\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + \frac{8\Delta z_D}{15} \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{\Delta z_D}{15} \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \\
& + \left\{ -\frac{4}{3} [(1-\omega)C_{i+1} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-1}] + \frac{2}{6} [(1-\omega)C_{i+2} + (2\omega-1)C_i - \omega C_{i-2}] \right\}^{n+1} = 0
\end{aligned}$$

$$(i=3, \dots, I-2) \quad (\text{I.34})$$

Hasta este punto se tiene las ecuaciones que proporcionan información para determinar el valor en el nodo i , pero por la configuración de las funciones base cuadrática también se requiere de la ecuación que describe la información en el nodo $i-1$. Empleando la ecuación (I.6) para describir al nodo $i-1$ se tiene que.

$$\sum_{j=2}^{I-1} \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=2}^{I-1} \left\{ D_{C_k} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{dS_j}{dt_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right] - \sum_{k=2}^{I-1} C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = 0$$

$$(i=2, 3, \dots, I-1) \quad (\text{I.35})$$

De todos los elementos de la sumatoria en la ecuación anterior los términos que no se anulan son los que están relacionados con los nodos $i-2$ e i .

$$\sum_{j=i-2}^i \left[-\frac{1}{N_{Pe}} S_j \sum_{k=i-2}^i \left\{ D_{C_k} \left\langle \varphi_k \frac{d\varphi_j}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle \right\} - \frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t_D} \langle \varphi_j, \varphi_{i-1} \rangle \right] - \sum_{k=i-2}^i C \left\langle \varphi_k, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = 0$$

$$(i=2, 4, \dots, I-1) \quad (\text{I.36})$$

Donde en la ecuación anterior se incorpora la discretización temporal.

Caso 1: $j=i-2$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{11}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.37a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(1 - \xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{8}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.37b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i-2}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(-\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{1}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.37c})$$

$$\langle \varphi_{i-2}, \varphi_{i-1} \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (1 - \xi^2) \right] \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.38})$$

$$\left\langle \varphi_{i-2}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{2}{3\Delta z_D} \quad (\text{I.39})$$

Caso 2: $j=i-1$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{4}{5\Delta z_D} \quad (\text{I.40a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(1 - \xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{16}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.40b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi =$$

$$\frac{4}{5\Delta z_D} \quad (\text{I.40c})$$

$$\langle \varphi_{i-1}, \varphi_{i-1} \rangle = \int_{-1}^{+1} [(1 - \xi^2)(1 - \xi^2)] \Delta z_D d\xi = \frac{16\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.41})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2)(-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = 0 \quad (\text{I.42})$$

Caso 3: $j=i$

$$\left\langle \varphi_{i-2} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(-\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{1}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.43a})$$

$$\left\langle \varphi_{i-1} \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[(1 - \xi^2) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{8}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.43b})$$

$$\left\langle \varphi_i \frac{d\varphi_i}{dz_D}, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) \left(\frac{1}{2} + \xi \right) \frac{1}{\Delta z_D} (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = \frac{11}{15\Delta z_D} \quad (\text{I.43c})$$

$$\langle \varphi_i, \varphi_{i-1} \rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (1 - \xi^2) \right] \Delta z_D d\xi = \frac{2\Delta z_D}{15} \quad (\text{I.44})$$

$$\left\langle \varphi_i, \frac{d\varphi_{i-1}}{dz_D} \right\rangle = \int_{-1}^{+1} \left[\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\xi^2 \right) (-2\xi) \frac{1}{\Delta z_D} \right] \Delta z_D d\xi = -\frac{2}{3\Delta z_D} \quad (\text{I.45})$$

Incorporando estas integrales a la ecuación (I.36), se tiene la siguiente ecuación.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[-\frac{11}{15\Delta z_D} D_{f(i-2)} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{f(i-1)} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{f(i)} \right] S_{i-2} \right. \\
& + \left[\frac{4}{5\Delta z_D} D_{f(i-2)} + \frac{16}{15\Delta z_D} D_{f(i-1)} + \frac{4}{5\Delta z_D} D_{f(i)} \right] S_{i-1} \\
& + \left. \left[-\frac{1}{15\Delta z_D} D_{f(i-2)} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{f(i-1)} - \frac{11}{15\Delta z_D} D_{f(i)} \right] S_i \right\}^{n+1} \\
& + \left\{ \frac{2}{3} C_{i-2} - \frac{2}{3} C_i \right\}^{n+1} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + \frac{16\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0
\end{aligned} \tag{I.46}$$

Recordando el modelo para el término convectivo.

$$\frac{C_i - C_{i-2}}{2\Delta z_D} \approx \frac{(1-\omega)C_i + (2\omega-1)C_{i-1} - \omega C_{i-2}}{\Delta z_D} \tag{I.47}$$

Incorporándole al término de flujo convectivo el modelo de evaluación para el criterio de corriente arriba establecido en el Capítulo 5.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[-\frac{11}{15\Delta z_D} D_{f(i-2)} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{f(i-1)} - \frac{1}{15\Delta z_D} D_{f(i)} \right] S_{i-2} \right. \\
& + \left[\frac{4}{5\Delta z_D} D_{f(i-2)} + \frac{16}{15\Delta z_D} D_{f(i-1)} + \frac{4}{5\Delta z_D} D_{f(i)} \right] S_{i-1} \\
& + \left. \left[-\frac{1}{15\Delta z_D} D_{f(i-2)} - \frac{8}{15\Delta z_D} D_{f(i-1)} - \frac{11}{15\Delta z_D} D_{f(i)} \right] S_i \right\}^{n+1} \\
& - \frac{4}{3} \{(1-\omega)C_i + (2\omega-1)C_{i-1} - \omega C_{i-2}\}^{n+1} \\
& + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + \frac{16\Delta z_D}{15} \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + \frac{2\Delta z_D}{15} \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} = 0
\end{aligned} \tag{I.48}$$

Las ecuaciones (I.48) e (I.34) forman el sistema de ecuaciones no-lineal siguiente, que determina el valor de la función aproximada en los nodos, con funciones de interpolación cuadrática entre los nodos.

Ecuación para $i=3, 5, \dots, I-2$.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{40} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{-1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
& + \left[\frac{-3}{40} D_{C_{i-2}} + \frac{9}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{20} D_{C_i} + \frac{9}{10} D_{C_{i+1}} - \frac{3}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\
& + \left. \left[-\frac{11}{10} D_{C_i} - \frac{4}{5} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{10} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} + \left[\frac{7}{40} D_{C_i} - \frac{1}{10} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{n+1} \\
& + \frac{1}{10} \left\{ -\frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{n+1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right\} \\
& + \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ \frac{1}{2} (1-\omega) C_{i+2} - 2(1-\omega) C_{i+1} - \frac{3}{2} (2\omega-1) C_i + 2\omega C_{i-1} - \frac{1}{2} \omega C_{i-2} \right\}^{n+1} = 0
\end{aligned} \tag{I.49}$$

Ecuación para $i-1=2, 4, \dots, I-1$.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{1}{10} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{6}{5} D_{C_{i-2}} + \frac{8}{5} D_{C_{i-1}} + \frac{6}{5} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\
& + \left. \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_i \right\}^{n+1} - \frac{2}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega) C_i + (2\omega-1) C_{i-1} - \omega C_{i-2} \right\}^{n+1} \tag{I.50} \\
& + \frac{1}{10} \left\{ 2 \frac{S_{i-2}^{n+1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t_D} \right\} = 0
\end{aligned}$$

Empleando el método de Newton-Raphson para linealizar el sistema de ecuaciones se llega al siguiente conjunto de ecuaciones:

Ecuaciones para $i=3, 5, \dots, I-2$.

$$\begin{aligned}
R^{v-1}(S_{i-2}, S_{i-1}, S_i, S_{i+1}, S_{i+2}) &\approx \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{40} D_{C_i} \right] S_{i-2} \right. \\
&+ \left[\frac{-1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_{i-1} + \left[\frac{-3}{40} D_{C_{i-2}} + \frac{9}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{20} D_{C_i} + \frac{9}{10} D_{C_{i+1}} - \frac{3}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_i \\
&+ \left. \left[-\frac{11}{10} D_{C_i} - \frac{4}{5} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{10} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+1} + \left[\frac{7}{40} D_{C_i} - \frac{1}{10} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{40} D_{C_{i+2}} \right] S_{i+2} \right\}^{v-1} \\
&+ \frac{1}{\Delta z_D} \left\{ \frac{1}{2} (1-\omega) C_{i+2} - 2(1-\omega) C_{i+1} - \frac{3}{2} (2\omega-1) C_i + 2\omega C_{i-1} - \frac{1}{2} \omega C_{i-2} \right\}^{v-1} \\
&+ \frac{1}{10} \left\{ -\frac{S_{i-2}^{v-1} - S_{i-2}^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i-1}^{v-1} - S_{i-1}^n}{\Delta t_D} + 8\frac{S_i^{v-1} - S_i^n}{\Delta t_D} + 2\frac{S_{i+1}^{v-1} - S_{i+1}^n}{\Delta t_D} - \frac{S_{i+2}^{v-1} - S_{i+2}^n}{\Delta t_D} \right\} = 0
\end{aligned} \tag{I.51}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_{i-2}}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_{i-2}} - \frac{1}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{7}{40} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-2}}}{\partial S_{i-2}} \left[\frac{7S_{i-2}}{40} - \frac{S_{i-1}}{10} - \frac{3S_i}{40} \right] \right\}^{v-1} \\
&- \frac{\omega}{2\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-2}}{\partial S_{i-2}}^{v-1} - \frac{1}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{I.52}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_{i-1}}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{-1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} \left[-\frac{S_{i-2}}{10} - \frac{4S_{i-1}}{5} + \frac{9S_i}{10} \right] \right\}^{v-1} \\
&+ \frac{2\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-1}}{\partial S_{i-1}}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{I.53}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_i}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[\frac{-3}{40} D_{C_{i-2}} + \frac{9}{10} D_{C_{i-1}} + \frac{37}{20} D_{C_i} + \frac{9}{10} D_{C_{i+1}} - \frac{3}{40} D_{C_{i+2}} \right] \right. \\
&+ \left. \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} \left[\frac{7S_{i-2}}{40} - \frac{11S_{i-1}}{10} + \frac{37S_i}{20} - \frac{11S_{i+1}}{10} + \frac{7S_{i+2}}{40} \right] \right\}^{v-1} - \frac{3(2\omega-1)}{2\Delta z_D} \frac{\partial C_i}{\partial S_i}^{v-1} + \frac{8}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{I.54}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial S_{i+1}}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_i} - \frac{4}{5} D_{C_{i+1}} - \frac{1}{10} D_{C_{i+2}} \right] + \frac{\partial D_{C_{i+1}}}{\partial S_{i+1}} \left[\frac{9S_i}{10} - \frac{4S_{i+1}}{5} - \frac{S_{i+2}}{10} \right] \right\}^{v-1} \\
&- \frac{2(1-\omega)}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial S_{i+1}}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D}
\end{aligned} \tag{I.55}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i+2}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[\frac{7}{40} D_{C_i} - \frac{1}{10} D_{C_{i+1}} + \frac{7}{40} D_{C_{i+2}} \right] + \frac{\partial D_{C_{i+2}}}{\partial S_{i+2}} \left[-\frac{3S_i}{40} - \frac{S_{i+1}}{10} + \frac{7S_{i+2}}{40} \right] \right\}^{v-1} \\ &+ \frac{(1-\omega) \partial C_{i+2}}{2\Delta z_D \partial S_{i+2}}{}^{v-1} - \frac{1}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (I.56)$$

Ecuaciones para $i-1=2, 4, \dots, I-1$.

$$\begin{aligned} R^{v-1}(S_{i-2}, S_{i-1}, S_i) &\approx \\ \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} &\left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{1}{10} D_{C_i} \right] S_{i-2} + \left[\frac{6}{5} D_{C_{i-2}} + \frac{8}{5} D_{C_{i-1}} + \frac{6}{5} D_{C_i} \right] S_{i-1} \right. \\ &+ \left. \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] S_i \right\}^{v-1} - \frac{2}{\Delta z_D} \left\{ (1-\omega)C_i + (2\omega-1)C_{i-1} - \omega C_{i-2} \right\}^{v-1} \\ &+ \frac{1}{10} \left\{ 2 \frac{S_{i-2}{}^{v-1} - S_{i-2}{}^n}{\Delta t_D} + 16 \frac{S_{i-1}{}^{v-1} - S_{i-1}{}^n}{\Delta t_D} + 2 \frac{S_i{}^{v-1} - S_i{}^n}{\Delta t_D} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (I.57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i-2}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE}} \left\{ \left[-\frac{11}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{1}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-2}}}{\partial S_{i-2}} \left[-\frac{11S_{i-2}}{10\Delta z_D} + \frac{4S_{i-1}}{5\Delta z_D} - \frac{S_i}{10\Delta z_D} \right] \right\}^{v-1} \\ &+ \frac{2\omega}{\Delta z_D} \frac{\partial C_{i-2}}{\partial S_{i-2}}{}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (I.58)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_{i-1}}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_{i-1}}}{\partial S_{i-1}} \left[-\frac{4S_{i-2}}{5} + \frac{8S_{i-1}}{5} - \frac{4S_i}{5} \right] \right\}^{v-1} \\ &- \frac{2(2\omega-1) \partial C_{i-1}}{\Delta z_D \partial S_{i-1}}{}^{v-1} + \frac{16}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (I.59)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial S_i}{}^{v-1} &= \frac{1}{N_{PE} \Delta z_D^2} \left\{ \left[-\frac{1}{10} D_{C_{i-2}} - \frac{4}{5} D_{C_{i-1}} - \frac{11}{10} D_{C_i} \right] + \frac{\partial D_{C_i}}{\partial S_i} \left[-\frac{S_{i-2}}{10} + \frac{6S_{i-1}}{5} - \frac{11S_i}{10} \right] \right\}^{v-1} \\ &- \frac{2(1-\omega) \partial C_i}{\Delta z_D \partial S_i}{}^{v-1} + \frac{2}{10\Delta t_D} \end{aligned} \quad (I.60)$$

Este conjunto de ecuación genera un sistema de $I-2$ ecuaciones con $I-2$ incógnitas, derivado por el MEFM con funciones base cuadráticas.

Apéndice J

SOLUCIÓN ANALÍTICA POR EL MÉTODO DE BUCKLEY Y LEVERETT

J.1 Perfil de saturaciones para permeabilidades relativas tipo Corey.

El método de solución para determinar la solución fue desarrollado por Buckley-Leverett, en el cual sólo se consideran las fuerzas convectivas. En este apéndice se determinan dos soluciones analíticas que resuelven dos problemas de flujo cada uno y sirven para validar los resultados numéricos de los problemas de flujo convectivo del Capítulo 5. En el caso I el flujo es viscoso y en el caso II el flujo es influenciado por fuerzas viscosas y gravitacionales.

Entonces la ecuación de flujo es,

$$\frac{\partial f_w}{\partial z_D} + \frac{\partial S}{\partial t_D} = 0 \quad (\text{J.1})$$

Empleando a los modelos para las permeabilidades relativos de tipo Corey se puede establecer la siguiente ecuación, donde los números adimensionales son los establecidos en el Capítulo 3.

$$f_w = u_{wDG} + u_{wDV} = \frac{MS^{nw} - N_G(1-S)^{no} S^{nw}}{MS^{nw} + (1-S)^{no}} \quad (\text{J.2})$$

En esta sección se muestra un algoritmo de solución para determinar expresiones analíticas de la ecuación (J.1), en el problema de B-L, pero lo importante de este algoritmo es que, para algunos casos se pueden obtener solución explícitas, $S = S(z_D, t_D)$, para el perfil de saturaciones y no para la posición, $z_D = z_D(S, t_D)$, como lo muestra el método de BL.

Empleando el método de Welge para obtener la saturación en el frente de convección S_f y la saturación promedio detrás del frente \bar{S} . Se plantea un sistema de ecuaciones que nos proporcione la recta tangente a $f(S)$, en la saturación S_f , dicho sistema es el siguiente.

Caso I: que solo considera al término viscoso, con $nw = no2$ y $N_G = 0$.

$$f|_{S_f} = \frac{MS_f^2}{MS_f^2 + (1 - S_f)^2} \quad (J.3a)$$

$$\frac{df}{dS}|_{S_f} = m = \frac{2MS_f(1 - S_f)}{[1 - 2S_f + (1 + M)S_f^2]^2} \quad (J.3b)$$

$$f|_{S_f} = mS_f \quad (J.3c)$$

Caso II: que considera a los términos viscosos y gravitacionales, con $nw = 2$, $no = 1$ y $N_G = -1$.

$$f|_{S_f} = \frac{MS_f^2 + (1 - S_f)S_f^2}{MS_f^2 + (1 - S_f)} \quad (J.4a)$$

$$\frac{df}{dS}|_{S_f} = m = \frac{(S_f - 1)S_f(2 - 2S_f + M(2 + S_f + S_f^2))}{[1 - S_f + MS_f^2]^2} \quad (J.4b)$$

$$f|_{S_f} = mS_f \quad (J.4c)$$

La solución los sistemas de ecuaciones (J.3) y (J.4) son los siguientes:

Caso I:

$$S_f = \frac{1}{\sqrt{1 + M}} \quad (J.5a)$$

$$m = \frac{1}{2} \frac{M}{\sqrt{1 + M} - 1} \quad (J.5b)$$

$$f|_{S_f} = \frac{1}{2\sqrt{1 + M}} \frac{M}{\sqrt{1 + M} - 1} \quad (J.5c)$$

Caso II:

$$S_f = \frac{M\sqrt{2+M} - 1}{M^2 + M - 1} = 0.732051 \quad (\text{J.6a})$$

$$m = \frac{-4M + \sqrt{2+M} + M^3\sqrt{2+M} + 2M^2(\sqrt{2+M} - 1)}{2M^3 + \sqrt{2+M} - 3M\sqrt{2+M} - M^2(-4 + \sqrt{2+M})} = 1.1547 \quad (\text{J.6b})$$

$$f|_{S_f} = \frac{6M + 4M^4 + M^5 - \sqrt{2+M} + M^2(3 - 6\sqrt{2+M}) + M^3(4 - 3\sqrt{2+M})}{(M^2 + M - 1)(2M^3 + \sqrt{2+M} - 3M\sqrt{2+M} - M^2(\sqrt{2+M} - 4))} = 0.845299 \quad (\text{J.6c})$$

donde la relación de movilidades en sus puntos finales es, $M = 1$.

De esta forma, dado los valores de no y nw , se pueden determinar expresiones analíticas que nos proporciona los valores de la saturación del frente de convección S_f y la saturación promedio detrás del frente \bar{S} (ya que $\bar{S} = 1/m$). Por lo que fijando el valor de $M=1$ se tiene que $S_f=0.7071$ y $\bar{S}=0.8284$. Análogamente se determinan los parámetros para el caso II, como lo muestran las ecuaciones (J.6).

Ahora la solución analítica que propone Buckley-Leverett es la siguiente.

$$z_D = t_D \frac{df}{dS}; \quad S_f \leq S \leq 1 \quad (\text{J.7})$$

Por lo que se llega a la siguiente ecuación:

Caso I:

$$z_D = t_D \frac{2S(1-S)}{[1-2S+2S^2]^2} \quad (\text{J.8})$$

Caso II:

$$z_D = -t_D \frac{S(S^3 - 2S^2 + 5S - 4)}{[1 - S + S^2]^2} \quad (\text{J.9})$$

Resolviendo esta ecuación se obtiene cuatro soluciones, pero solo una es la posible por lo que las otras tres proporcionan resultados físicamente imposibles. Entonces las soluciones de interés son:

Caso I:

$$S(z_D, t_D) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\sqrt{-t_D z_D - z_D^2 + \sqrt{t_D z_D} \sqrt{t_D + 4z_D}}}{z_D} \right] \quad (\text{J.10})$$

Caso II:

$$S(z_D, t_D) = \frac{t_D + z_D + \sqrt{(-t_D - z_D)^2 - 4(t_D + z_D)(2t_D + z_D - \sqrt{t_D} \sqrt{4t_D + 3z_D})}}{2(t_D + z_D)} \quad (\text{J.11})$$

Las ecuaciones anteriores son validas desde $z_D = 0$ hasta la posición del frente a una t_D dado. Y para determinar la posición del frente a un tiempo dado hay que recordar que el frente de desplazamiento viaja a velocidad constante. Por lo que si la velocidad de desplazamiento en variables adimensionales esta dado por la pendiente m . Entonces la posición del frente ha un tiempo dado esta dado por:

$$z_{Df} = \frac{t_D}{S} \quad (\text{J.12})$$

Y así la solución analítica para cualquier tiempo, de este caso en particular es:

Caso I:

$$S(z_D, t_D) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\sqrt{-t_D z_D - z_D^2 + \sqrt{t_D z_D} \sqrt{t_D + 4z_D}}}{z_D} \right] & 0 \leq z_D \leq 1.2t_D \\ 0 & z_D > 1.2t_D \end{cases}, \quad (\text{J.13})$$

Caso II:

$$S(z_D, t_D) = \begin{cases} \frac{t_D + z_D + \sqrt{(-t_D - z_D)^2 - 4(t_D + z_D)(2t_D + z_D - \sqrt{t_D} \sqrt{4t_D + 3z_D})}}{2(t_D + z_D)} & 0 \leq z_D \leq 1.15t_D \\ 0 & z_D > 1.15t_D \end{cases}, \quad (\text{J.14})$$

De estas soluciones se observa el perfil de saturaciones de discontinuo y la posición de este punto de discontinuidad varía conforme el tiempo adimensional avanza. Las soluciones analíticas derivadas en este apéndice son comparadas en el Capítulo 5 con las soluciones numéricas del modelo de flujo no-lineal.