



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

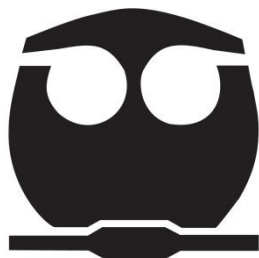
APLICACIÓN DEL REACTOR DE  
GIBBS PARA SIMULAR  
*COMBUSTIÓN IN SITU* EN UN  
YACIMIENTO PETROLÍFERO  
CON EL SIMULADOR ASPEN PLUS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A

EDGAR ARAGÓN CLARA



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2017



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## **JURADO ASIGNADO:**

**PRESIDENTE:**      Profesor: ENRIQUE RODOLFO BAZÚA RUEDA

**VOCAL:**            Profesor: JOSÉ FERNANDO BARRAGÁN AROCHE

**SECRETARIO:**    Profesor: MARTÍN RIVERA TOLEDO

**1er. SUPLENTE:**   Profesor: MILTON THADEU GARCÍA MEDEIROS DE OLIVEIRA

**2do. SUPLENTE:**   Profesora: ILEANA RODRÍGUEZ CASTAÑEDA

## **SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

**CONJUNTO E, DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.**

**ASESOR DEL TEMA:**

---

**DR. JOSÉ FERNANDO BARRAGÁN AROCHE**

**SUSTENTANTE:**

---

**EDGAR ARAGÓN CLARA**

## RESUMEN

Con el incremento de las necesidades energéticas convencionales, algunos reservorios de petróleo se han vuelto difíciles de encontrar y de perforar; por esta razón la industria petrolera ha buscado alternativas como la recuperación mejorada de reservas que están constituidas por petróleo pesado y ligero. Tradicionalmente, las fracciones de petróleo pesado han sido consideradas como ineficientes y de extracción costosa, sin embargo, una de las apuestas tecnológicas se ha enfocado a la exploración y explotación de los yacimientos que contienen aceites pesados con agentes químicos en general y, en particular, las tecnologías de combustión in situ.

Es aquí donde el profesional de la Ingeniería Química debe intervenir, pues se encarga del desarrollo y optimización de procesos relacionados con la fase de extracción en presencia de agentes químicos; la labor que los ingenieros químicos enfrentan en la actualidad conlleva al uso y aplicación de programas computacionales que faciliten el cálculo y la estimación de resultados numéricos que expresen de la mejor manera los fenómenos que ocurren en un yacimiento petrolífero.

Es por eso, que el presente trabajo, tiene como fin el mostrar el desarrollo de una simulación del proceso de combustión in situ con ayuda del simulador Aspen Plus®, además de establecer distintos casos de estudios con el fin de obtener un ambiente de simulación que represente, con cierto grado de aproximación, una aplicación experimental sobre dicho proceso.

# ÍNDICE

<b>NOMENCLATURA</b> .....	<b>1</b>
<b>OBJETIVOS</b> .....	<b>2</b>
<b>ALCANCES</b> .....	<b>2</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b> .....	<b>3</b>
<b>Capítulo 1: CONCEPTOS GENERALES DE LA COMBUSTIÓN IN SITU</b> .....	<b>5</b>
1.1. Recuperación primaria .....	5
1.2. Recuperación secundaria.....	6
1.3. Recuperación mejorada .....	8
1.4. Combustión in situ.....	9
1.4.1. Tipos de combustión in situ.....	11
1.5. Reacciones químicas asociadas con la combustión in situ.....	16
1.5.1. Oxidación a bajas temperaturas (OBT) .....	17
1.5.2. Reacciones de pirólisis .....	18
1.5.3. Oxidación en altas temperaturas (OAT) .....	21
1.6. Criterio de selección para procesos de combustión .....	22
<b>Capítulo 2: DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO DE SIMULACIÓN</b> .....	<b>24</b>
2.1. Marco teórico .....	24
2.1.1. Descripción del sistema .....	25
2.1.2. Definición de equilibrio.....	26
2.1.3. Equilibrio de fases .....	27
2.1.4. Equilibrio químico .....	28
2.1.5. Termodinámica de la combustión.....	33
2.2. Reactor de Gibbs .....	35
2.2.1. Pestaña de especificaciones.....	36
2.2.2. Pestaña de productos.....	39
2.2.3. Asignación de corrientes.....	40
2.3. Implementación del modelo de simulación .....	41
2.3.1. Propiedades del fluido de yacimiento .....	41
2.3.2. Corrientes de alimentación y modelo termodinámico.....	42
2.3.3. Simulación de combustión seca.....	45
2.3.4. Simulación de combustión húmeda.....	49
2.3.5. Análisis de sensibilidad.....	51
<b>Capítulo 3: VALIDACIÓN Y RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN</b> .....	<b>53</b>
3.1. Caso adiabático .....	55
3.2. Caso isotérmico .....	57
3.3. Análisis de sensibilidad .....	60
3.4. Planteamiento de pseudoreacciones químicas .....	78

3.4.1.	Combustión seca .....	79
3.4.2.	Combustión húmeda.....	80
3.5.	Cálculo de las constantes de equilibrio.....	84
3.6.	Efecto del O <sub>2</sub> en las reacciones de combustión .....	89
<b>Capítulo 4: CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....</b>		<b>97</b>
<b>ANEXOS.....</b>		<b>99</b>
ANEXO I. LISTA Y COMPOSICIÓN MOLAR DE ESPECIES QUÍMICAS DECLARADAS .....		100
ANEXO II. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN SECA ADIABÁTICA .....		106
ANEXO III. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN HÚMEDA ADIABÁTICA .....		111
ANEXO IV. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN SECA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE YACIMIENTO .....		116
ANEXO V. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE YACIMIENTO .....		120
ANEXO VI. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN SECA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE OAT .....		124
ANEXO VII. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE OAT.....		128
ANEXO VIII. RESULTADOS DE LOS ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD .....		132
	Combustión Adiabática.....	132
	Combustión Isotérmica .....	144
ANEXO IX. MEMORIA DE CÁLCULO PARA LA OBTENCIÓN DE COEFICIENTES ESTEQUIOMÉTRICOS .....		164
<b>BIBLIOGRAFÍA .....</b>		<b>167</b>

# NOMENCLATURA

$M_{w,o}$  : Razón de movilidad (agua/aceite)

$K_i$  : Movilidad de la fase desplazante

$\gamma_i$  : Viscosidad del fluido  $i$  desplazado

$G$  : Energía de Gibbs

$G^t$  : Energía de Gibbs total del sistema

$G_i^0$  : Energía de Gibbs estándar de reacción

$\Delta G_{f_i}^\circ$  : Cambio de la energía de Gibbs estándar de formación para la especie  $i$

$U$  : Energía interna del sistema

$H$  : Entalpía del sistema

$V$  : Volumen del sistema

$S$  : Entropía total del sistema cerrado

$T$  : Temperatura absoluta del sistema en equilibrio [K]

$P$  : Presión de equilibrio [atm]

$P^0$  : Presión de referencia [ $P^\circ = 1$  atm]

$n_i$  : Número de moles del componente  $i$

$\mu_i$  : Potencial químico del componente  $i$  en la mezcla

$A_k$  : Número total de masas atómicas del  $k$ -ésimo elemento en el sistema

$a_{ik}$  : Número de átomos del elemento del  $k$ -ésimo elemento presente en la especie química  $i$

$\lambda_k$  : Multiplicador de Lagrange para el elemento  $k$

$f_i^\circ$  : Fugacidad de la especie  $i$  pura a condiciones estándar

$\hat{f}_i$  : Fugacidad de la especie  $i$  en la solución

$R$  : Constante universal de los gases

## **OBJETIVOS**

- Construir un modelo de simulación basado en el reactor de Gibbs, que permita estudiar el fenómeno de combustión in situ dentro de un yacimiento petrolífero.
- Demostrar la posible formación de sólidos dentro del yacimiento petrolífero.
- Conocer, por medio de distintos escenarios de operación del reactor de Gibbs, cuáles son los posibles compuestos químicos que se producen a partir del uso de la termodinámica.

## **ALCANCES**

- Diagramas y sus respectivas condiciones de operación establecidas en la simulación.
- Condiciones límite de las variables de proceso en donde se inicia la formación de compuestos sólidos para cada caso de estudio.
- Resultados de los análisis de sensibilidad para cada caso de estudio, análisis y conclusiones.



---

## INTRODUCCIÓN

---

Dentro de la industria petrolera, el campo de acción del Ingeniero Químico es una de las más amplias y complejas tareas para el desarrollo y optimización de los recursos en dicha industria. Una labor relevante es la maximización, en cuanto al aprovechamiento, de recursos contenidos en los yacimientos petrolíferos.

Una de las tantas formas estudiadas de aprovechamiento es la *Recuperación Térmica*; Alvarado [1] la define como el proceso mediante el cual se introduce calor dentro de las acumulaciones subterráneas de compuestos orgánicos con el propósito de producir combustibles por medio de los pozos.

Las razones por las que se utilizan los métodos térmicos provienen de la idea que para la explotación de petróleos viscosos, que son los de mayor interés de estudio, se utiliza el calor para mejorar la eficiencia del desplazamiento y de la extracción; asimismo, el uso de estos métodos se debe a que los volúmenes de los hidrocarburos descubiertos permanecen en el subsuelo, por lo cual el reto para la recuperación de los yacimientos es mayor y estas técnicas aplicadas ayudan a obtener una recuperación mejorada. La reducción en la viscosidad del petróleo que viene acompañado de un incremento en la temperatura la cual permite no solamente que el petróleo fluya con mayor facilidad, sino que resulte en una razón de movilidad más favorable.

Donde la razón de movilidad (ec. A) se define como la movilidad de la fase desplazante (agua o gas), dividida por la movilidad del fluido desplazado (petróleo).

$$M_{w,o} = \frac{\frac{\kappa_w}{\gamma_w}}{\frac{\kappa_o}{\gamma_o}} \quad (A)$$

Si  $M_{w,o} < 1$ , la razón de movilidad es favorable para el fluido desplazante y si  $M_{w,o} > 1$ , la razón de movilidad del fluido desplazante es desfavorable.

En este trabajo, se presenta el uso y aplicación del software Aspen Plus® para desarrollar un modelo de simulación que representa con cierto grado de aproximación una aplicación experimental de lo que sucede con la combustión *in situ*, con datos e información recopilada de la literatura sobre este proceso.

En el primer capítulo del presente trabajo, se muestra un panorama en donde se definen los conceptos de recuperación de petróleo (primaria, secundaria y mejorada), así como la idea global sobre la combustión *in situ* en el cual se ahonda sobre las distintas metodologías que se llevan a cabo en algunos yacimientos.

El segundo capítulo se abordarán temas relacionados con la parte teórica de la simulación por métodos computacionales desde el punto de vista termodinámico y las características y condiciones de operación que se deben establecer para llevar a cabo la simulación del proceso de combustión *in situ*.

En el tercer capítulo se mostrarán los resultados obtenidos de la simulación, tanto de los casos base, como de los análisis de sensibilidad para encontrar el mejor arreglo que le permita al proceso de combustión *in situ* ser el óptimo y aplicable de acuerdo a las condiciones del yacimiento.

Por último, en el cuarto y último capítulo se determinan y detallan las conclusiones a las que se llega al abordar el problema desde el punto de vista termodinámico y la aplicación que se puede establecer al combinarlo con el uso de un simulador de procesos.

---

# Capítulo 1: CONCEPTOS GENERALES DE LA COMBUSTIÓN IN SITU

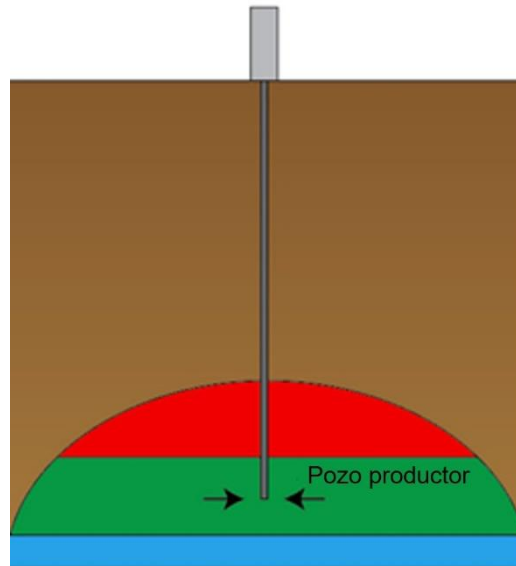
---

La cantidad de petróleo presente en un yacimiento después de la recuperación primaria representa aproximadamente el 80% del volumen original en el mejor de los casos, motivo por el cual es necesario establecer métodos de recuperación secundaria y mejorada que permitan seguir produciendo petróleo en los próximos años.

Bajo esta consigna se han llegado a considerar los procesos térmicos de Recuperación Mejorada con el fin de incrementar y recuperar los volúmenes remanentes de los yacimientos en etapas avanzadas de producción. Los procesos térmicos de extracción que se encuentran disponibles para su aplicación se clasifican en dos tipos mencionados por Alvarado: aquellos que implican la inyección de un fluido caliente en el yacimiento y los que utilizan la generación de calor en el propio yacimiento. A estos últimos se les conoce como “procesos in situ”, el más recomendado por los autores es la *combustión in situ*.

## 1.1. Recuperación primaria

Hernández [2] menciona que, en la recuperación primaria, el aceite es obligado a abandonar el yacimiento por la presión natural que existe entre los fluidos atrapados dentro del mismo; la eficiencia en el desplazamiento depende de la presión natural que es originada por varias fuerzas: por expansión del gas, gravitacional, empuje del agua y una de expulsión debido a la compactación de las rocas. La expansión del gas es la fuerza que más contribuye a la producción de aceite. Las fuerzas en el yacimiento pueden actuar simultánea o secuencialmente dependiendo de la composición y las propiedades del yacimiento, ver figura 1.

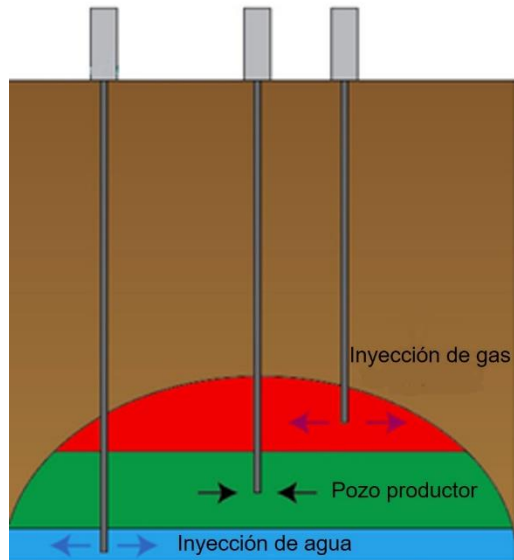


**Figura 1. Recuperación primaria (Fuente: DrillingFormulas.com).**

Asimismo, la fuerza gravitacional presenta una mayor efectividad en yacimientos inclinados ya que facilita el drenaje de aceite, esta fuerza no es efectiva por si sola cuando se requiere desplazar grandes cantidades de aceite en un pozo productor. Otra fuerza que presenta mayor efectividad para desplazar el aceite es el empuje por agua del sitio o del fondo del yacimiento, esta capacidad depende de la distribución de la presión del yacimiento y de la permeabilidad del medio poroso.

## **1.2. Recuperación secundaria**

En el momento en que la presión del yacimiento se ve disminuida hasta un punto donde ya no existe una extracción eficaz del aceite, es necesario inyectar agua o gas para incrementar la presión existente en el yacimiento. Este método de recuperación se emplea cuando la producción del aceite obtenido vía recuperación primaria empieza a decaer y se requiere aumentar la presión para mantener una producción constante, ver figura 2.



**Figura 2. Recuperación secundaria (Fuente: DrillingFormulas.com).**

La baja en la presión puede ser compensada por los siguientes métodos:

**1. Inyección de gas:** esta categoría puede ser subdividida en dos:

- **Restauración de la presión:** el gas se inyecta en el pozo productor, mientras que otros pozos son cerrados hasta que la presión sea restaurada a lo largo de todo el pozo.
- **Mantenimiento de la presión:** el gas de los pozos productores es comprimido y se inyecta en los pozos seleccionados antes de que la presión total del yacimiento se agote totalmente.

**2. Inyección de agua:** durante este proceso, el agua inyectada produce el desplazamiento del aceite a través de las rocas del mismo hacia el pozo productor.

### 1.3. Recuperación mejorada

Reyes [3] define a la recuperación mejorada como el suministro de energía externa a través de la inyección de gases inertes como nitrógeno, oxígeno, dióxido de carbono o aire; también puede suministrarse algunos agentes químicos como surfactantes y polímeros, agua, microorganismos y combinaciones de todos estos procesos, ver figura 3.

Además, en algunos se utiliza energía térmica externa que es suministrada a través de un fluido caliente, ó, la energía que se genera por el propio yacimiento (procesos in situ). Este método de recuperación se utiliza cuando el aceite contenido en los yacimientos comienza una fase de agotamiento proveniente de la recuperación secundaria. La figura 4 muestra la forma resumida en la que Hernández [2] resume los principales métodos de recuperación mejorada.

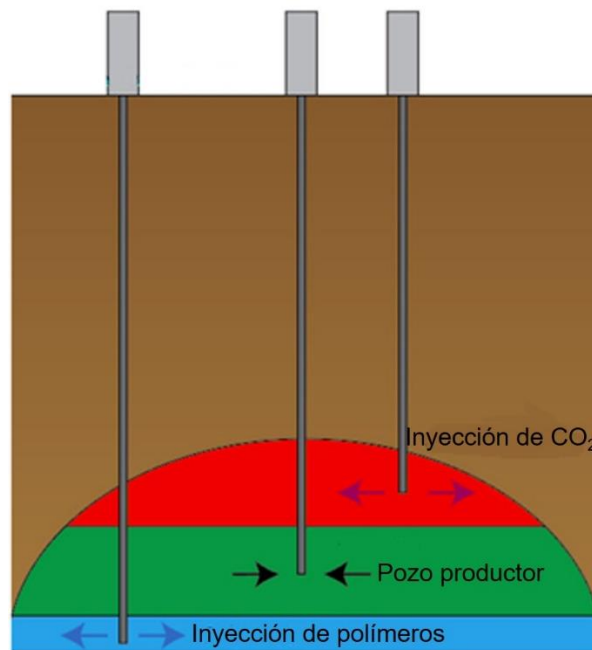


Figura 3. Recuperación mejorada (Fuente: [DrillingFormulas.com](http://DrillingFormulas.com)).

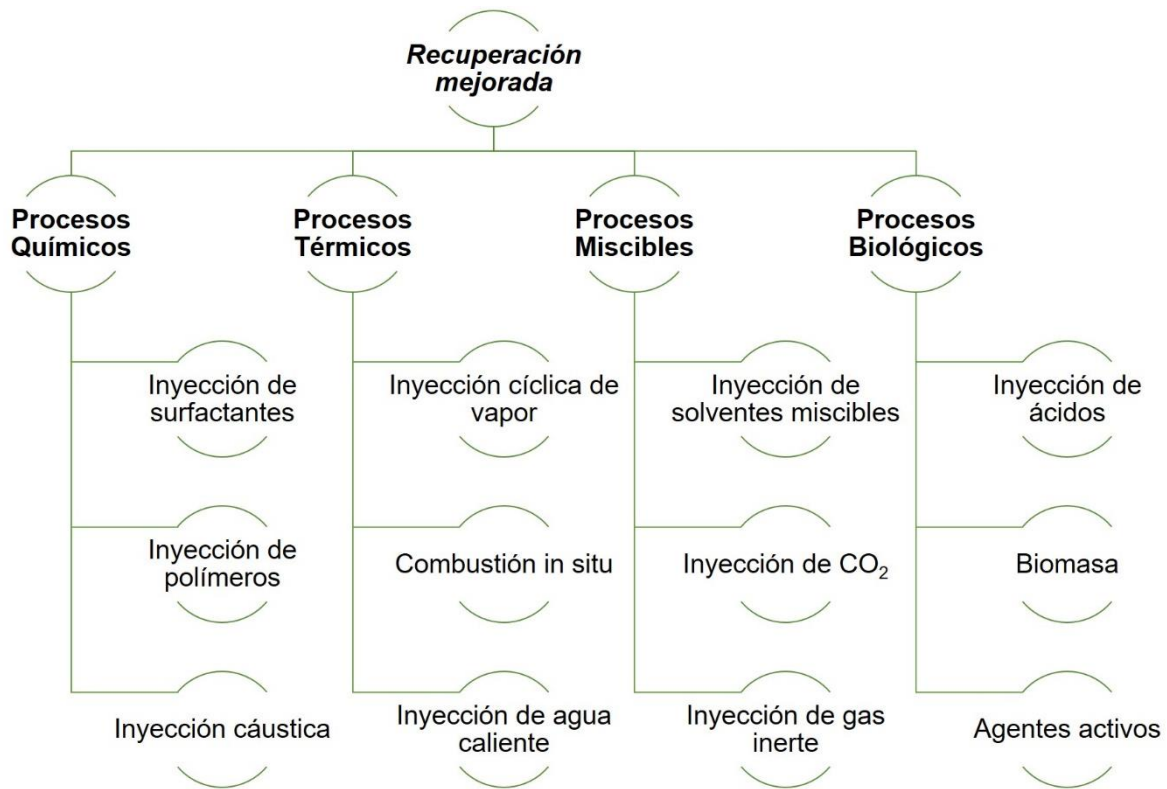


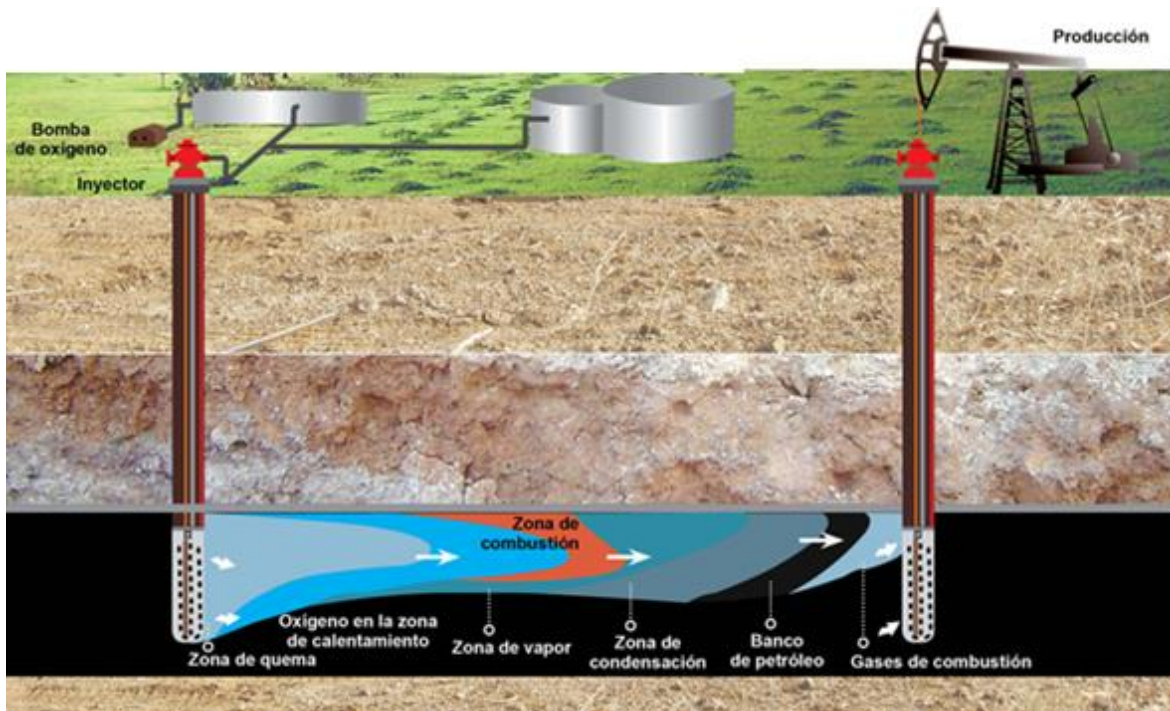
Figura 4. Métodos de recuperación mejorada [2].

## 1.4. Combustión in situ

Para el desarrollo del presente trabajo se hablará sobre los procesos térmicos, principalmente el proceso de *combustión in situ*. De acuerdo con Martínez Olvera [4] la *combustión in situ* es el método más apropiado dadas las características de los yacimientos mexicanos, en el que se tiene evidencia de un alto grado de recuperación.

En el proceso de combustión in situ se inyecta aire al yacimiento, el cual, mediante ignición espontánea o inducida, origina un frente de combustión que se propaga dentro del mismo yacimiento. La energía térmica generada en el proceso da lugar a una serie de reacciones químicas tales como oxidación, desintegración catalítica y polimerización, los cuales contribuyen de manera simultánea con otros mecanismos tales como empuje por gas, desplazamientos miscibles y no miscibles,

condensación, empuje por vapor y vaporización al mover el petróleo desde la zona de combustión hacia los pozos productores, ver figura 5.



**Figura 5. Esquema del proceso de combustión (Fuente: Google, 2017).**

La combustión crea un incremento de presión debido al aumento de volumen de los fluidos contenidos en el yacimiento. Un claro ejemplo de este fenómeno es el cambio de volumen a causa de los gases desprendidos por la reacción en el banco de aceite inmóvil o con escasa movilidad, agregando energía térmica que trae como efecto un aumento de flujo de la producción.

La combustión in situ comparada con otras técnicas de recuperación, aparentemente, es eficiente en aceites pesados de yacimientos poco profundos y en aceites ligeros de yacimientos profundos por las siguientes razones que menciona Sarathi [5]:

- Es un proceso de recuperación de aceite térmicamente más eficiente.
- Se utiliza aire por su bajo costo y con mayor disponibilidad como fluido inyector.



- La combustión in situ tiene la posibilidad de ajustarse a una amplia variedad de yacimientos; se ha demostrado que la recuperación de crudo pesado (10-20° API) se ha conseguido de yacimientos poco profundos (menos de 457 metros) y aceite ligero (mayor a 30° API) de yacimientos con una profundidad de 3353 metros.
- Reduce la viscosidad del aceite e incrementa la movilidad del mismo.
- Incrementa la eficiencia de barrido, que de acuerdo con Schlumberger [6] es la fracción del volumen total del yacimiento que entra en contacto con el fluido desplazante, además se reduce la saturación residual de aceite.
- Vaporiza una fracción de los líquidos de la formación, generalmente agua, produciéndose vapores calientes.
- Produce miscibilidad entre los fluidos y condensación de los componentes ligeros del aceite vaporizado.
- La formación de dióxido de carbono puede generar el desplazamiento del aceite cuando la reacción ocurre a altas temperaturas (entre 300° a 650° C).

#### 1.4.1. Tipos de combustión in situ

Se conocen cuatro maneras para llevar a cabo la combustión in situ en un yacimiento, que de acuerdo con Alvarado [1] y Sarathi son:

- **Combustión convencional o hacia delante (*Forward Combustion*):** en este proceso, los fluidos inyectados y el frente de combustión se mueven en el mismo sentido, es decir, del pozo inyector hacia los pozos productores; durante este proceso, se forman dentro del yacimiento varias zonas que pueden ser diferenciadas, dichas zonas son originadas por las altas temperaturas generadas dentro del medio poroso, el cual se encuentra saturado inicialmente con agua, petróleo y gas, ver figura 6.

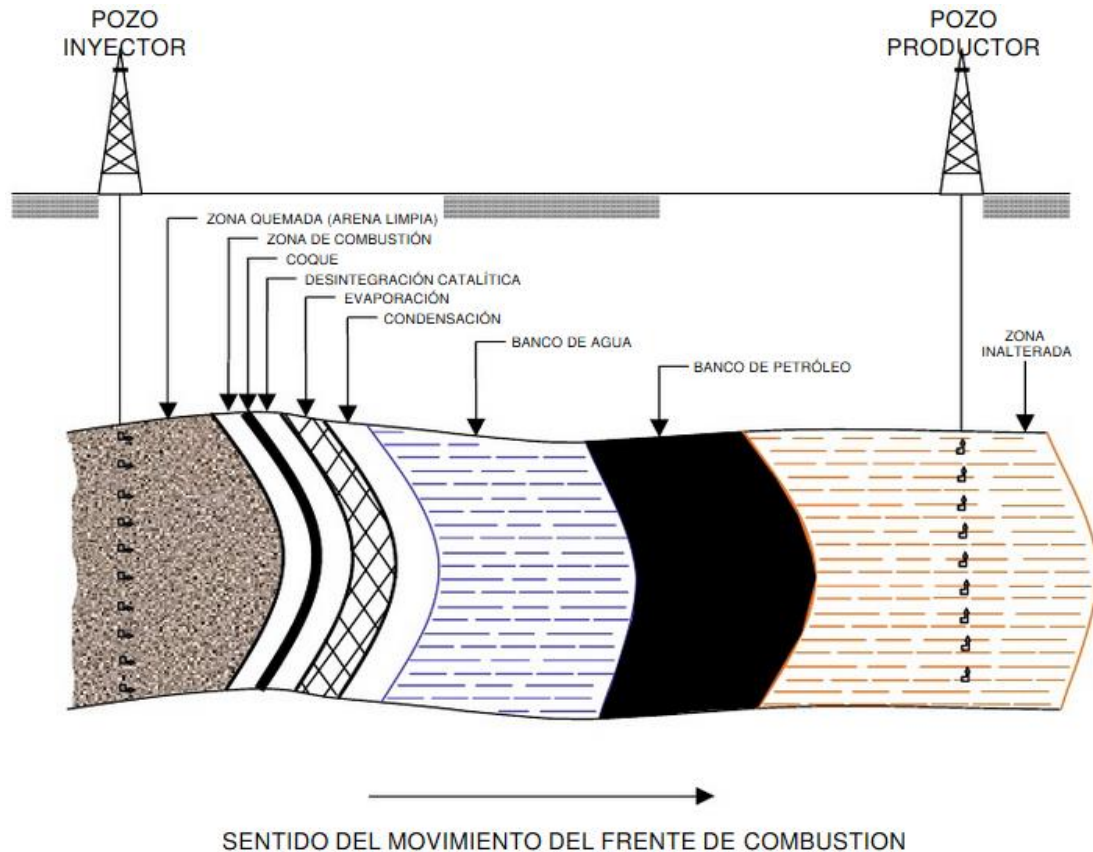


Figura 6. Combustión convencional (Alvarado, *Recuperación Térmica de Petróleo*, 2002).

- **Combustión en reversa o contracorriente (*Reverse Combustion*):** en este caso, el frente de combustión se mueve en dirección opuesta al flujo de aire, induciéndose la ignición del crudo en el pozo productor. El movimiento del frente de combustión es hacia las zonas de mayor concentración de oxígeno y los fluidos desplazados atraviesan dicho frente de combustión como parte de la corriente de gas, siendo transportados a través de la zona caliente hacia los pozos productores por drenaje gravitacional y por empuje del gas, ver figura 7.

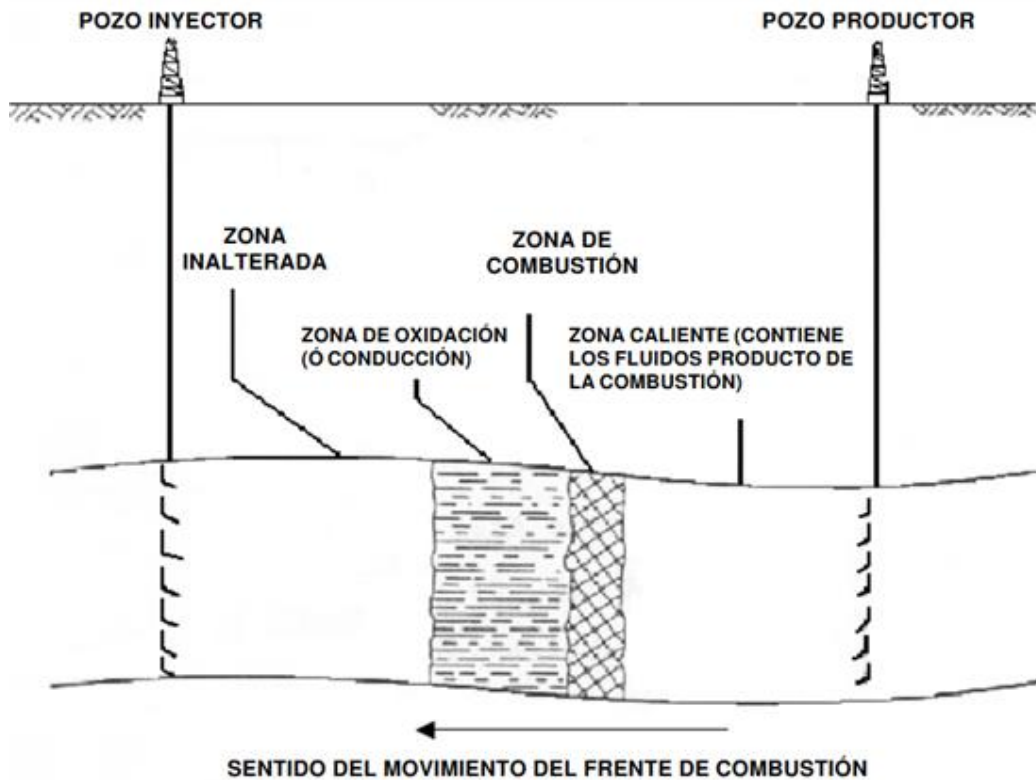
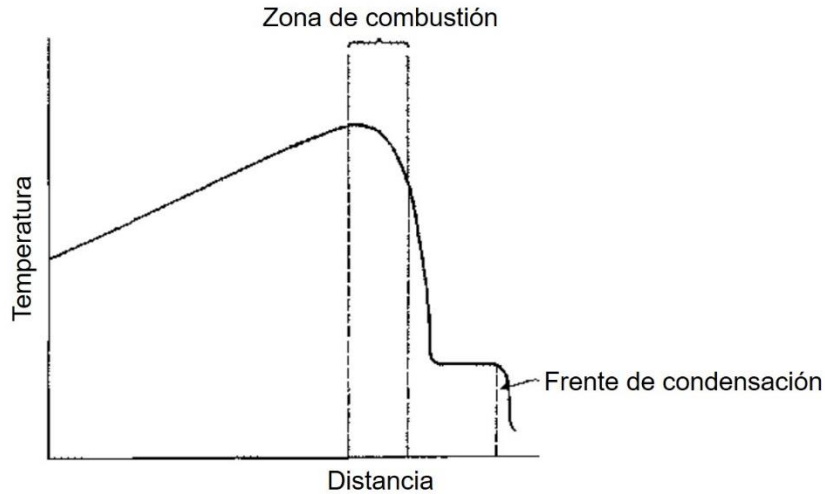


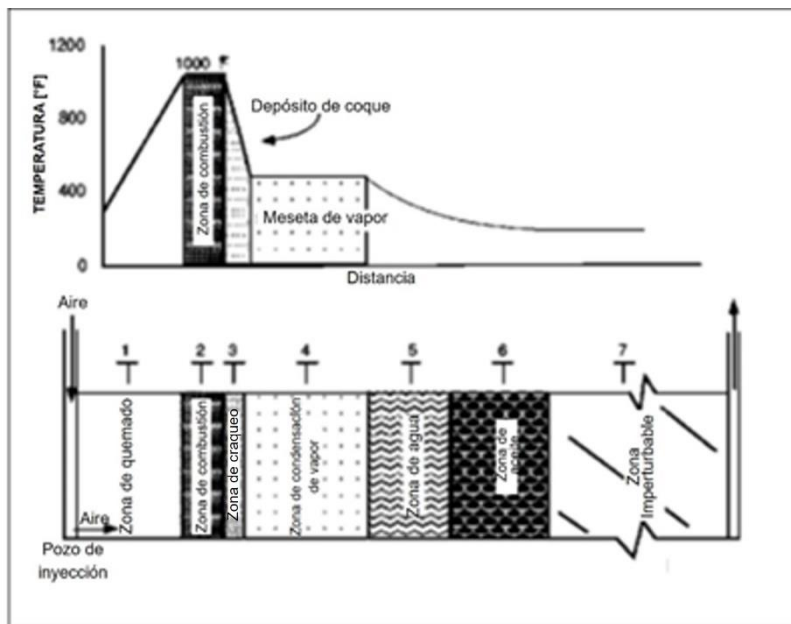
Figura 7. Combustión en reversa (Alvarado, *Recuperación Térmica de Petróleo*, 2002).

- Combustión seca:** en este proceso, el aire es suministrado primero en un pozo inyector por un corto tiempo, posteriormente el aceite concentrado comienza la ignición, usualmente éste es inducido usando quemadores de gas en el fondo del pozo, calentadores eléctricos o a través de la inyección de un fluido caliente como el vapor o induciendo condiciones de autoignición. Iniciada la ignición, el frente de combustión se mantiene constante debido al suministro de un flujo continuo de aire, ver figura 8. En algunos casos se produce auto ignición del crudo in situ. Por cada auto ignición que se produzca, la temperatura del yacimiento debe ser mayor que 82°C y el aceite debe ser lo suficientemente reactivo.



**Figura 8. Combustión seca (Sarathi S. Parta, *In Situ Combustion – Principles and Practices*, 1999).**

Puesto que el frente de combustión se aleja del pozo inyector, se desarrollan varias zonas dentro del yacimiento entre el pozo inyector y el pozo productor que son producto del calor y la masa transportados y las reacciones químicas producidas en la combustión. Las distintas zonas de localización con relación al pozo inyector y el productor se muestran en la figura 9: la parte superior muestra la distribución de temperatura y la saturación del fluido entre ambos pozos; en la parte inferior se muestran las localizaciones entre zonas.



**Figura 9. Perfil de temperatura en la combustión seca (Sarathi S. Parta, *In Situ Combustion – Principles and Practices*, 1999).**

- Combustión húmeda:** durante la combustión seca, una gran cantidad del calor generado se almacena en el mineral calcinado y no se aprovecha para desplazar el aceite. La capacidad calorífica del aire seco es baja y en consecuencia el aire que es inyectado no puede transferir calor a la fuente principal del mineral tan rápido como se genera. Por otro lado, el agua puede absorber y transportar el calor, muchas veces, de forma más eficiente que el aire. Si se inyecta agua junto con el aire, una gran cantidad del calor almacenado en el mineral calcinado se puede recuperar y transportar más adelante. De esta forma, la combustión húmeda se da al momento de inyectar agua de forma simultánea o intermitente con aire, tal y como se muestra en la figura 10.

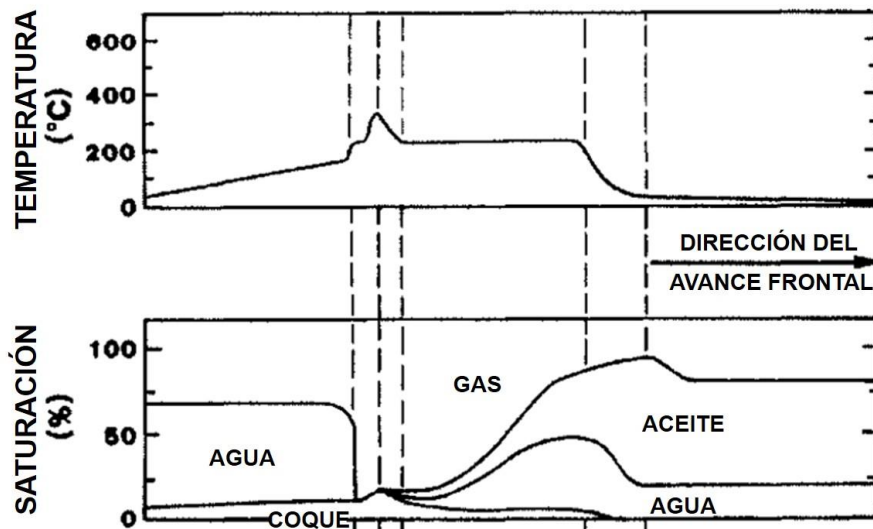


Figura 10. Perfil de temperatura en la combustión húmeda (Sarathi S. Parta, *In Situ Combustion – Principles and Practices*, 1999).

El agua absorbe el calor de la zona calcinada, atravesando el frente de combustión y transfiriendo calor a las secciones de menor temperatura del yacimiento, por lo tanto, el crecimiento de vapor y de los bancos de agua que se encuentran adelante del frente de combustión se acelerarán, trayendo como resultado un movimiento más rápido del calor y en consecuencia el desplazamiento del aceite. El tamaño de estos bancos y el flujo de aceite que es recuperado dependen de la cantidad de agua que es inyectada, la figura 11 muestra el fenómeno antes descrito.

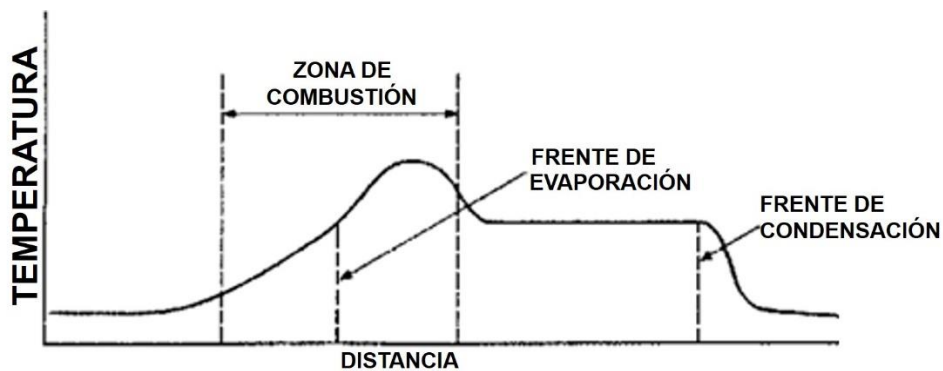


Figura 11. Fenomenología ocurrida en la combustión húmeda (Sarathi S. Parta, *In Situ Combustion – Principles and Practices*, 1999).

Comparativamente, en la combustión seca se quema una parte del crudo presente en el yacimiento, produciendo el desplazamiento del resto de éste, aunque el calor que se produce para este proceso se utiliza de forma deficiente.

## 1.5. Reacciones químicas asociadas con la combustión in situ

Son numerosas las reacciones que se asocian a la combustión in situ las cuales ocurren a diferentes rangos de temperatura. Sarathi [5] ha agrupado las reacciones más sobresalientes en tres tipos:

- 1) **Oxidación a bajas temperaturas (OBT):** se llevan a cabo reacciones heterogéneas (líquido/gas) y, generalmente, se obtiene una producción de compuestos parcialmente oxigenados y una cantidad mínima o nula de óxidos de carbono.
- 2) **Reacciones de formación de combustibles a temperatura intermedia:** se hacen presentes las reacciones de desintegración y pirólisis de hidrocarburos el cual conlleva a la formación de coque (compuesto rico en carbón pesado y una baja volatilidad de la fracción de hidrocarburos).
- 3) **Oxidación en altas temperaturas (OAT) o combustión de residuos sólidos de hidrocarburos (coque):** al igual que la OBT, las reacciones son

heterogéneas, en las cuales, el oxígeno reacciona con el aceite que no sufrió oxidación en las etapas previas y los compuestos oxigenados que forman óxidos de carbono y agua.

### **1.5.1. Oxidación a bajas temperaturas (OBT)**

Durante la combustión in situ, los hidrocarburos que se encuentran inicialmente en el aceite experimentan dos tipos de reacciones con el oxígeno (aire inyectado) dependiendo de la temperatura prevaleciente. Las reacciones ocurren a bajas temperaturas dentro del yacimiento ( $T \leq 205^\circ\text{C}$ ) provocadas por la disolución del oxígeno en el aceite crudo. A diferencia de las reacciones de oxidación a alta temperatura, las cuales producen  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  y agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) como productos de la reacción primaria; en el caso de la OBT los productos principales que son resultantes de esta reacción son agua e hidrocarburos parcialmente oxigenados, tales como ácidos carboxílicos, aldehídos, cetonas, alcoholes e hidroperóxidos.

De esta forma, puede pensarse que OBT son reacciones de adición de oxígeno, otra condición importante es que OBT se produce incluso a baja temperatura del yacimiento y es causada por la disolución de oxígeno en el petróleo crudo. El grado de disolución depende de la velocidad de difusión de las moléculas oxígeno en el aceite; los aceites ligeros son más susceptibles a reaccionar mediante OBT.

Las reacciones llegan a ser complejas y muy difíciles de comprender. Sin embargo, se cree que las reacciones de OBT consisten en la condensación de componentes de bajo peso molecular; al momento de llevar a cabo OBT se ha documentado que existe un incremento en la composición del contenido de asfaltenos en el aceite, además de un descenso en el contenido de aromáticos y resinas.

Los flujos bajos de aire en la zona de oxidación debido a la heterogeneidad del yacimiento y la concentración de oxígeno promueven las reacciones OBT. De igual forma, las características de combustión deficiente del crudo tienden a promover la

OBT debido al bajo consumo de oxígeno. En depósitos de crudos pesados, las reacciones OBT pueden ser más pronunciadas cuando se inyecta oxígeno puro, en lugar de aire, dentro del yacimiento tal y como se puede observar en la figura 12.

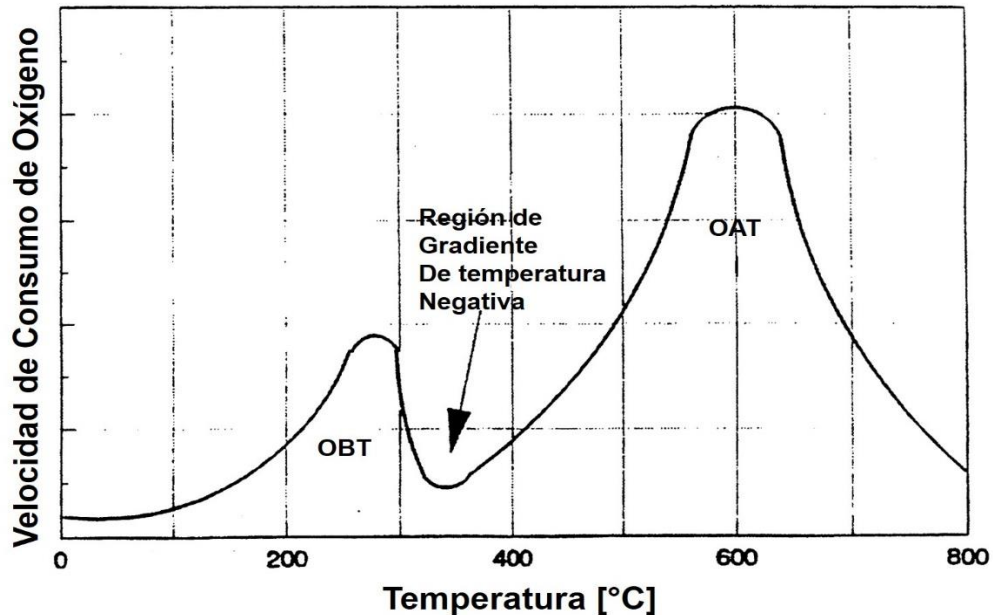


Figura 12. Efecto de la velocidad de consumo de oxígeno sobre la temperatura (Sarathi S. Parta, *In Situ Combustion – Principles and Practices*, 1999).

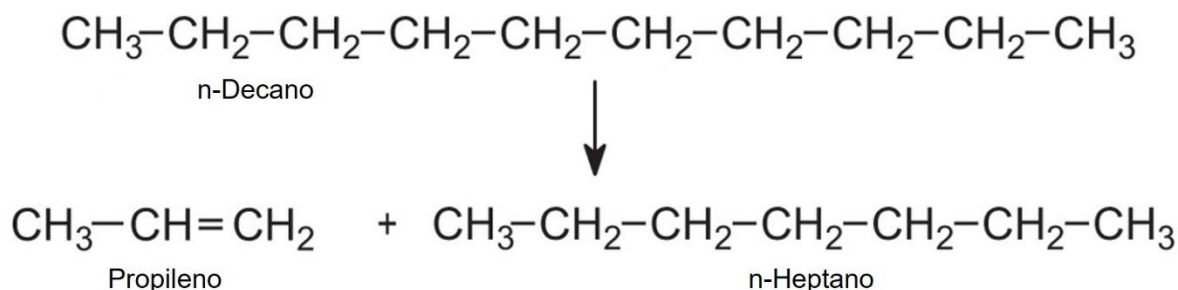
### 1.5.2. Reacciones de pirólisis

Cuando la temperatura dentro del yacimiento se incrementa, el aceite contenido en el interior experimenta un cambio químico llamado *pirólisis*, en el cual se hace presente una temperatura intermedia de oxidación la cual es responsable de la formación de coque de la combustión subsecuente. Las reacciones de pirólisis ocurren principalmente en fases homogéneas (gas/gas), además de que son reacciones endotérmicas, asimismo, se llevan a cabo tres tipos de reacciones: deshidrogenación, desintegración y condensación.

En el proceso de deshidrogenación, los átomos de hidrógeno son despojados de las moléculas de hidrocarburos, mientras se deja a los átomos de carbono intactos.



En las reacciones de desintegración, los enlaces carbono-carbono del hidrocarburo más pesado se rompen, lo que resulta en la formación de moléculas de hidrocarburos con un menor número de carbonos, ver figura 13.



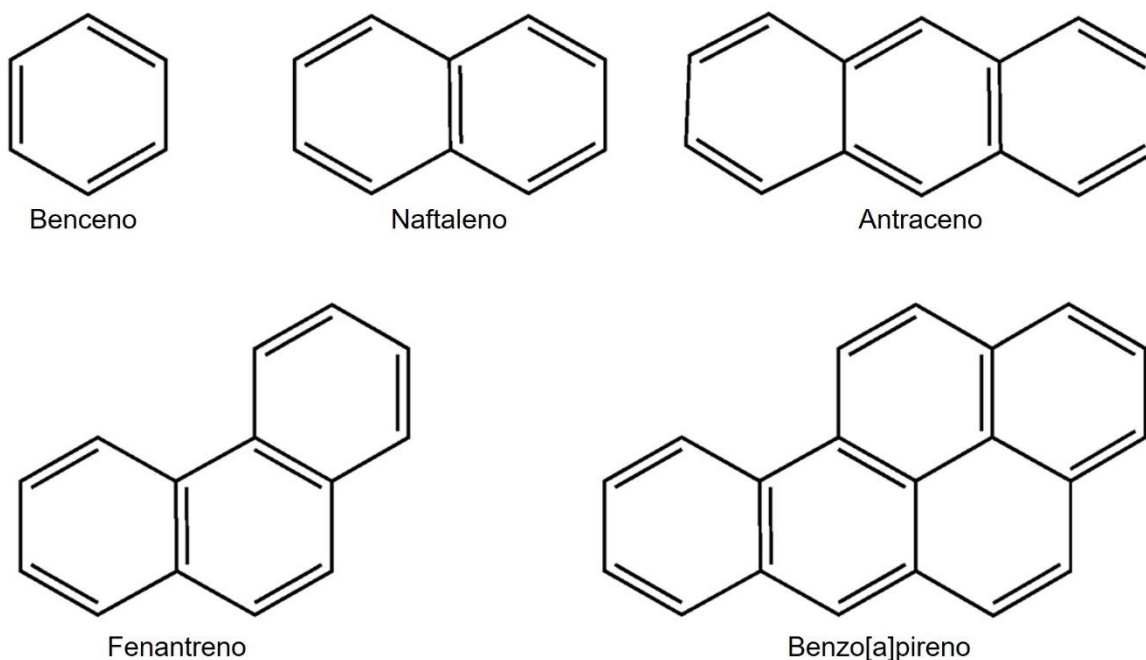
**Figura 13. Ejemplo de desintegración del n-decano (Fuente: Google, 2017).**

En el caso de las reacciones de condensación, el número de átomos de carbono en las moléculas aumentan permitiendo así la formación de hidrocarburos más pesados ricos en carbono.

El tipo de aceite y la estructura química de los hidrocarburos constituyentes pueden determinar la velocidad y extensión de los diferentes tipos de reacción de pirólisis.

Las parafinas (hidrocarburos de cadena lineal) no sufren reacciones de condensación, entre los 371°C y 677°C éstas sufren un proceso de deshidrogenación y/o reacciones de desintegración térmica dependiendo de la longitud de la cadena de los hidrocarburos. En general, las cadenas cortas (metano a butano) sufren deshidrogenación y las cadenas más largas son sometidas a reacciones de desintegración, las cuales suelen iniciar por el rompimiento de los enlaces carbono-carbono, seguidas de la extracción de los átomos de hidrógeno; por medio de la deshidrogenación las moléculas son recombinadas para formar otras más pesadas que eventualmente propiciarán la formación de coque. En el momento en que las cadenas lineales de mayor tamaño son sometidas a un largo calentamiento o son sujetas a una temperatura lo suficientemente alta, a menudo producen coque y una cantidad considerable de fracciones volátiles de hidrocarburos.

En el caso de los compuestos aromáticos (benceno y otros anillos aromáticos), ver figura 14, éstos son favorecidos por reacciones de condensación cuando se encuentran a una temperatura de yacimiento de 650°C a 1650°C. En la reacción de condensación, los enlaces C-H débiles de las moléculas aromáticas se rompen y son reemplazadas por enlaces C-C más estables, favoreciendo la formación de moléculas poliaromáticas menos hidrogenadas.



**Figura 14. Principales compuestos aromáticos (Fuente: Google, 2017).**

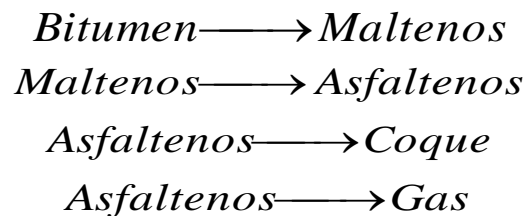
A su vez, cuando estos compuestos son sometidos a un calentamiento adicional, los productos de la condensación pierden más átomos de hidrógeno permitiéndoles una recombinación para formar polimoléculas más pesadas ricas en carbono, además de una eventual formación de coque.

De igual forma, Sarathi describe que en la combustión in situ se ha estudiado la pirólisis del bitumen, el cual de acuerdo con Schlumberger [7] es materia orgánica insoluble compuesta por hidrocarburos tales como el asfalto y la cera mineral que se encuentra habitualmente en forma sólida o casi sólida de color pardo o negro, la figura 15 ilustra dicho compuesto.



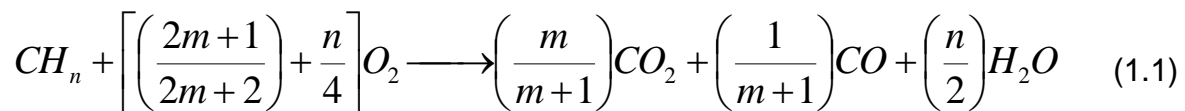
Figura 15. Bitumen natural (Fuente: Google, 2017).

Las reacciones se obtenidas por medio de la pirólisis del bitumen son:



### 1.5.3. Oxidación en altas temperaturas (OAT)

Sarathi menciona que la reacción entre el oxígeno presente en el aire inyectado y las temperaturas del coque por encima de los 344°C ocurren reacciones de oxidación a alta temperatura en el cual el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), el monóxido de carbono (CO) y el agua (H<sub>2</sub>O) son los productos principales de dichas reacciones; este fenómeno ocurre en fases heterogéneas (sólido/gas y líquido/gas) y se caracteriza por el consumo total de todo el oxígeno presente en la fase gas. La forma de la reacción química general expresada en forma estequiométrica para describir la OAT está dada por la ecuación (1.1):



donde n= relación atómica hidrógeno/carbono del combustible.

m= relación de concentración de CO<sub>2</sub>/CO producido.

## 1.6. Criterio de selección para procesos de combustión

Un informe presentado por Marique y Romero [8] señala que las tecnologías de aplicación de los métodos de recuperación mejorada se establecen de acuerdo a la litología de los yacimientos (areniscas o carbonatos) y si los mismos se encuentran en tierra (costa adentro) o mar adentro (costa afuera); estas variables resultan ser determinantes en la aplicación y/o viabilidad técnico-económica de proyectos de esa naturaleza. De dicho análisis se desprende lo siguiente:

- En yacimientos de areniscas se recomienda el uso de los procesos de recuperación mejorada térmicos y químicos, mientras que en formaciones carbonatadas o dolomíticas dominan los procesos de inyección de gases, especialmente la inyección de CO<sub>2</sub>.

Fletcher [9] señala que los yacimientos carbonatados se constituyen por carbón y aceite crudo los cuales han sido formados por la acumulación gradual de materia orgánica en bosques y ambientes pantanosos y su posterior litificación y metamorfismo de bajo grado, el cual puede ser observado en la progresión del césped seco, el coque de bitumen que es convertido en antracita, ver figura 16.



Figura 16. Antracita (Fuente: Google, 2017).

El carbón, generalmente se forma en un ambiente deltaico tropical y subtropical dentro de las zonas inter y supraciales donde la vegetación creció con abundancia; la transgresión y regresión de la costa debido a cambios en el nivel del mar o del levantamiento tectónico y la subsidencia han dado lugar a la formación de secuencias apiladas de yacimientos ricos en carbón en zonas areniscas, piedra arenisca y de arcillas pedrogénicas.

La evaporación de cuerpos cerrados de agua, por ejemplo, una laguna o lago, concentran minerales en solución, aunque cristalizan como una mezcla de sales, incluyendo el yeso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ), sal de roca ( $\text{NaCl}$ ) y anhidrita ( $\text{CaSO}_4$ ), junto con sales de potasio y magnesio. Dentro de una secuencia de rocas, los depósitos de evaporitas pueden alcanzar más de 1000 m de espesor y representan periodos prolongados de temperaturas elevadas sin lluvias o con lluvias periódicas, este proceso se ilustra en la figura 17.



**Figura 17. Proceso de formación de evaporitas (Fuente: Google, 2017).**

Las sales, debido a su baja densidad pueden migrar hacia la superficie como capas o domos que causan la falla en la superposición de estratos, la cual por desarrollo de Johann Gottlob Lehmann señala que “*en una sucesión de estratos, los que están más abajo son los más antiguos y los que están más arriba son los más modernos*”; estas estructuras son importantes para la industria petrolera, pues las sales son compuestos impermeables tanto de petróleo como de gas y pueden quedar atrapadas en las secuencias de rocas sedimentarias de características defectuosas o que se encuentran por encima de la capa.

---

## Capítulo 2: DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO DE SIMULACIÓN

---

Las reacciones químicas, son llamadas el “*corazón del proceso*”, en donde materiales relativamente baratos son convertidos en productos de alto valor agregado. En otros casos, las reacciones juegan un papel fundamental en temas de seguridad y de medio ambiente.

Lo que nos lleva también a definir la importancia que tiene un reactor químico, Smith [10] hace mención sobre la existencia de distintos tipos de reactores que tienen una gran variedad de tamaños, formas y condiciones de operación, uno de los más comunes es el matraz o vaso de precipitado que se usa en el laboratorio químico para las reacciones en fase líquida. El otro extremo en cuanto al tamaño lo constituyen grandes recipientes cilíndricos empleados en la industria del petróleo, por ejemplo, el cracking de hidrocarburos.

Para este trabajo, se considerará al yacimiento petrolífero como un reactor químico del tipo batch, que se encuentra sometido a ciertas restricciones como una primera aproximación a condiciones de presión/temperatura y presión/carga térmica.

### 2.1. Marco teórico

Es importante tomar en cuenta que la termodinámica es la herramienta mediante la cual se puede establecer la posibilidad de que una reacción química pueda o no llevarse a cabo, además señala cuáles son los límites en cuanto al margen cuantitativo o de rendimiento.

Ramírez Manzanares [11] menciona en su trabajo la variedad existente de métodos con los que se ha estudiado y estudia actualmente el equilibrio químico:

1. Métodos basados en las reacciones químicas que se presentan a ciertas condiciones y su estequiometría.
2. Métodos no estequiométricos que emplean como criterio características del estado de equilibrio y que resuelven el problema con un modelo matemático.

El método número 2 es el de mayor importancia para el desarrollo de este trabajo ya que es el que se emplea en el simulador Aspen Plus® con ayuda del módulo *RGibbs*, del que posteriormente se hablará a detalle; el método empleado consiste en minimizar la energía de Gibbs, pues se sabe que la condición de equilibrio sujeto a las restricciones de temperatura, presión constantes se alcanza en el mínimo de esta propiedad y permite resolver el balance de materia partiendo de la matriz atómica de los compuestos presentes, previo a llevarse a cabo la reacción química.

Asimismo, la autora hace mención acerca de la implementación de los métodos estequiométricos, éstos son más fáciles de implementar, pero están más limitados y resultan menos generales, sobre todo cuando se tiene un gran número de reacciones, tal y como se sospecha que ocurre dentro del yacimiento cuando se lleva a cabo un proceso de combustión in situ.

### **2.1.1. Descripción del sistema**

Para el desarrollo de este apartado serán retomadas las definiciones que plantea Himmelblau [12] el cual menciona que en un sistema cerrado (o por lotes) es aquel en el que no tiene lugar una transferencia material durante un determinado intervalo de tiempo. Evidentemente, si se carga un reactor con los reactivos y se sacan los productos, designando al reactor como el *sistema*, se transferirá material a través de la frontera del sistema, pero se puede ignorar dicha transferencia y se puede centrar la atención exclusivamente en el proceso de reacción que ocurre después de haber cargado los reactivos y de retirar los productos. Este es el proceso que se realiza en un sistema cerrado, ver figura 18.

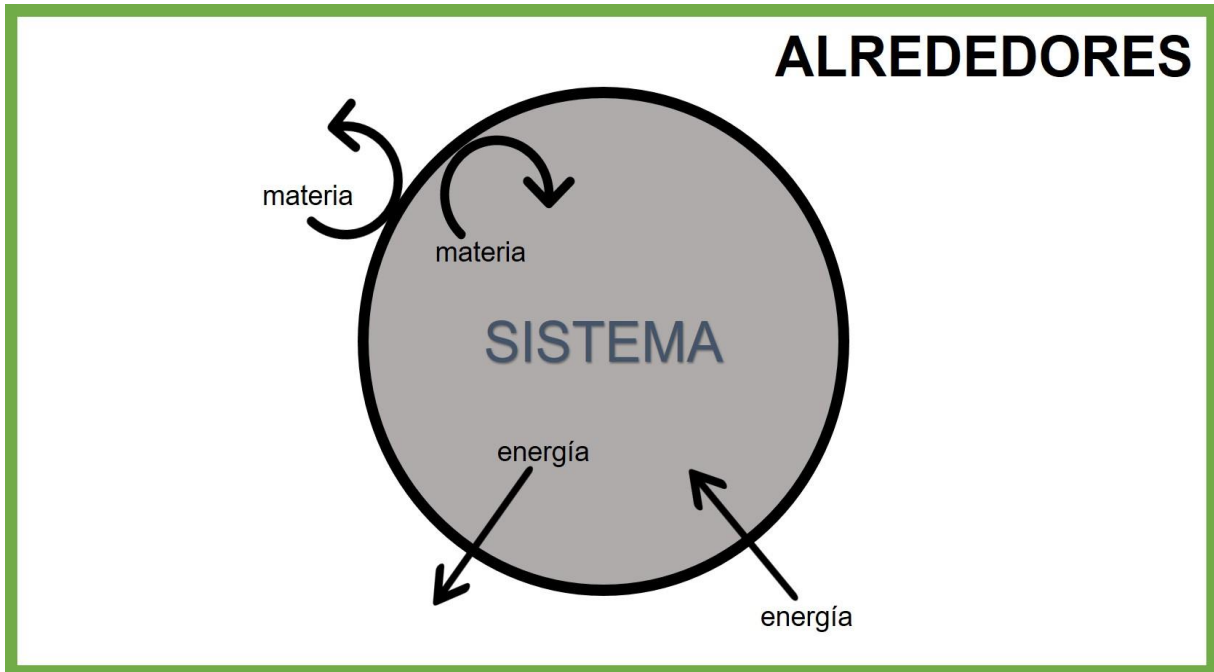


Figura 18. Sistema cerrado.

### 2.1.2. Definición de equilibrio

Smith et. al [13] define al equilibrio como una condición estática, es decir, en donde no hay presencia de algún cambio. Esta frase en termodinámica significa no sólo la ausencia de algún cambio sino de cualquier *tendencia* hacia el cambio en una escala macroscópica. De esta forma, existe un sistema en equilibrio bajo la condición de que no puede ocurrir en él ningún cambio de estado. Puesto que cualquier tendencia hacia el cambio es causada por una fuerza impulsora de uno u otro tipo, la ausencia de estas tendencias también indica la carencia de cualquier fuerza impulsora. Por lo tanto, en un sistema en equilibrio todas las fuerzas están en un balance exacto. Si en realidad ocurre un cambio en un sistema que no está en equilibrio, éste depende tanto de la resistencia como de la fuerza impulsora; muchos sistemas experimentan cambios no medibles aún bajo la influencia de grandes fuerzas impulsoras, porque su resistencia al cambio es muy grande.

Las diferentes clases de fuerzas impulsoras tienden a producir distintos tipos de cambios, por ejemplo, las fuerzas mecánicas no equilibradas como la presión, llegan a ocasionar una transferencia de energía en forma de trabajo; las diferencias de



temperatura suelen producir un flujo de calor; los gradientes en el potencial químico tienden a originar que las sustancias sean transferidas de una fase a otra. En el equilibrio, tales fuerzas están equilibradas.

### **2.1.3. Equilibrio de fases**

De acuerdo con Danesh [14], el proceso de producción de fluidos de yacimiento (agua, aceite y gas) regularmente son acompañados con variaciones en la composición, pero también para la formación de nuevas fases, o eliminación de alguna de las fases existentes. Como los cambios al interior del yacimiento suelen ser relativamente lentos, es razonable suponer que todas las fases coexisten y se encuentran en equilibrio. Entonces, el problema básicamente se reduce en determinar las condiciones de equilibrio para un sistema multicomponente.

La termodinámica ha sido utilizada durante mucho tiempo para investigar y describir el equilibrio en las fases fluidas y con esto poder reducir los criterios generales y las leyes a herramientas prácticas.

#### **2.1.3.1. Criterio de equilibrio**

El sistema descrito en este trabajo se considerará cerrado y además posee un número arbitrario de especies químicas e incluye un número arbitrario de fases, en donde la temperatura y la presión son uniformes (aunque no necesariamente constantes), en un principio el sistema no se encuentra en equilibrio respecto a la transferencia de masa entre las fases y la reacción química. Los cambios que se suscitan en el sistema son necesariamente irreversibles, y se acercan siempre al estado de equilibrio. Se considera que el sistema se halla siempre en equilibrio térmico y mecánico con sus alrededores. En consecuencia, el intercambio de calor y el trabajo de expansión se suponen como una aproximación que se realizan de manera reversible, esto es suponiendo que los gradientes de presión y temperatura son infinitesimales.

## 2.1.4. Equilibrio químico

Debido a que el sistema es cerrado y que las variables T y P son constantes, además que son de fácil medición, y de acuerdo a la tabla 2.1 realizada por Bazúa [15] en la que se establece que el criterio de equilibrio se da a partir de la minimización de la energía libre de Gibbs del sistema, es decir que en este estado de equilibrio:

$$\left(dG^t\right)_{T,P} = 0 \quad (2.1)$$

Puesto que los yacimientos petrolíferos se encuentran constituidos por una amplia variedad de especies químicas, además se ven involucradas distintas reacciones en competencia al momento de llevar a cabo la combustión in situ. Dado lo anterior, la dificultad se centra en encontrar la composición de las especies presentes en el equilibrio por métodos estequiométricos, evaluación de las constantes de equilibrio o el establecimiento de equilibrios en reacciones múltiples.

Por consiguiente, tal y como lo menciona Smith [13], si una mezcla de especies químicas no se encuentra en equilibrio químico, cualquier reacción que ocurra a temperatura y presión constantes debe conducir a una minimización de la energía de Gibbs total del sistema.

RESTRICCIONES	CONDICIÓN DE EQUILIBRIO EN UN SISTEMA CERRADO
U, V constantes	S es máxima
S, V constantes	U es mínima
S, P constantes	H es mínima
T, V constantes	A <sup>1</sup> es mínima
T, P constantes	G es mínima

**Tabla 2.1. Condiciones y restricciones de equilibrio.**

<sup>1</sup> En este caso A representa a la energía libre de Helmholtz, no confundir con A<sub>k</sub> (número de masas atómicas).

### 2.1.4.1. Minimización de la energía de Gibbs

El simulador Aspen Plus® realiza la determinación de la composición de los componentes presentes en el equilibrio llevando el sistema a las condiciones de la ecuación 2.1 para la mezcla reaccionante y con esto se puede simplificar el problema dado que no es necesario especificar alguna relación estequiométrica.

A continuación, se presenta la metodología que se sigue para establecer el esquema de solución del problema por métodos computacionales propuesto por Smith y el cual puede ser aplicado por el simulador Aspen Plus®.

Como punto de partida se debe tomar en consideración que el criterio de equilibrio parte de la ecuación fundamental de la termodinámica en términos de la energía de Gibbs en sistemas abiertos:

$$d(nG) = (nV)dP - (nS)dT + \sum_i \mu_i dn_i \quad (2.2)$$

El cual para una sola fase con  $N_c$  especies químicas está dada por:

$$(G^t)_{T,P} = G(n_1, n_2, n_3, \dots, n_N)$$

donde  $N$  es el número de especies químicas (moléculas).

Se debe encontrar el conjunto de  $\{n_i\}$  especies que minimizan la función  $G^t$  para unas determinadas condiciones de temperatura y presión cuyas restricciones deben estar sujetas a los balances de materia. La solución propuesta a este tipo de problemas se basa en aplicar los *multiplicadores de Lagrange*, el cual se describe a continuación:

1. En esta etapa se formulan las ecuaciones restrictivas, es decir, se plantean los balances de materia para cada especie atómica presente.

$$\left( \sum_{i=1}^w n_i a_{ik} \right) - A_k = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, w) \quad (2.3)$$

donde  $w$  es el número de especies atómicas.

2. Posteriormente se adicionan los multiplicadores de Lagrange ( $\lambda_k$ ) para cada elemento, multiplicando cada balance de especie atómica por su respectivo  $\lambda_k$ :

$$\lambda_k \left[ \left( \sum_{i=1}^w n_i a_{ik} \right) - A_k \right] = 0 \quad (2.4)$$

Dicho conjunto de ecuaciones se suma en todo el intervalo  $k$ , dando como resultado:

$$\sum_{k=1}^w \lambda_k \left[ \left( \sum_{i=1}^w n_i a_{ik} \right) - A_k \right] = 0 \quad (2.5)$$

3. En consecuencia, se genera una nueva función  $F$  al realizar la adición de  $G^t$ , obteniéndose:

$$F = G^t + \sum_{k=1}^w \lambda_k \left[ \left( \sum_{i=1}^w n_i a_{ik} \right) - A_k \right] \quad (2.6)$$

4. El valor mínimo que existe en  $F$  ocurre cuando todas las derivadas parciales

$\left( \frac{\partial F}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j}$  tienen un valor de cero. Por lo tanto, al derivar la ecuación (2.6) e

igualando las derivadas resultantes con cero, se obtiene:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} = \left( \frac{\partial G^t}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} + \sum_{k=1}^w \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.7)$$

Pero como el primer término en la derecha de la igualdad es la definición del potencial químico ( $\mu_i$ ), la ecuación (2.7) puede reescribirse como:

$$\mu_i + \sum_{k=1}^w \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (2.8)$$

Además, el potencial químico está definido por la ecuación (2.9):

$$\mu_i = G_i^\circ + RT \ln \left( \frac{\hat{f}_i}{f_i^\circ} \right) \quad (2.9)$$

En el estado de referencia, para los elementos químicos en su estado más estable en la naturaleza se establece que  $G_i^\circ = 0$ , mientras que para las especies moleculares se les asigna la energía de Gibbs de formación estándar para cada especie  $i$ ,  $G_i^\circ = \Delta G_{f_i}^\circ$ . Además, se incluye el coeficiente de fugacidad  $\left( \hat{\phi}_i \right)$  que se define con la expresión:  $\hat{f}_i = y_i \hat{\phi}_i P$ , por lo que realizando las sustituciones en la ecuación (2.9) y estableciendo las reacciones en fase gas y estados estándar para los gases ideales se obtiene:

$$\mu_i = \Delta G_{f_i}^\circ + RT \ln \left( \frac{y_i \hat{\phi}_i P}{P^\circ} \right) \quad (2.10)$$

Al combinar la ecuación (2.8) con la ecuación (2.10) obtenemos:

$$\Delta G_{f_i}^\circ + RT \ln \left( \frac{y_i \hat{\phi}_i P}{P^\circ} \right) + \sum_{k=1}^w \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.11)$$

La ecuación (2.11) implica  $N$  ecuaciones de equilibrio independientes, es decir, una para cada especie química. La ecuación (2.3) implica  $w$

ecuaciones balance de materia independientes, una por cada especie atómica, teniendo así un total de  $N+w$  ecuaciones.

Las incógnitas de estas ecuaciones son las moles de cada especie ( $n_i$ ), de las cuales hay  $N$  incógnitas y los  $\lambda_k$ , de los cuales hay  $w$  incógnitas (un total de  $N+w$  incógnitas), de tal modo que el número de ecuaciones y el número de incógnitas son iguales, por lo que hay cero grados de libertad lo que implica que el sistema tiene solución.

Debe tomarse en consideración que en la ecuación (2.11) aparece el término  $y_i$  que son las fracciones mol de cada especie molecular asociadas a las

moles ( $n_i$ ) con la siguiente expresión:  $y_i = \frac{n_i}{\sum_i n_i}$ .

En el procedimiento descrito, no se requieren las reacciones químicas implicadas, pues no participan de ninguna manera en el planteamiento del sistema de ecuaciones. Lo que es indispensable es la definición de todas las especies químicas que participan en el sistema reaccionante. De cualquier modo, la elección de un conjunto de especies es completamente equivalente a la elección de un conjunto de reacciones independientes entre las especies. En caso de realizar un método iterativo o por medio del uso de otras herramientas informáticas siempre se necesita elegir un conjunto de especies o un conjunto equivalente de reacciones independientes, y las diferentes selecciones producirán resultados distintos, es muy importante tener información experimental del comportamiento de los sistemas reaccionantes que se tratan de representar con este modelo para poder descartar especies que no son consistentes con los resultados.

### 2.1.5. Termodinámica de la combustión

Danesh [14] hace mención sobre la composición de los fluidos de yacimientos, los cuales son constituidos principalmente por hidrocarburos, además el agua también está presente en los mismos yacimientos de gas y aceite y se encuentra presente entre los poros de las rocas. La influencia del agua en el comportamiento de fase y las propiedades de los hidrocarburos en fase fluida, en la mayoría de los casos, es de poca o nula importancia. El comportamiento de fases entre el aceite y el gas generalmente es tratado independientemente de la fase acuosa, aunque las se pueden formar estructuras sólidas entre el agua y los hidrocarburos denominadas hidratos (clatratos).

El comportamiento de una mezcla de hidrocarburos en el yacimiento y las condiciones de la superficie son determinadas por su composición química, además de la temperatura y presión prevalecientes. Este comportamiento es la primera consideración en el desarrollo y manejo de yacimientos, de igual manera, afecta todos los aspectos de la exploración y producción de petróleo.

Además, un fluido de yacimiento puede estar compuesto de muchos miles de componentes, por eso, el principio del equilibrio de fases puede ser explicado examinando el comportamiento de las mezclas simples y multicomponentes. En la realidad, el comportamiento de cada yacimiento básicamente sigue el mismo principio, pero para facilitar su aplicación tecnológica en la industria, los fluidos de yacimiento han sido clasificados en varios grupos como: “gas seco”, “gas húmedo”, “gas y condensado”, “aceite volátil” y “aceite negro”.

De acuerdo con Winterbone [16] cuando el aceite contenido en el yacimiento es mezclado con el aire que es inyectado ambos componentes se encuentran en un estado de equilibrio metaestable, es decir, que la energía libre de Gibbs de las sustancias presentes no se encuentra en un valor mínimo, o en equilibrio, sino que

está en un nivel mucho mayor y se requiere de una perturbación significativa para ocasionar el cambio que conduce al estado de equilibrio.

Por consiguiente, si las sustancias presentes no se encuentran en un valor mínimo de la energía de Gibbs, usualmente, el cambio espontáneo no ocurre: es necesario proveer una cierta cantidad de energía a la mezcla para iniciar la combustión, básicamente se necesita 'ionizar' a los constituyentes químicos del aceite. Una vez que los constituyentes (usualmente carbono e hidrógeno) han sido 'ionizados', se combinan con el oxígeno presente en la fase gas para formar compuestos con una energía de Gibbs más pequeña que los reactivos, éstos son llamados *productos* (normalmente dióxido de carbono, agua, coque, etc.). En el caso de una ignición, la energía de ionización es proporcionada por una chispa que enciende un pequeño núcleo de la carga en el cual se extiende la llama, ver figura 19.

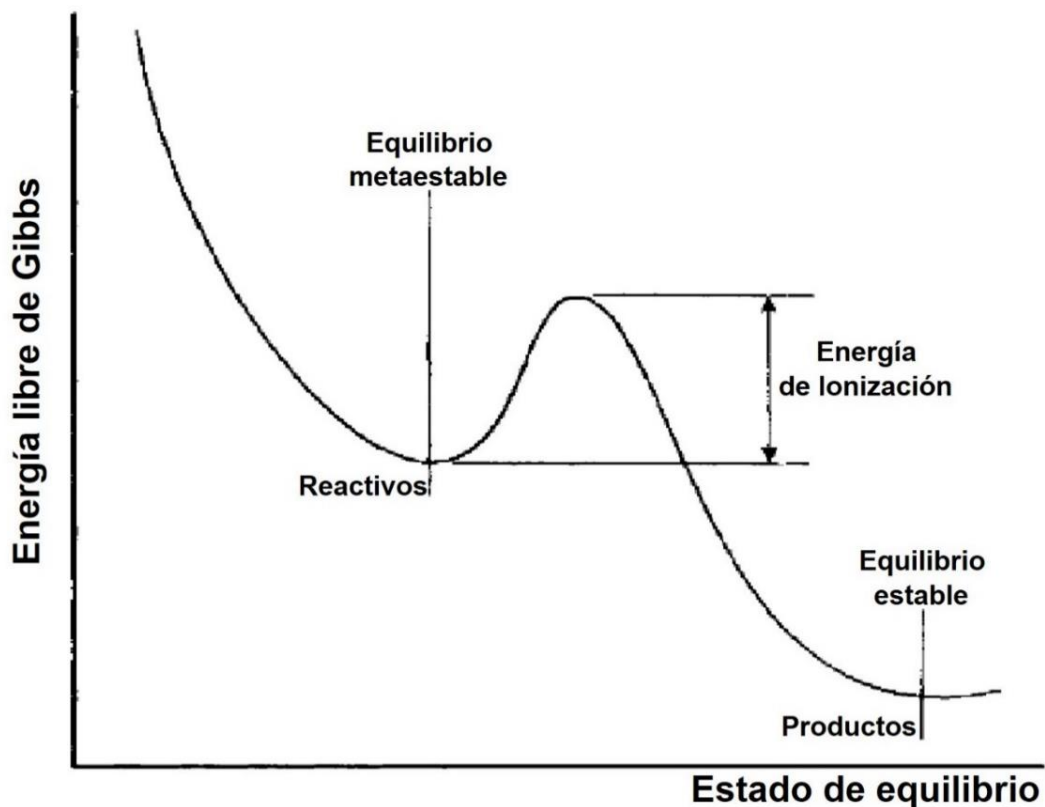


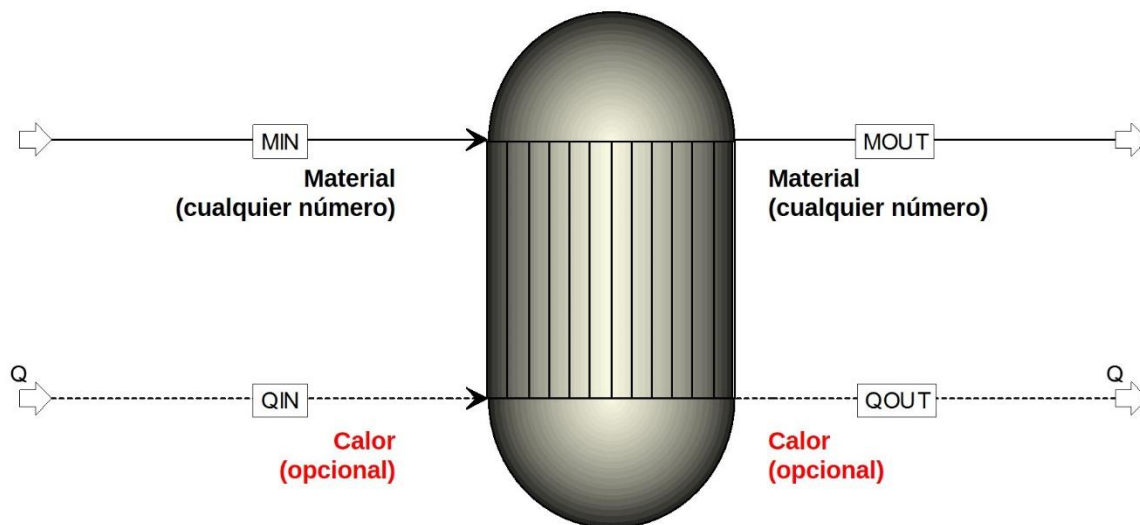
Figura 19. Estados de energía asociados a la combustión (Winterbone, *Advanced Thermodynamics for Engineers*, 1997).



## 2.2. Reactor de Gibbs

Cuando se estudian las reacciones químicas, es necesario determinar cuáles son los reactivos y cuáles son los productos que son indispensables para que el proceso se lleve a cabo. En el caso de la combustión in situ, la caracterización de los compuestos presentes en el yacimiento es fundamental para determinar vía simulación los componentes que se encuentran al momento de estar en condiciones de equilibrio químico. Aspen Plus® provee algunos módulos para realizar procesos en el que se llevan a cabo algunas reacciones químicas.

Uno de estos módulos es el reactor de Gibbs, figura 20, el cual resuelve la reacción completa y el equilibrio de fases de todas las especies presentes en la lista de componentes establecida por el usuario y por medio de la minimización de la energía de Gibbs, sujeto a la restricción de la alimentación dado por el balance de materia y la matriz atómica de las especies que son establecidas. En el módulo se pueden especificar ciertas restricciones, como la aproximación de la temperatura al equilibrio o una conversión determinada de alguna de las especies.



**Figura 20. Esquema general del Reactor de Gibbs.**

Este reactor puede ser utilizado cuando se hace el modelamiento de un sistema del que se sabe puede alcanzar el equilibrio, en particular, en procesos a altas temperaturas. Su principal ventaja, es que no requiere de la estequiometría de la reacción ni de la conversión de alguno de los reactivos, pero es indispensable

establecer las especies químicas que son consistentes con la naturaleza del problema. El funcionamiento de este módulo requiere de una o más corrientes de entrada y de salida, las corrientes energéticas de entrada y de salida pueden ser especificaciones opcionales.

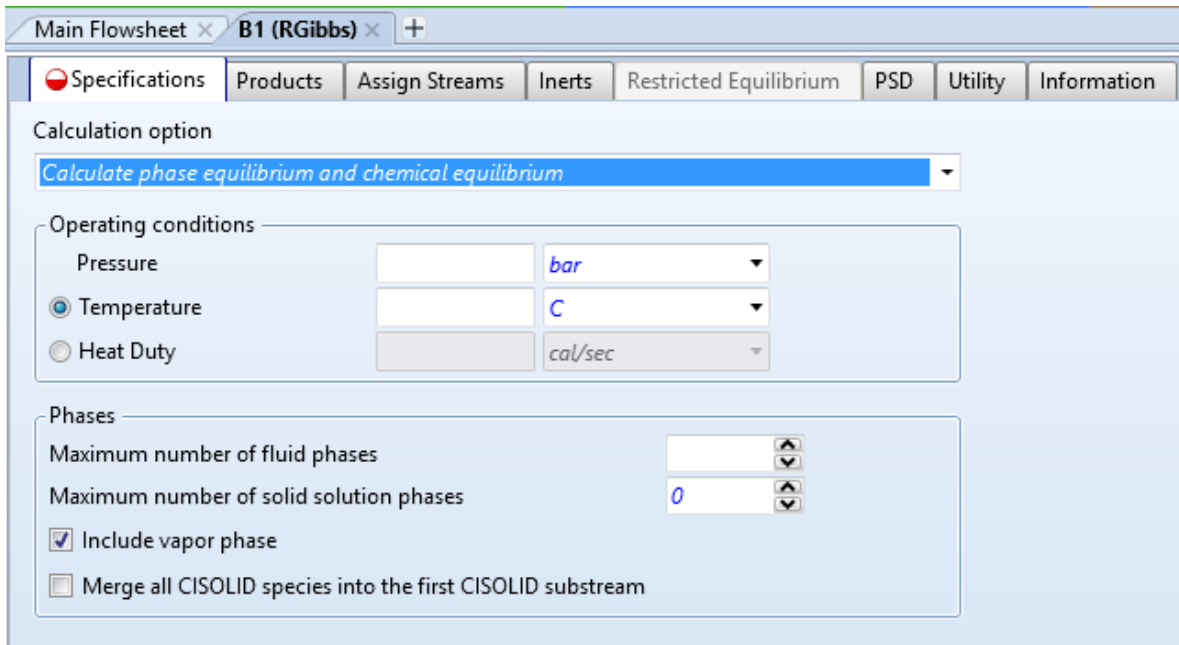
Asimismo, se requieren de dos especificaciones de variables (temperatura y presión ó presión y carga térmica). El módulo conocido dentro del sistema como *RGibbs*, permite su aplicación gracias a que calcula el equilibrio de fases o bien el equilibrio de fases más el equilibrio químico a las condiciones y rangos de operación que el usuario haya definido.

De igual manera, el reactor puede calcular el equilibrio químico que existe entre cualquier número convencional de componentes sólidos y las fases fluidas. Esta la gran ventaja que ofrece el módulo, pues se sabe que dentro del yacimiento hay producción de fases sólidas en los procesos combustión in situ.

### **2.2.1. Pestaña de especificaciones**

Esta pestaña, presentada en la figura 21, permite definir lo siguiente:

- Las condiciones de operación del reactor.
- Opciones de cálculo para los distintos tipos de equilibrio: físico, químico o ambos.
- Fases a considerar en los cálculos de equilibrio.



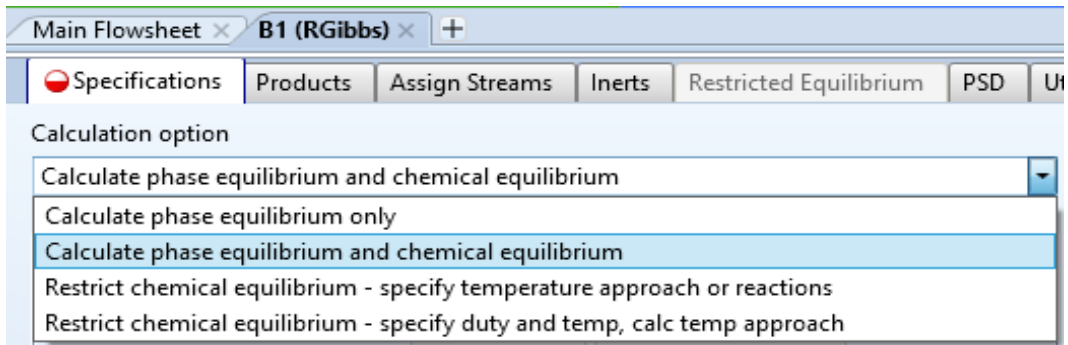
**Figura 21. Pestaña de especificaciones.**

Tal y como se hizo mención en la parte teórica de este capítulo, al reactor se le deben especificar las condiciones de operación, las cuales pueden ser:

- Presión, y
- Temperatura o carga térmica.

Si se especifica una o más corrientes energéticas de entrada (pero no una de salida) para el módulo, no se permite especificar la carga térmica. En este caso, el módulo usa la suma del valor de las corrientes energéticas de entrada como la especificación de carga térmica.

De igual forma se puede seleccionar qué tipo o tipos de cálculos al equilibrio son los que RGibbs debe realizar de acuerdo a las opciones mostradas en la figura 22.



**Figura 22. Opciones de cálculo.**

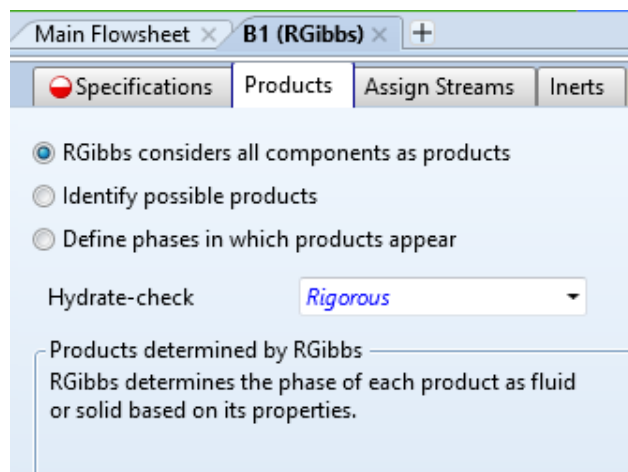
En caso de que se seleccione *Calculate phase equilibrium only*, se debe especificar el número máximo de fases fluidas (líquido o vapor) a considerar en el reactor. Para otros casos, es opcional. Por omisión la pestaña *Include vapor phase* es automáticamente seleccionada por lo que en el módulo se considera que una de las fases fluidas debe ser vapor.

Para el desarrollo del presente trabajo se utilizó la opción *Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium*, esto porque es el modelo que se ajusta a los requerimientos planteados en el problema, es decir, con esta opción se permite conocer la composición de los productos presentes en el equilibrio, así como la formación de compuestos sólidos después de llevar a cabo el proceso de combustión in situ.

Si se seleccionan (1) *Restrict chemical equilibrium – specify temperature approach or reactions*, ó, (2) *Restrict chemical equilibrium – specify duty and temp, calc temp approach*, es necesario conocer la temperatura aproximada al equilibrio junto con las reacciones que se suponen son llevadas a cabo para el caso 1; para el caso 2, se deben especificar la aproximación de la temperatura al equilibrio y la carga térmica del reactor, además de tener un estimado de temperatura que cumpla con los parámetros que satisfacen el balance de energía.

## 2.2.2. Pestaña de productos

Esta pestaña se utiliza para especificar los productos que el módulo considerará que están presentes en el equilibrio tal y como se ilustra en la figura 23.



**Figura 23. Asignación de productos.**

El reactor de Gibbs asume por omisión que todos los componentes definidos en las corrientes de alimentación son posibles productos, además se asigna a cada componente como producto que puede hacerse presente en la fase sólida, esto lo realiza calculando el equilibrio químico entre cualquier número de compuestos sólidos presentes en cualquiera de las fases fluidas. RGibbs detecta si algún compuesto sólido se forma a las condiciones de equilibrio, si esto ocurre, se realiza el cálculo de la cantidad formada de dicho compuesto, así se encuentre presente como un sólido contenido en alguna disolución. De esta forma fueron establecidos los parámetros de identificación de productos del proceso de combustión in situ, permitiendo al simulador establecer las fases fluidas y la posible detección de compuestos sólidos que pudieran estar presentes dentro del yacimiento petrolífero.

En caso de que el algoritmo de cálculo encontrara alguna incongruencia en la identificación de productos y sus fases, se tiene la oportunidad de asignar los compuestos que pueden aparecer a la salida del reactor, así como la fase en que pudieran estar presentes con el botón *Identify possible products*.

### 2.2.3. Asignación de corrientes

Una vez que han sido establecidos o identificados los posibles productos de la reacción de combustión, es necesario especificar las corrientes de salida por las que los productos “abandonan” el reactor, en este caso la figura 24 muestra que el módulo le asigna a la primer corriente de salida la fase vapor, sucesivamente asigna la salida a la fase líquida a las demás corrientes de salida que le sean añadidas al reactor.

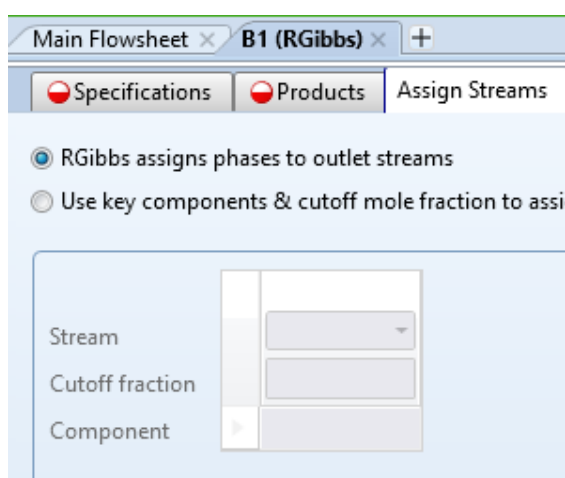


Figura 24. Asignación de corrientes.

La ventaja principal que el reactor de Gibbs proporciona a este trabajo es la asignación de una corriente de salida exclusiva para sólidos puros desde una pestaña especial que se muestra en la figura 25, permitiendo conocer si existe la posibilidad de una posible formación de coque.

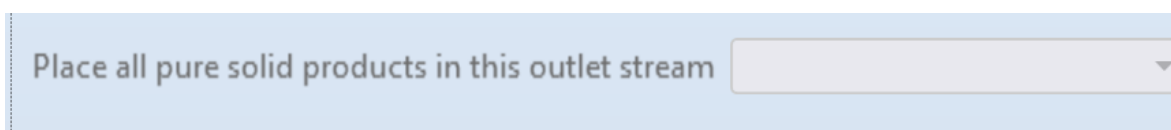


Figura 25. Asignación de la corriente de salida para sólidos puros.

## 2.3. Implementación del modelo de simulación

En este apartado, se presenta la parte metodológica de implementación para simular el proceso de combustión in situ en sus dos vertientes principales: combustión seca y combustión húmeda, ambas llevadas a cabo suponiendo condiciones isotérmicas y adiabáticas. Cabe señalar que para el desarrollo de las pruebas se emplea la versión “*Aspen Plus V8.8*”, bajo licencia otorgada a la Facultad de Química de la UNAM, por la compañía Aspen Technology Inc.

### 2.3.1. Propiedades del fluido de yacimiento

Antes de llevar a cabo la simulación del proceso, es necesario conocer los componentes que constituyen al fluido de yacimiento y las condiciones de proceso (P y T) a las que se encuentran sometidas. Dicho lo anterior y con la caracterización realizada por Galicia [17] a un crudo ligero mexicano, cuya característica es ser un aceite volátil, se propone lista de componentes y pseudocomponentes mostrados en la tabla 2.2.

**Tabla 2.2. Caracterización del fluido de yacimiento.**

Componente	Frac. mol	Componente	Frac. mol
CO <sub>2</sub>	0.01872	N-C14	0.00878
H <sub>2</sub> S	0.01349	N-C15	0.00782
N <sub>2</sub>	0.00454	N-C16	0.00697
CH <sub>4</sub>	0.52033	N-C17	0.00622
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.10382	N-C18	0.00555
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0.05952	N-C19	0.00496
I-C4	0.01097	N-C20	0.00444
N-C4	0.02623	N-C21	0.00397
I-C5	0.01102	N-C22	0.00356
N-C5	0.01385	N-C23	0.00318
N-C6	0.02559	N-C24	0.00285
N-C7	0.02477	N-C25	0.00256
N-C8	0.01930	N-C26	0.00229
N-C9	0.01650	N-C27	0.00206
N-C10	0.01437	N-C28	0.00184
N-C11	0.01263	N-C29	0.00165
N-C12	0.01115	N-C30	0.01461
N-C13	0.00989		

Asimismo, las condiciones a las cuales se encuentra el fluido utilizado en este trabajo presentan los siguientes valores que se tienen en el seno del yacimiento:

- $T = 420.15 \text{ K}$  ( $147^\circ \text{ C}$ ); y
- $P = 646.42 \text{ atm}$  ( $667.90 \text{ Kg}_f/\text{cm}^2$ ).

Con estas condiciones, se procede a llevar a cabo la simulación empleando el reactor de Gibbs, debido a que el uso de otro tipo de módulos de reacción que provee el simulador (RStoic, RYield, REquil, RCSTR, RPlug y RBatch) requieren de especificar el set de reacciones químicas balanceadas ó las ecuaciones de cinética química que se sospecha pueden llevarse a cabo con el fluido de yacimiento.

### **2.3.2. Corrientes de alimentación y modelo termodinámico**

Gracias a la amplia base de datos de Aspen Plus® se puede definir, no solo las corrientes de alimentación, sino también los productos que “abandonan” el reactor después de llevar a cabo el proceso. Desde la pestaña *Properties*, se realiza la definición de los productos y reactivos las propiedades mostradas en la tabla 2.2 y en la parte teórica del capítulo 1. En la figura 26 se da evidencia de los componentes que integran el proceso de simulación, la lista completa de componentes se presenta en el anexo I.

Posteriormente hecha la definición de reactivos y productos del proceso, el simulador requiere de un modelo termodinámico para llevar a cabo los cálculos de los balances de materia y energía, en este caso se selecciona el modelo de Peng-Robinson, ver figura 27, ya que es una de las ecuaciones de estado más utilizadas en la industria petrolera.



Components - Specifications x +

Selection Petroleum Nonconventional Enterprise Database Information

Select components

Component ID	Type	Component name	Alias
▶ CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
▶ H2S	Conventional	HYDROGEN-SULFIDE	H2S
▶ N2	Conventional	NITROGEN	N2
▶ CH4	Conventional	METHANE	CH4
▶ C2H6	Conventional	ETHANE	C2H6
▶ C3H8	Conventional	PROPANE	C3H8
▶ I-C4	Conventional	ISOBUTANE	C4H10-2
▶ N-C4	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1
▶ I-C5	Conventional	2-METHYL-BUTANE	C5H12-2
▶ N-C5	Conventional	N-PENTANE	C5H12-1
▶ N-C6	Conventional	N-HEXANE	C6H14-1
▶ N-C7	Conventional	N-HEPTANE	C7H16-1
▶ N-C8	Conventional	N-OCTANE	C8H18-1
▶ N-C9	Conventional	N-NONANE	C9H20-1
▶ N-C10	Conventional	N-DECANE	C10H22-1
▶ N-C11	Conventional	N-UNDECANE	C11H24
▶ N-C12	Conventional	N-DODECANE	C12H26
▶ N-C13	Conventional	N-TRIDECANE	C13H28
▶ N-C14	Conventional	N-TETRADECANE	C14H30
▶ N-C15	Conventional	N-PENTADECANE	C15H32
▶ N-C16	Conventional	N-HEXADECANE	C16H34

Find File Wizard User Defined Reorder Review

Properties

- All Items
- Setup
- Components
  - Specifications
    - Molecular Structure
    - Assay/Blend
    - Light End Properties
    - Petro Characterization
    - Pseudocomponents
    - Component Attributes
    - Henry Comps
    - UNIFAC Groups
    - Polymers
  - Methods
  - Chemistry
  - Property Sets
  - Data
  - Estimation
  - Analysis
  - Customize
  - Results
  - Run Status

Properties Simulation Safety Analysis Energy Analysis

Results Available Check Status

Figura 26. Especificación de componentes.

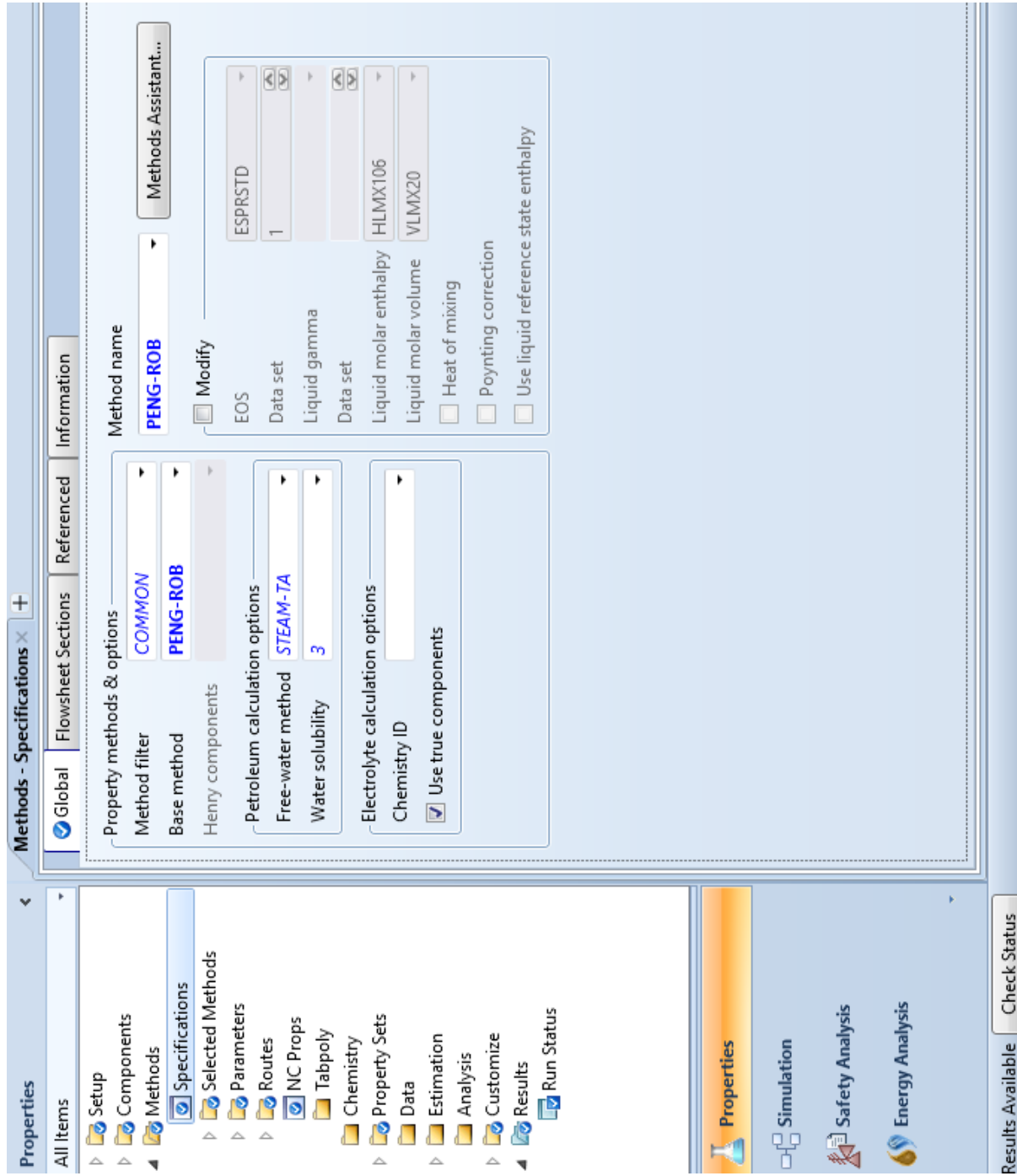


Figura 27. Selección del modelo termodinámico.

### 2.3.3. Simulación de combustión seca

Para llevar a cabo estos casos de simulación, se utiliza una regla de oro que es fundamental para resolver problemas de balances de materia y energía: establecer una base de cálculo. En este caso, se hace la suposición de que ambas corrientes de alimentación (PR y Air) mostradas en el diagrama de flujo de la figura 28, entran al reactor a razón de 1000 kmol/hr, equivalentes a 927.22 bbl/hr de hidrocarburo y 443.08 bbl/hr de aire (recordemos que el yacimiento actuará como reactor) a las condiciones de T y P que se encuentran dentro del yacimiento.

#### 2.3.3.1. Caso adiabático

Tal y como se mencionó en la descripción del reactor de Gibbs, se necesitan señalar dos especificaciones para que el módulo, que ahora se conocerá como R-100, pueda funcionar correctamente, en este caso adiabático se establece que las condiciones de operación son:  $P= 646.42$  atm y  $Q= 0$  kW, ver figura 29, en el cual se obtendrá la temperatura máxima de la reacción.

The screenshot shows the 'R-100 (RGibbs)' specifications window. The 'Specifications' tab is active. The 'Calculation option' is set to 'Calculate phase equilibrium and chemical equilibrium'. Under 'Operating conditions', 'Pressure' is 646.421 atm, 'Temperature' is K, and 'Heat Duty' is 0 kW. Under 'Phases', 'Maximum number of fluid phases' is 1, 'Maximum number of solid solution phases' is 0, 'Include vapor phase' is checked, and 'Merge all CISOLID species into the first CISOLID substream' is unchecked.

Figura 29. Especificaciones de R-100.

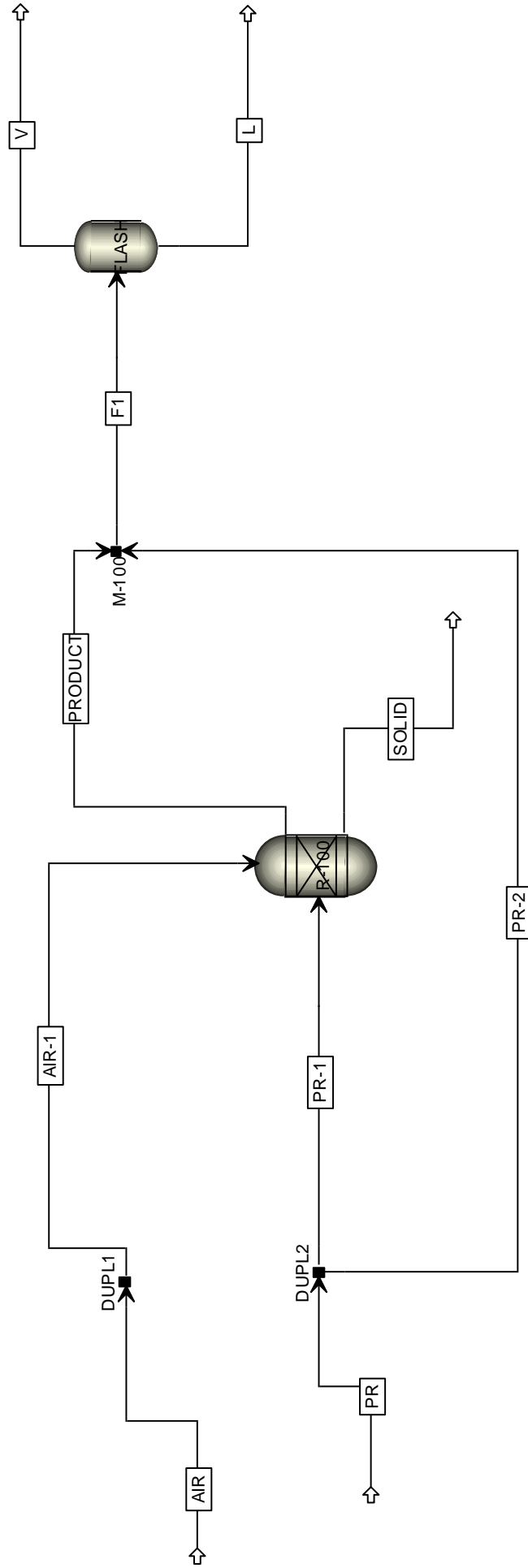
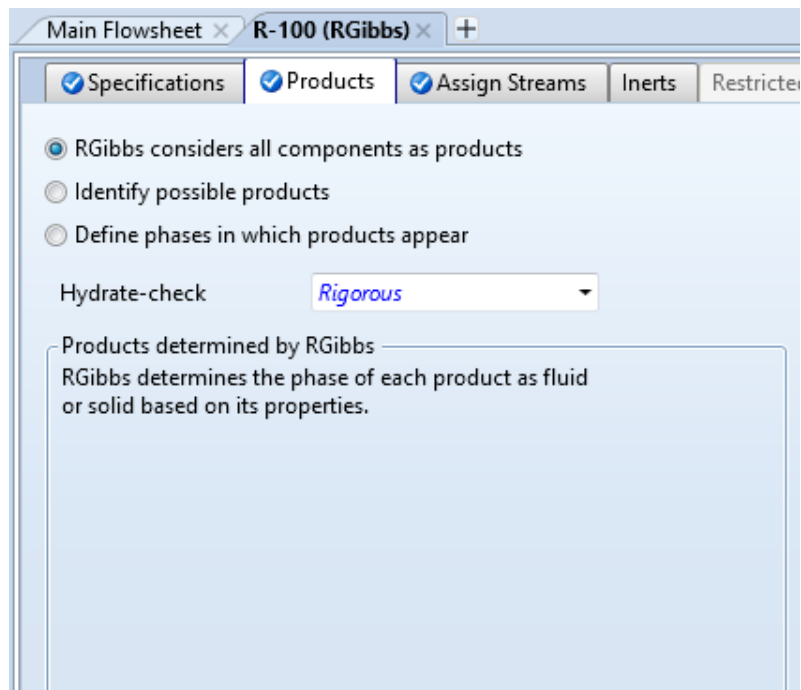


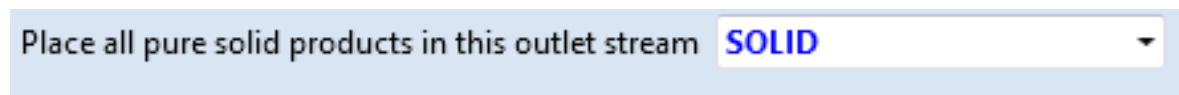
Figura 28. Diagrama de simulación para combustión seca.

Se consideran a todos los componentes declarados como posibles productos de reacción, los cuales abandonarán el reactor de Gibbs a través de la corriente PRODUCT; asimismo el reactor determinará las fases en las que los productos se hacen presentes, la figura 30 muestra la selección de dichas especificaciones.



**Figura 30. Especificaciones de producto.**

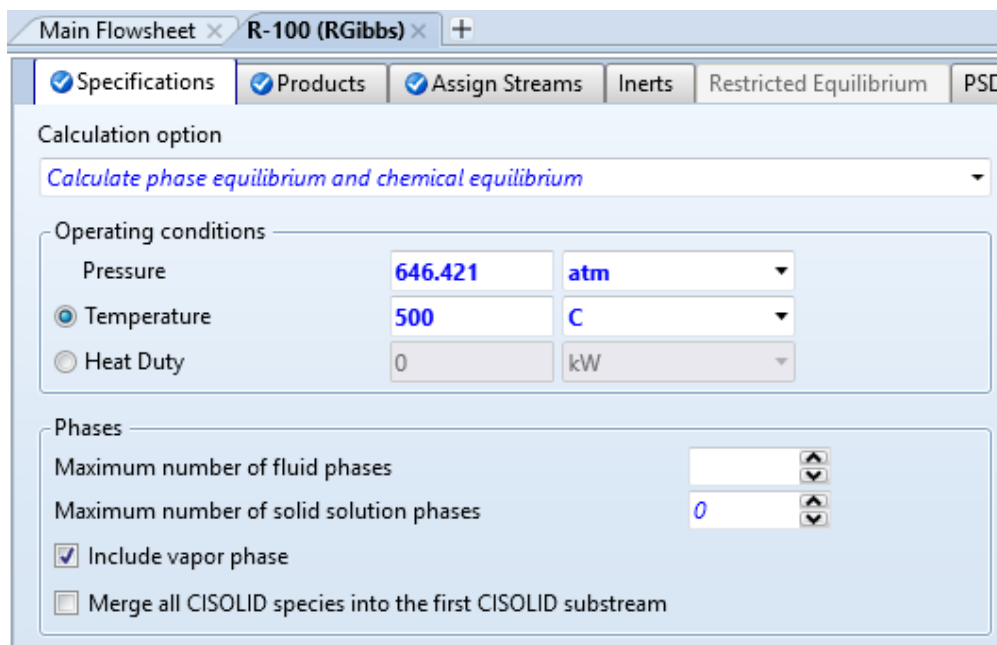
Gracias a que el módulo R-100 permite simular la formación de sólidos, se asignará a la corriente SOLID como la salida de los compuestos en fase sólida tal y como se ilustra en la figura 31.



**Figura 31. Corriente de salida de compuestos en fase sólida.**

### 2.3.3.2. Caso isotérmico

La simulación se realiza de manera similar al caso adiabático, pero con la diferencia de especificaciones para el módulo R-100, en este caso las condiciones de operación a proporcionar son la presión del yacimiento y la temperatura a la que se encuentra éste ( $T_1 = 147^\circ\text{C}$ ). Además, se lleva a cabo otra prueba a una temperatura en que se puede llevar a cabo una serie de reacciones de oxidación a altas temperaturas (OAT), mostradas en el capítulo 1, a condiciones de  $P = 646.42 \text{ atm}$  y  $T_2 = 500^\circ\text{C}$ , ver figura 32, el cual representa un caso intermedio entre las dos condiciones límites de temperatura.



**Figura 32. Condiciones de operación del reactor isotérmico.**

Tanto las características de la simulación adiabática e isotérmica en las pestañas *Products* y *Assign Streams* permanecen inalterables, es decir, las corrientes de salida del primer caso son las mismas que para este nuevo sistema isotérmico simplemente se especifican distintas condiciones de operación. Asimismo, el esquema de reacción no varía y permanece de manera similar al mostrado en la figura 28.

### 2.3.4. Simulación de combustión húmeda

La segunda propuesta de simulación consiste en observar si existe una variación de composición de los productos y de temperatura (si es el caso) al añadir una corriente de entrada adicional, la cual está constituida por el 100% mol de agua y que se representa en la corriente WATER. De manera similar, se desarrolla el mismo proceso que con el caso de combustión seca, la base de cálculo queda fijada en 1000 kmol/hr de cada una de las corrientes de entrada al módulo R-100 (PR, Air y Water); el flujo de agua que es alimentada equivale a 130.75 bbl/hr.

Al igual que las corrientes PR y Air, la corriente WATER posee las mismas características de proceso que las corrientes de entrada especificadas en el caso de combustión seca. Dado que los casos de operación del módulo R-100 corresponden a un caso adiabático e isotérmico, las condiciones de operación de dicho módulo permanecen inalterables y se realiza la simulación de acuerdo a las figuras 29, 30 y 31.

Asimismo, el esquema de operación final del caso de combustión húmeda se muestra en la figura 33 en la cual se adiciona la corriente de agua. Cabe resaltar que el separador de dos fases (FLASH) en ambos casos fue añadido para posteriores simulaciones en donde se desarrollará un sistema de separación multietapa de la cual no se entrará a detalle, debido a que el tema de interés del presente trabajo consiste en conocer los productos de reacción que se encuentran presentes al equilibrio a unas determinadas condiciones de presión y temperatura.

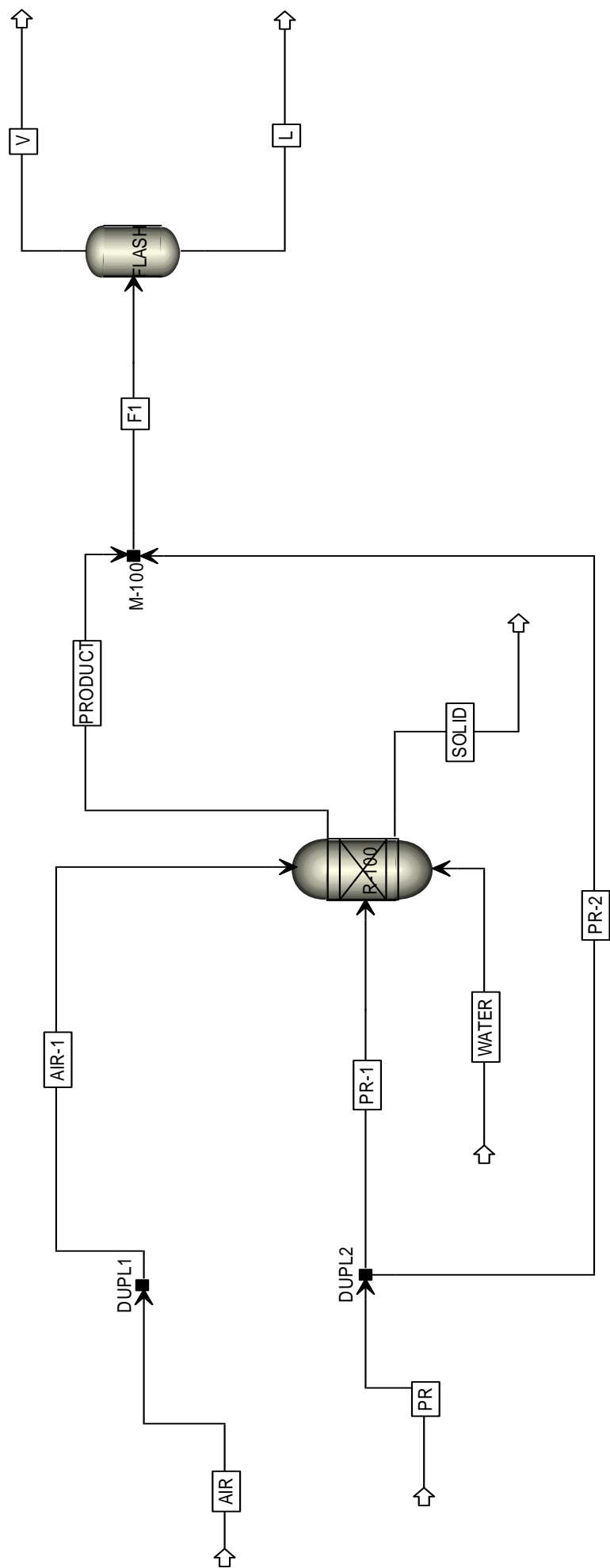


Figura 33. Diagrama de simulación para combustión húmeda.



### 2.3.5. Análisis de sensibilidad

Los análisis de sensibilidad de los módulos son de gran importancia en la simulación, pues proveen un mecanismo que permite analizar el efecto de alguna de las variables manipuladas del proceso que el usuario seleccione, en este caso se utilizan las siguientes variables de acuerdo a los casos de simulación presentados en las tablas 2.3 y 2.4.

<b>Tabla 2.3. Análisis de sensibilidad de la combustión seca.</b>				
<b>Caso</b>	<b>Adiabático</b>		<b>Isotérmico</b>	
<b>Variables manipuladas</b>	Flujo de entrada de aire	[kmol/hr]	Flujo de entrada de aire	[kmol/hr]
	---		Temperatura del reactor	[°C]
<b>Variables observadas</b>	Flujo molar de salida	[CH <sub>4</sub> ]	Flujo molar de salida	[CH <sub>4</sub> ]
		[CO]		[CO]
		[CO <sub>2</sub> ]		[CO <sub>2</sub> ]
		[H <sub>2</sub> O]		[H <sub>2</sub> O]
		[Coque]		[Coque]
	Temperatura del reactor	[°C]	Carga térmica del reactor	[MW]

<b>Tabla 2.4. Análisis de sensibilidad de la combustión húmeda.</b>				
<b>Caso</b>	<b>Adiabático</b>		<b>Isotérmico</b>	
<b>Variables manipuladas</b>	Flujo de entrada de aire	[kmol/hr]	Flujo de entrada de aire	[kmol/hr]
	Flujo de entrada de agua	[kmol/hr]	Flujo de entrada de agua	[kmol/hr]
	---		Temperatura del reactor	[°C]
<b>Variables observadas</b>	Flujo molar de salida	[CH <sub>4</sub> ]	Flujo molar de salida	[CH <sub>4</sub> ]
		[CO]		[CO]
		[CO <sub>2</sub> ]		[CO <sub>2</sub> ]
		[H <sub>2</sub> O]		[H <sub>2</sub> O]
		[Coque]		[Coque]
	Temperatura del reactor	[°C]	Carga térmica del reactor	[MW]

Este procedimiento se utiliza para modificar sistemáticamente una o más variables mostradas en el diagrama de flujo (figuras 28 y 33) y estudiar el efecto que se tiene en otras variables del mismo diagrama. Es una herramienta importante para realizar estudios de “¿qué pasa si...?”.

Además, las variables que sean manipuladas deben ser entradas o especificaciones de algún equipo mostrado en el diagrama de flujo, y no pueden ser variables que sean calculadas durante la simulación, es decir, variables de salida.

El uso del análisis de sensibilidad puede ser aplicado para verificar si la solución a una especificación de diseño se encuentra dentro del rango de la variable manipulada y para realizar una optimización del proceso. La figura 34 ejemplifica la ejecución de un análisis de sensibilidad llevada a cabo en la corriente AIR, en el capítulo 3 se detallarán los resultados obtenidos en todos los casos ejecutados.

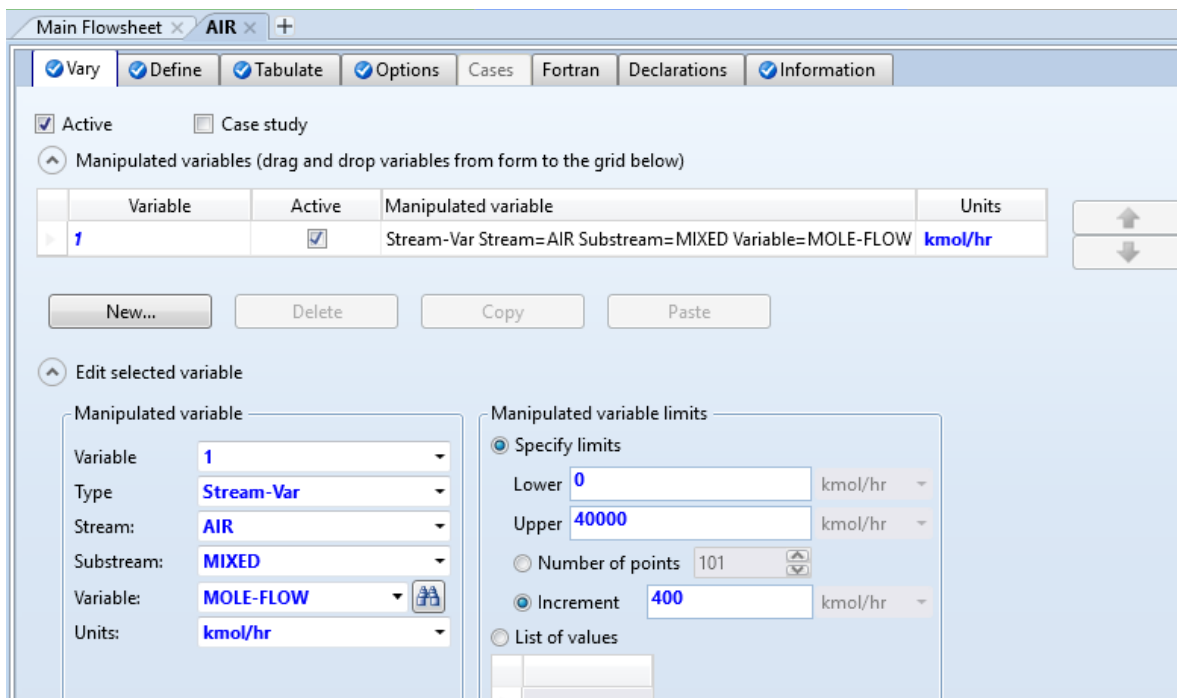


Figura 34. Pestaña de ejecución del análisis de sensibilidad.

---

## Capítulo 3: VALIDACIÓN Y RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

---

Los resultados que se muestran en este capítulo se organizan de manera tal que corresponden a los casos base y casos de análisis de sensibilidad simulados.

En esta sección se presentan los resultados en forma tabular de los casos base isotérmicos y adiabáticos a las condiciones especificadas en el módulo R-100. Para el caso adiabático se presentan las temperaturas que alcanza el reactor ya sea en la combustión seca o húmeda y en el caso isotérmico se presentan las cargas térmicas que se requieren para llevar a cabo las reacciones de combustión. Al realizar las simulaciones se establecen dos condiciones de operación del módulo:

1. Se considera que el reactor se encuentra en un baño isotérmico a las condiciones de yacimiento, en el cual la transferencia de calor es totalmente eficiente.
2. El reactor es adiabático y, en consecuencia, el efluente del reactor va a alcanzar la máxima temperatura posible.
3. El reactor opera a una condición isotérmica, pero a una temperatura intermedia acotada por la temperatura de yacimiento y la temperatura adiabática.

En todos los casos, se busca determinar las especies químicas presentes en el equilibrio y con esto saber el sentido en el cual se favorecen las reacciones químicas.

En cada uno de estos casos base, se consideraron las especificaciones mostradas en el apartado 2.3.3 y 2.3.4, donde se quiere entender cuál es el efecto que tienen los flujos de aire y agua en la producción o inhibición de ciertas especies químicas.

Cabe destacar que se desea inhibir la producción de coque porque esta especie daña la matriz rocosa, lo cual es desfavorable para la producción de hidrocarburos, de manera similar no se desea la formación de agua, porque se imbibes en la roca y dadas las características geológicas de este yacimiento formado por carbonatos de calcio principalmente, se puede favorecer la formación de cementaciones naturales.

Las especies químicas deseables son el metano, CO y CO<sub>2</sub> porque favorecen la movilidad de los fluidos del yacimiento.

La selección de componentes químicos obtenidos por la caracterización y por la revisión de la literatura presentada en el capítulo 1 se muestra en la tabla 3.1.

<b>Tabla 3.1.</b>					
<b>Especies químicas declaradas por el usuario</b>	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> S	N <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	I-C4	N-C4	I-C5	N-C5
	N-C6	N-C7	N-C8	N-C9	N-C10
	N-C11	N-C12	N-C13	N-C14	N-C15
	N-C16	N-C17	N-C18	N-C19	N-C20
	N-C21	N-C22	N-C23	N-C24	N-C25
	N-C26	N-C27	N-C28	N-C29	N-C30
	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	H <sub>2</sub>	NO
	NO	NO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	CARBON
	ETILENO	PROPILEN	ISOBUTIL	C-BUTEN	TR-BUTEN
	PENTENE	C-PENTE	T-PENTE	BENZENE	TOLUENE
	PHENAN	FLOURAN	CHRYSENE	B[A]PYR	STYRENE
	ACETILEN	M-ACETIL	BUTYNE	C-PROP	OX-ETHYL
	C-BUTAN	ACETONE	MEK	DIACETYL	METOH
	ETOH	1-C3OH	I-C3OH	N-C4OH	I-C4OH
	NH <sub>3</sub>				

### 3.1. Caso adiabático

Este es un caso especial de simulación, pues si se supone esta condición se pensaría que el frente de combustión no transfiere energía térmica a los alrededores del sistema lo cual provoca una acumulación de energía en el mismo, esto se traduce en un incremento hasta alcanzar una temperatura máxima posible. La alimentación al reactor se estableció a las condiciones del yacimiento, modificando en cada caso de simulación la proporción de alguna de las corrientes de aire y agua con respecto a la cantidad de hidrocarburo presente.

A continuación, se resuelve el equilibrio químico y se observa el comportamiento del efluente del reactor, esto puede ser considerado como la condición que tendría un elemento de volumen en el seno del yacimiento para el cual se tuvieran las mismas condiciones y la composición que se obtiene corresponde a la que se alcanzaría si se tuviera el tiempo suficiente para que el elemento de volumen evolucionará hasta alcanzar el equilibrio. Aquí se aprovecha la condición de equilibrio para conocer el sentido en el cual evolucionará la combustión en el yacimiento e identificar las especies químicas que se forman. No se considera, por la naturaleza del planteamiento del modelo, la rapidez con la cual se forman estas especies químicas.

**Combustión seca.** Aquí se establecen las condiciones que se señalan en el apartado 2.3.3.1, y los resultados que se obtienen se resumen en la tabla 3.2.

<b>Tabla 3.2. Resultados del módulo R-100: Combustión Seca</b>		
Temperatura de salida	963.42	K
Presión de salida	646.42	atm
Carga térmica	0.00	kW
Carga térmica neta	0.00	kW
Fracción de vapor	1	
Número de fases fluidas	1	
Número máximo de sólidos puros	1	
Flujo de coque producido	1934.12	kmol/hr
	23.23	ton/hr

Los resultados desglosados de este caso de simulación se muestran en el anexo II.

**Combustión Húmeda.** En este caso, se suministra agua al reactor; se observa en la tabla 3.3 que aquí hay un cambio en el comportamiento del módulo comparado con los resultados obtenidos en la combustión seca, pues se inicia una disminución de la temperatura a la que se están llevando las reacciones asociadas a la combustión a medida que aumenta la proporción de agua, porque funciona como agente de *quenching*. Comparativamente, se observa una disminución en la formación de coque, la cual puede asumirse porque se inhibe su producción por la presencia del agua en el equilibrio.

Temperatura de salida	813.74	K
Presión de salida	646.42	atm
Carga térmica	0.00	kW
Carga térmica neta	0.00	kW
Fracción de vapor	1	
Número de fases fluidas	1	
Número máximo de sólidos puros	1	
Flujo de coque producido	1727.55	kmol/hr
	20.75	ton/hr

El propósito de incorporar agua a la reacción es aportar átomos de hidrógeno y oxígeno para favorecer la producción de metano, CO y CO<sub>2</sub>. Sin embargo, lo que se observa es que en el equilibrio el agua no se descompone y permanece estable.

Al final hay mayor disponibilidad de agua que puede favorecer la saturación de la matriz.

En conclusión, los efectos favorables del agua son:

- Ligera disminución de la producción de coque.
- Abatimiento de la temperatura adiabática.

Por lo que es necesario determinar una cantidad apropiada de agua en la operación de combustión, pero no es la solución.

Los desgloses de los resultados son mostrados con más detalle en el anexo III.

Otro punto importante es que, a las temperaturas finales de los casos adiabáticos, que van entre los 800 y 1000 K el simulador no arroja resultados consistentes al declarar especies químicas como alcoholes, éteres y cetonas, por lo que en este caso no son consideradas para la ejecución de la simulación.

### 3.2. Caso isotérmico

En estos casos de simulación, se hace la suposición en el reactor que la temperatura no varía y puede permanecer constante a lo largo del proceso. Este es un caso límite, en el que se busca la temperatura mínima a la cual puede estar sometida la reacción. Esta temperatura corresponde a las condiciones del yacimiento en donde se tiene un baño isotérmico enorme.

**Combustión seca (caso límite).** Este es el primer caso evaluado y se describe en el apartado 2.3.3.2., el resumen de los resultados obtenidos se presenta en la tabla 3.4; este caso corresponde a las reacciones de oxidación a bajas temperaturas (OAT).

<b>Tabla 3.4. Resultados del módulo R-100: Combustión Seca</b>		
Temperatura de salida	420.15	K
Presión de salida	646.42	atm
Carga térmica	-39.62	MW
Carga térmica neta	-39.62	MW
Fracción de vapor	1	
Número de fases fluidas	1	
Número máximo de sólidos puros	1	
Flujo de coque producido	1830.83	kmol/hr
	21.99	ton/hr

**Combustión seca (caso intermedio).** Este es el segundo caso evaluado y se describe en el mismo que el *caso límite*, el resumen de los resultados obtenidos se presenta en la tabla 3.5, este caso corresponde a las reacciones de oxidación a altas temperaturas (OAT).

Temperatura de salida	773.15	K
Presión de salida	646.42	atm
Carga térmica	-16.71	MW
Carga térmica neta	-16.71	MW
Fracción de vapor	1	
Número de fases fluidas	1	
Número máximo de sólidos puros	1	
Flujo de coque producido	1849.70	kmol/hr
	22.22	ton/hr

Comparativamente, ambos resultados de la combustión seca en cuanto a la producción de coque tienen resultados similares al momento de alcanzar el equilibrio, pero al aumentar la temperatura ocurre un aumento de la carga térmica en el reactor, es decir, se tiene una mayor disponibilidad de energía térmica sin incrementar la producción de coque. Un punto importante aquí es que se consideraron especies químicas como el alcohol, éteres y cetonas, puesto que en la simulación a  $T = 420.15 \text{ K}$  ( $147^\circ\text{C}$ ) se obtuvieron estos productos, aunque sus valores en el efluente del reactor son muy bajos en comparación con las especies dominantes, y es evidencia de que existen reacciones de oxidación a bajas temperaturas (OBT).

**Combustión húmeda (caso límite).** Este es el tercer caso evaluado y se describe en el apartado 2.3.4, el resumen de los resultados obtenidos se presenta en la tabla 3.6; este caso, al igual que la combustión seca, corresponde a las reacciones de oxidación a bajas temperaturas (OBT).



<b>Tabla 3.6. Resultados del módulo R-100: Combustión Húmeda</b>		
Temperatura de salida	420.15	K
Presión de salida	646.42	atm
Carga térmica	-34.67	MW
Carga térmica neta	-34.67	MW
Fracción de vapor	1	
Número de fases fluidas	1	
Número máximo de sólidos puros	1	
Flujo de coque producido	1841.09	kmol/hr
	22.11	ton/hr

**Combustión húmeda (caso intermedio).** Este es el caso evaluado descrito en el mismo apartado que el caso *límite.*, el resumen de los resultados obtenidos se presenta en la tabla 3.7; este caso, al igual que la combustión seca, corresponde a las reacciones de oxidación a altas temperaturas (OAT).

<b>Tabla 3.7. Resultados del módulo R-100: Combustión Húmeda</b>		
Temperatura de salida	773.15	K
Presión de salida	646.42	atm
Carga térmica	-3.85	MW
Carga térmica neta	-3.85	MW
Fracción de vapor	1	
Número de fases fluidas	1	
Número máximo de sólidos puros	1	
Flujo de coque producido	1736.98	kmol/hr
	20.86	ton/hr

Comparando los resultados del tercer y cuarto casos de evaluación, se encuentra que en este la formación de coque en la combustión húmeda del caso límite es mayor con respecto a la combustión del caso intermedio, pues al momento de llevar a cabo un proceso a condiciones del yacimiento el suministro de agua es prácticamente irrelevante en la formación de coque.

Para más detalles de los resultados obtenidos para el caso isotérmico, se sugiere consultar los anexos IV, V, VI y VI.

En todos los casos evaluados (adiabáticos e isotérmicos) se encontró lo siguiente:

- Las especies predominantes en el efluente del reactor son: metano, CO, CO<sub>2</sub>, agua y coque y el resto de las especies declaradas en la tabla 3.1 son trazas, es decir, irrelevantes para el balance de materia.
- Todos los procesos de reacción son exotérmicos.
- En todos los casos a baja temperatura se forma la mayor cantidad de coque, mientras que a altas temperaturas no hay presencia de esta sustancia.
- A altas temperaturas, cuando se tienen grandes flujos de aire, las especies predominantes en el equilibrio son el agua y el CO<sub>2</sub>. Y cuando se tienen grandes flujos de agua, las especies predominantes son agua y metano.

### 3.3. Análisis de sensibilidad

Los análisis de sensibilidad fueron realizados variando los parámetros de operación del módulo *RGibbs* y de las corrientes de entrada al mismo de acuerdo con los dos tipos de combustión in situ: seca y húmeda que se muestran en la tabla 2.2n, con estos análisis se busca hacer una descripción cuantitativa de los resultados que se presentaron en el apartado anterior.

Para obtener resultados consistentes se normalizaron las corrientes de salida (Product y Solid) con la finalidad de obtener el flujo molar de las especies químicas a la salida del reactor, dicha normalización se obtuvo de dos formas:

1. Realizando una suma aritmética de los valores de las corrientes de salida del módulo R-100; y

2. Suponer que las corrientes de salida entran a un mezclador de corrientes (M-100) y se añade éste al diagrama de flujo de proceso en las simulaciones originales creándose así una nueva corriente de salida (F1), de esta forma se construye el diagrama mostrado en la figura 35, que aplica para todos los casos de simulación.

Logrado lo anterior, se establecieron los parámetros a variar de acuerdo al tipo de ensayo al que fue sometido el módulo (adiabático e isotérmico) para lo cual se tomaron las especificaciones mostradas en las tablas 2.3 y 2.4.

Se han seleccionado como criterios de medición los productos principales de combustión que fueron encontrados como las especies químicas predominantes, como lo son los flujos molares [kmol/hr] de:

- Metano [CH<sub>4</sub>].
- Monóxido de carbono [CO].
- Dióxido de carbono [CO<sub>2</sub>].
- Agua [H<sub>2</sub>O].
- Coque producido [Coal].

Es necesario recordar que los análisis realizados parten de una base de cálculo de 1000 kmol/hr de hidrocarburo, por lo que en las gráficas que se muestren una relación molar (aire o agua) son obtenidas a partir de la ecuación 3.1:

$$Relación\ molar = \frac{[Flujo\ molar\ de\ aire\ o\ agua]}{[Base\ de\ cálculo]} \quad (3.1)$$

Todos los resultados mostrados gráficamente se encuentran tabulados en el anexo VII, separados por cada caso de simulación (combustión adiabática y combustión isotérmica).

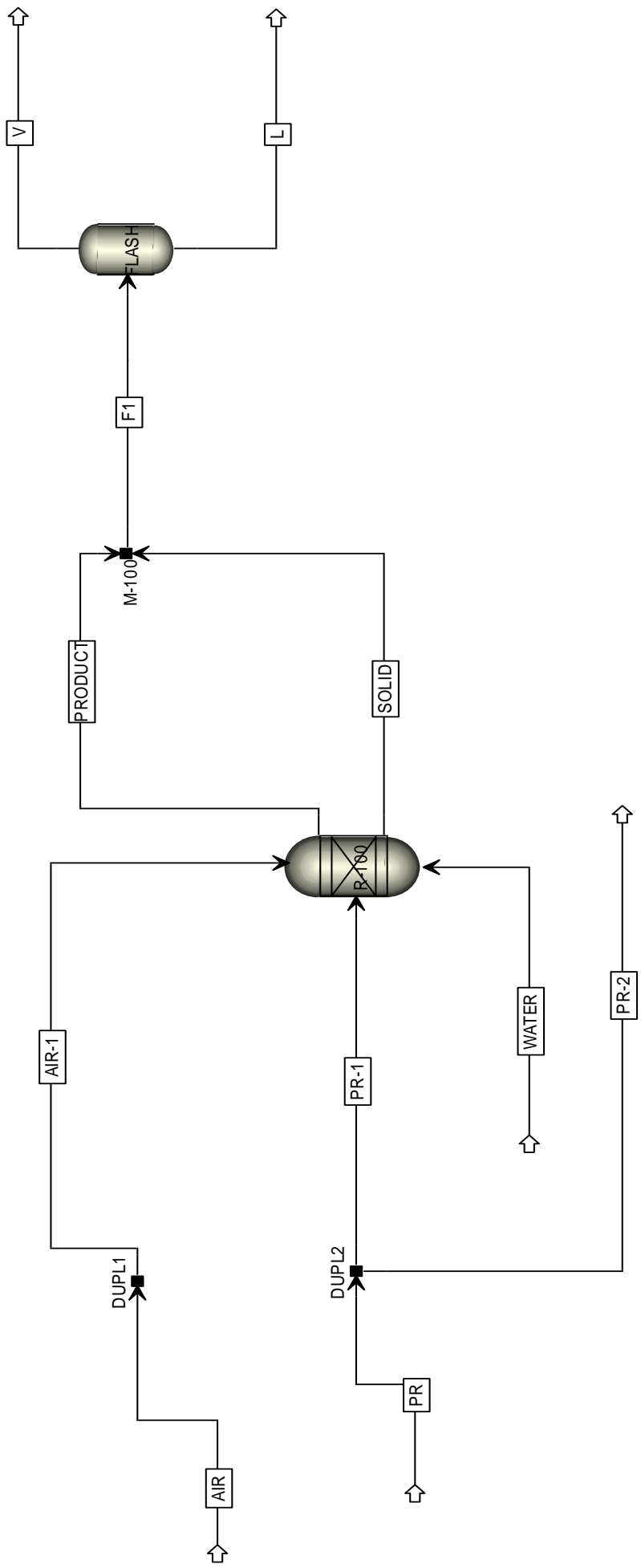
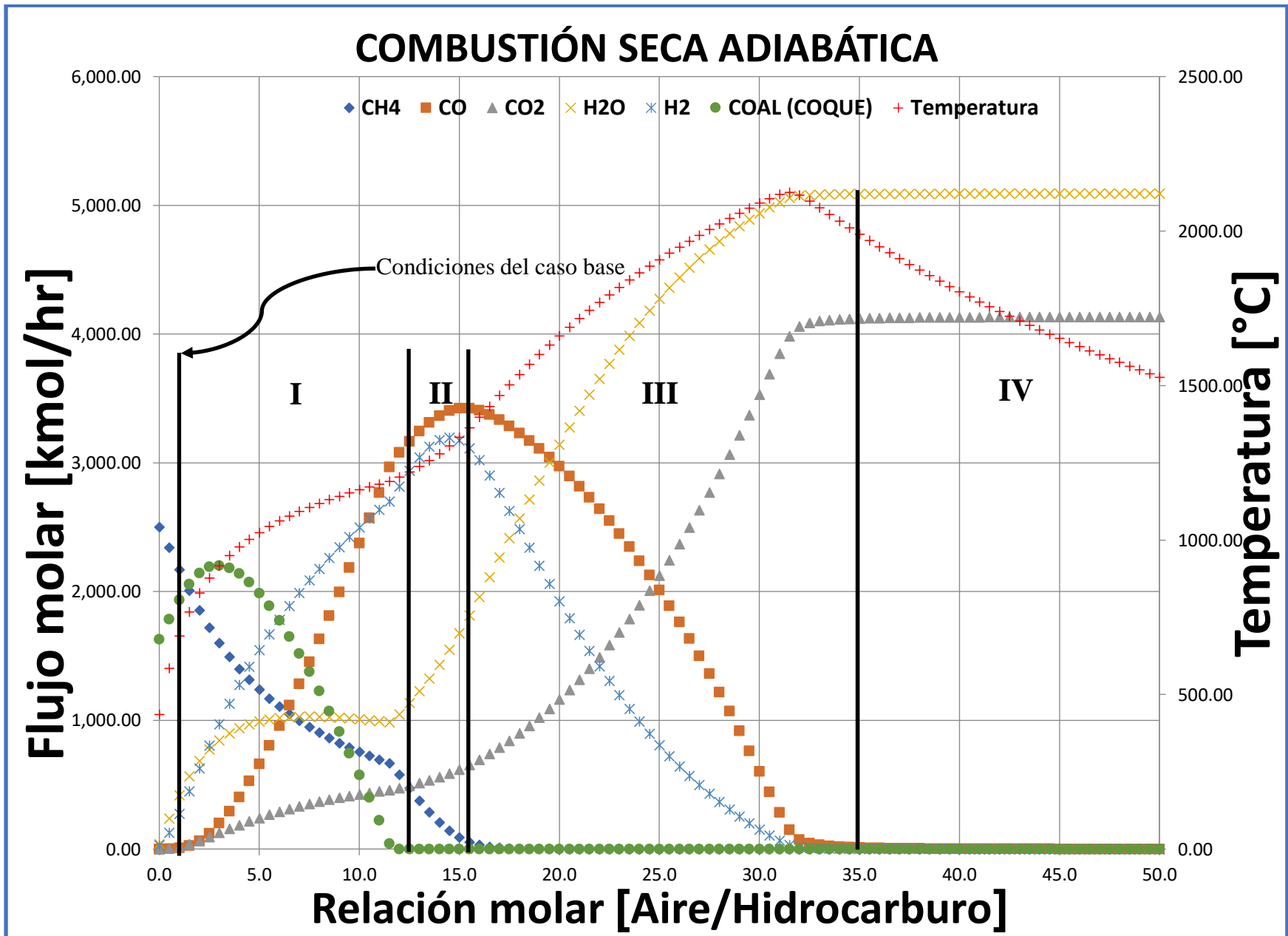


Figura 35. DFP para normalización de corrientes de salida.

En la gráfica 3.1 se observa que a medida que aumenta la relación molar del aire que es suministrado al reactor se produce un consumo del constituyente principal del aceite volátil (metano), convirtiéndose en su mayoría en coque, el cual se alcanza al alimentar 3 veces el flujo de aire con respecto al hidrocarburo, esto se observa en la región I de la gráfica. Posteriormente en la región II, se observa que cuando el suministro de aire alcanza un valor de 13 veces la relación molar aire/hidrocarburo, comienza a agotarse el metano y la conversión compete principalmente entre agua y dióxido de carbono, los cuales son los que prevalecen en su mayoría hasta mantener una relación molar de 35 veces aire/hidrocarburo; posterior a esta relación, los flujos de salida del agua y el dióxido de carbono permanecen constantes. Por otro lado, en la misma región la combustión del hidrocarburo a monóxido de carbono consigue su flujo máximo de salida al momento de tener 15.5 veces la alimentación del aire, cuyo valor aproximado se sitúa en el rango de los 3430 kmol/hr, hasta su posterior decaimiento cercano a las 35 veces el suministro de aire, pues es aquí donde comienza la competencia entre el agua y el CO<sub>2</sub>, esto se muestra en la región III de la gráfica 3.1. De la misma forma, el H<sub>2</sub> presenta su flujo máximo de salida del reactor cuando se suministra 14.5 veces aire con respecto al hidrocarburo con un valor aproximado del efluente de 3200 kmol/hr; en la región IV, puede asumirse que la combustión es completa, puesto que los únicos productos presentes en el efluente del reactor son el agua y el CO<sub>2</sub>.

En segundo lugar, se observa que la temperatura alcanzada aumenta a medida que se continua con el suministro de aire al reactor, pero al igual que ocurre con el agua y el CO<sub>2</sub>, la temperatura llega a su máximo en la región III, esto es al suministrar 35 veces el flujo de aire teniendo un valor por arriba de los 2000°C, lo cual representa una temperatura que no es posible alcanzar en el yacimiento, pero señala la tendencia de los procesos. Posteriormente, la temperatura comienza a disminuir a medida que se sigue suministrando aire al reactor, esto hace que el propio aire actúe a su vez como medio de enfriamiento.

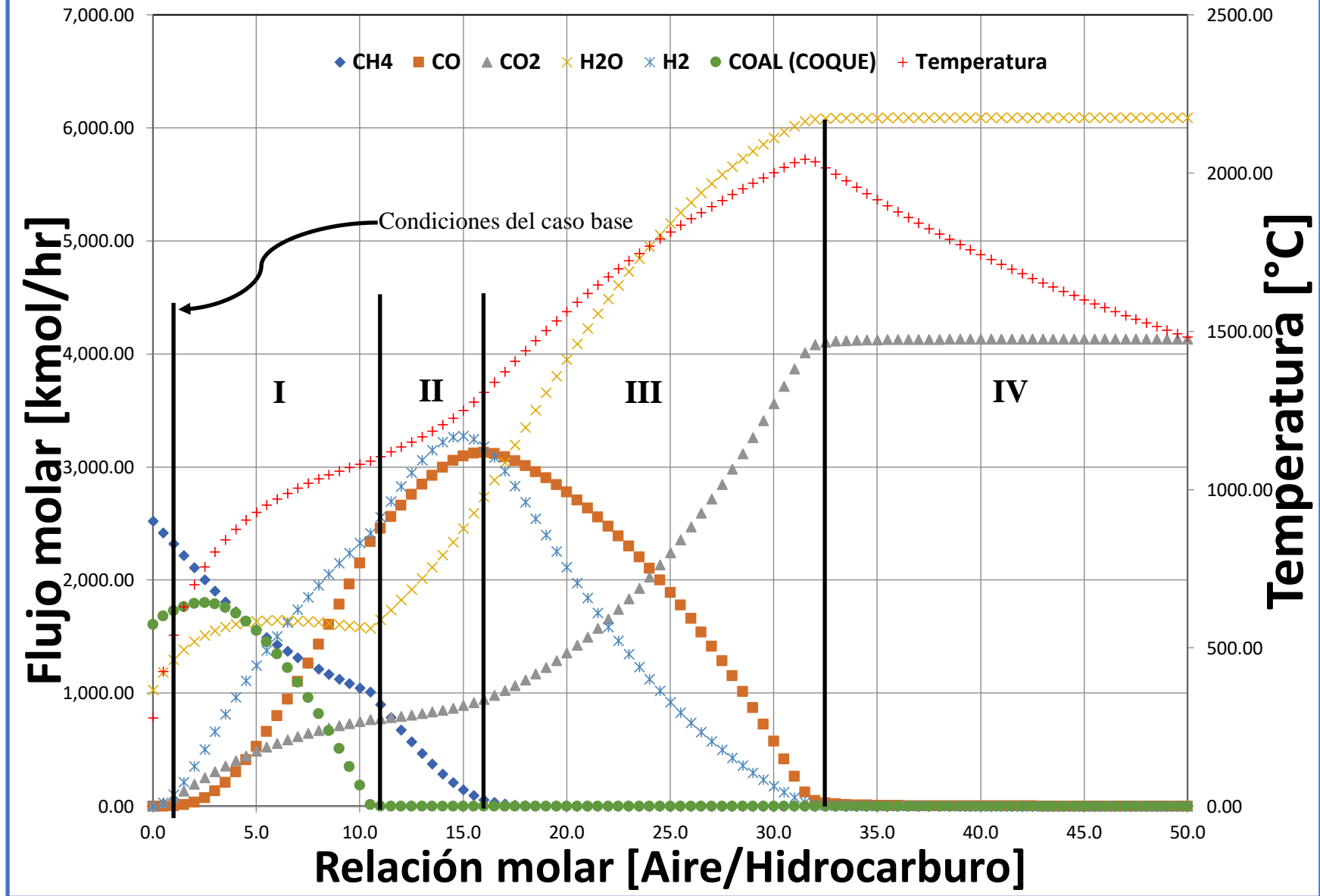


Gráfica 3.1.

En el siguiente caso presentado en la gráfica 3.2, se realiza el suministro de agua al reactor produciéndose dos fenómenos que a continuación serán descritos: el primero de ellos consiste en volver a suministrar aire al módulo R-100, pero esta vez acompañado por una corriente de agua la cual se encuentra a las condiciones de presión y temperatura señalados en el caso base, de manera similar se observa que el metano comienza a agotarse a una relación molar aire/hidrocarburo de 11 y es aquí en donde las reacciones de combustión del hidrocarburo compiten para convertirse en agua, CO y CO<sub>2</sub>. De manera similar, la gráfica se secciona en cuatro partes en donde se tiene muestra de lo que ocurre en cada una de ellas. En la región I que abarca el caso base, se muestra que el metano comienza su etapa de agotamiento hasta alcanzar un valor de 11 veces el suministro de aire y el coque presenta su punto máximo en el momento en que al reactor ingresa 2.5 veces la relación molar aire/hidrocarburo, teniendo un valor de 1800 kmol/hr. En la región II, nuevamente se tienen los picos de CO y H<sub>2</sub> en un rango de operación de entre 11.5 y 16 veces la alimentación de aire al reactor, teniendo valores aproximados de 3200 y 3300 kmol/hr respectivamente. La región III, señala el consumo por completo del combustible y la desaparición de CO y H<sub>2</sub> por efecto del incremento en los flujos de aire, provocando que a partir de una relación molar aire/hidrocarburo de 32.5 se inicie la región IV en donde se puede asumir que ha ocurrido una combustión completa, pues únicamente hay predominio de agua y CO<sub>2</sub> en el efluente del reactor.

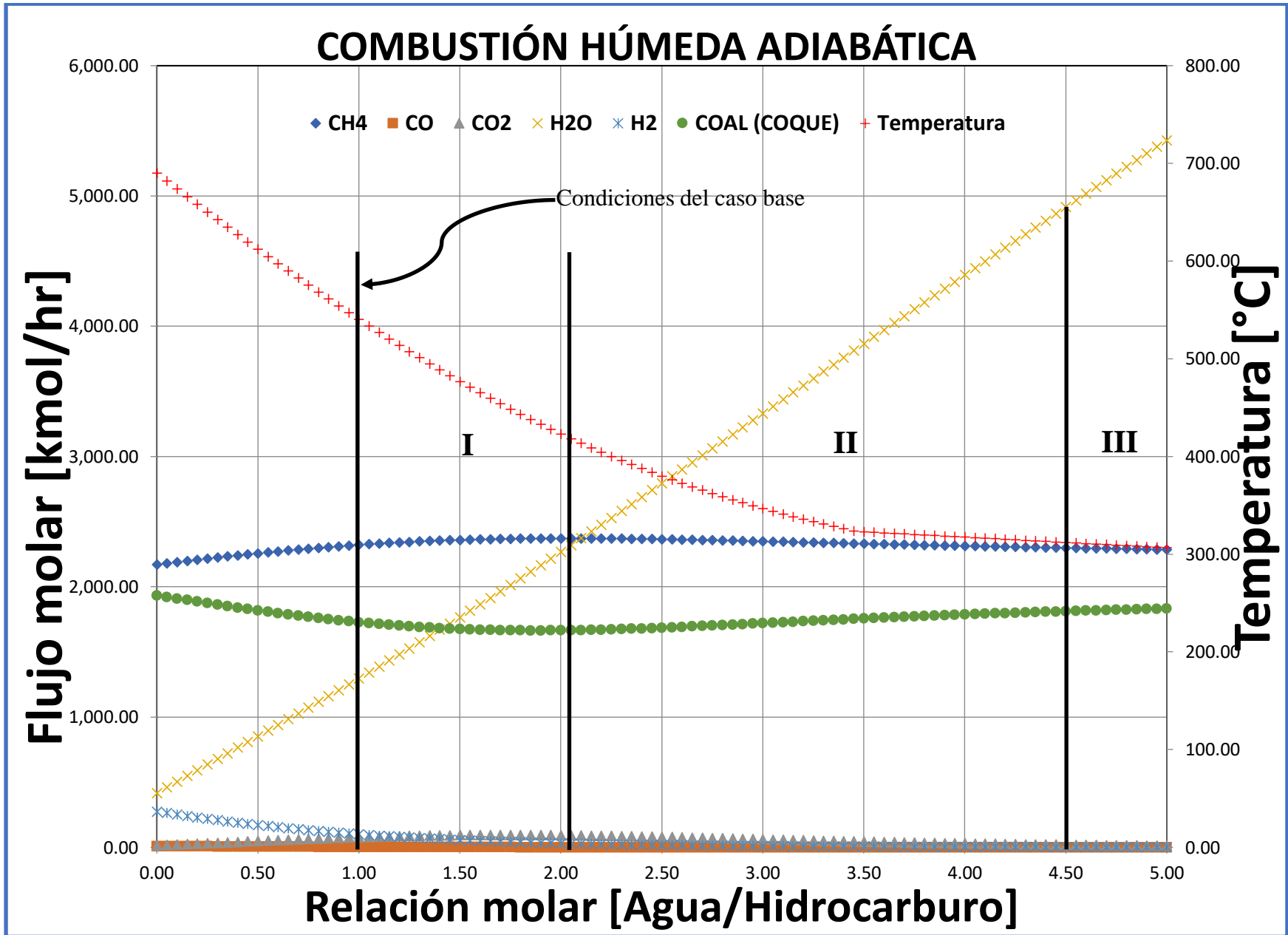
En el caso de la gráfica 3.3 el parámetro a variar fue el flujo de agua, a la entrada del reactor, sin embargo, el simulador no arroja resultados consistentes cuando se tienen flujos molares por arriba de los 5000 kmol/hr de agua, es decir, se alcanza una relación molar agua/hidrocarburo de 5 veces. El fenómeno importante que se puede observar es que el agua es la especie química predominante a lo largo de las tres regiones señaladas, siendo ésta a su vez la reguladora de la temperatura en el reactor a medida que se llega al límite establecido en el análisis, además se observa que tanto el metano como el coque, mantienen un flujo constante a la salida del reactor; el H<sub>2</sub>, CO y CO<sub>2</sub> aparecen como productos mayoritarios exclusivamente en la región I, es decir, en la zona de inicio de reacción.

# COMBUSTIÓN HÚMEDA ADIABÁTICA



Gráfica 3.2.



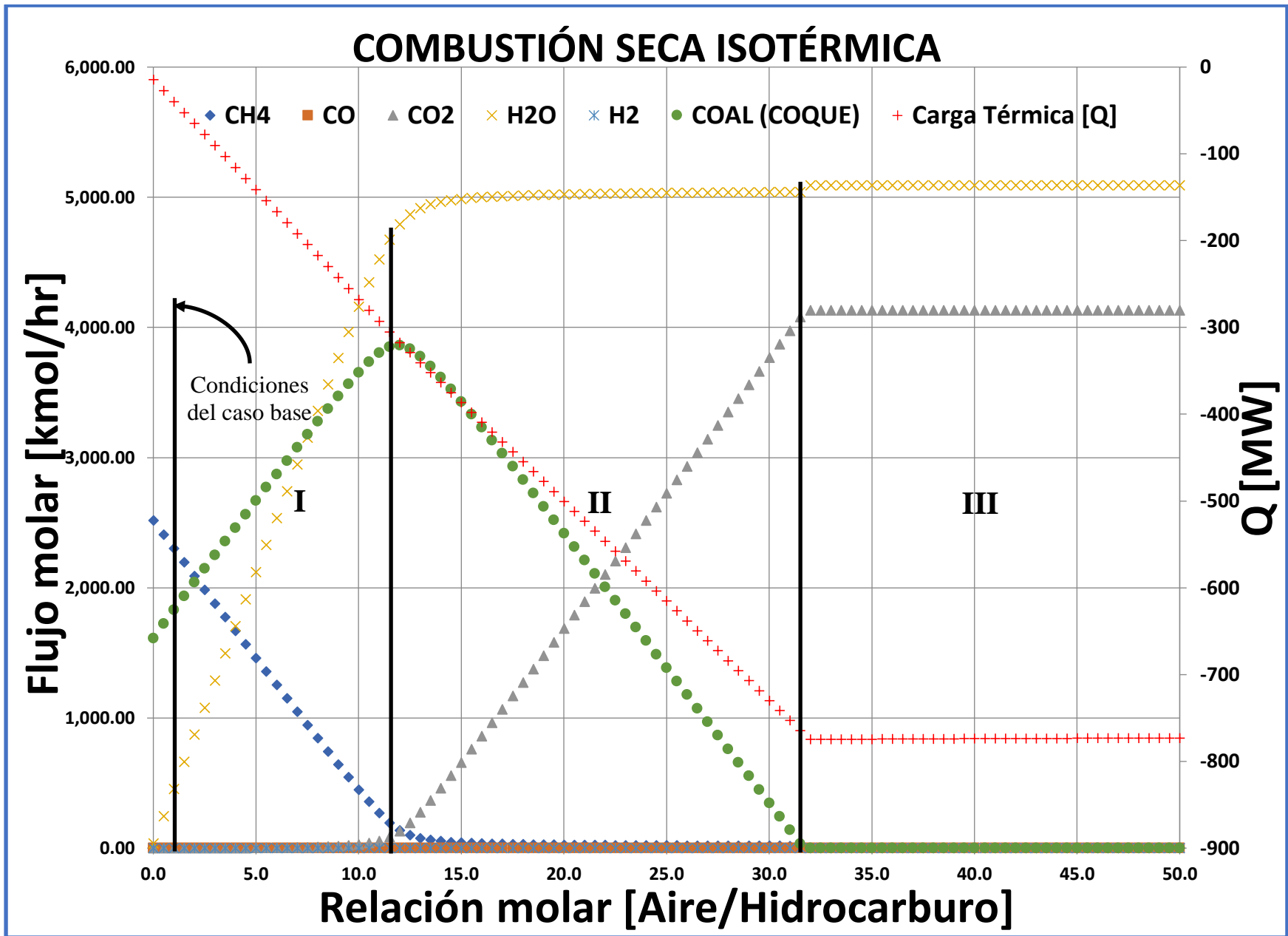


Gráfica 3.3.

Los análisis de sensibilidad para el caso isotérmico se realizaron con base en la temperatura a la que se encuentra el fluido dentro del yacimiento, es decir, a 420.15K (147°C).

El primer resultado mostrado en la gráfica 3.4 corresponde al análisis en el primer caso límite, es decir, asumiendo que el sistema se encuentra en un baño isotérmico a lo largo de la región I en donde se encuentra el caso base; lo que se puede apreciar es que a medida que avanza el suministro de aire al reactor, el comportamiento en la formación o desaparición de las especies es de forma lineal a diferencia de los casos anteriores en que se observan curvaturas en todas las gráficas. Un dato relevante corresponde a la región II, cuando se suministra al reactor 12 veces la relación molar aire/hidrocarburo, pues es en este punto en donde se tiene la mayor cantidad de coque formado, aproximadamente 3900 kmol/hr; de manera similar al caso adiabático, la combustión del metano compete por convertirse en agua y CO<sub>2</sub>, sin embargo, el agua es la especie química predominante al momento de alcanzar una relación molar de 15 en donde el flujo del efluente permanece invariable. En la región III el CO<sub>2</sub> y el agua mantienen un flujo de salida del reactor constante al suministrar 32 veces el flujo de aire al reactor, por lo que se puede concluir que es en este punto cuando se alcanza la combustión completa del hidrocarburo. El monóxido de carbono y el hidrógeno molecular no tienen un flujo de salida considerable, pues en estos casos la temperatura de operación permanece invariante.

En cuanto a la carga térmica en el reactor, ésta decrece de manera lineal a medida que se continúa suministrando aire al módulo R-100 hasta llegar a la región III, es decir, al tener 32 veces la relación molar aire/hidrocarburo, pues a partir de este punto la carga térmica permanece constante hasta alcanzar un valor aproximado de -774 MW, por lo que este valor representa que las reacciones dentro del reactor son exotérmicas.



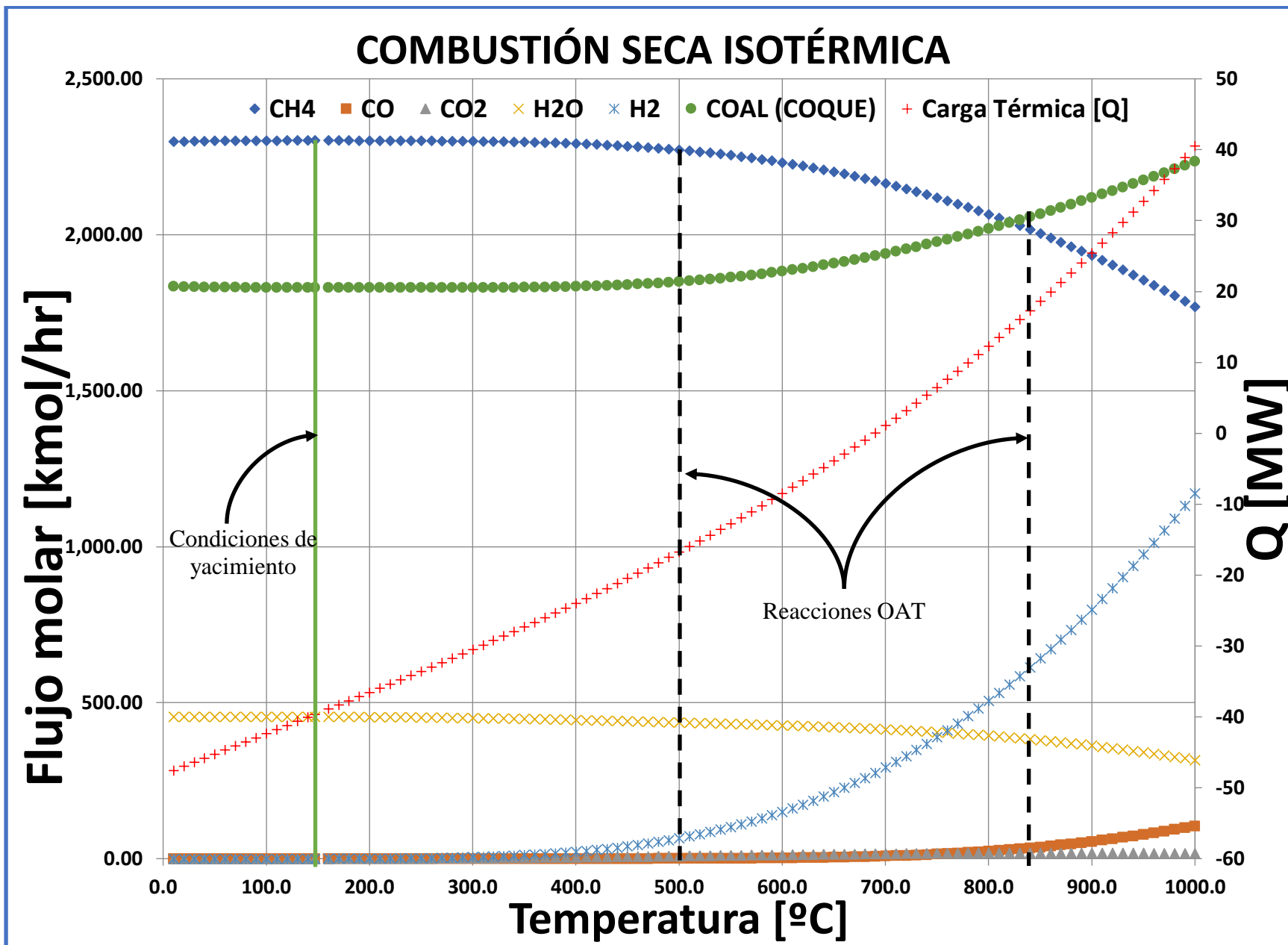
Gráfica 3.4.

En el siguiente caso, el parámetro a variar es la temperatura de operación del reactor desde 10°C hasta 1000°C, manteniendo los flujos de alimentación de aire e hidrocarburo constantes. En este rango de operación establecido, se encuentran las tres condiciones de operación descritas al inicio del presente capítulo.

Claramente se puede apreciar en la gráfica 3.5 que en un principio las bajas temperaturas no favorecen la combustión del hidrocarburo, además, el flujo de formación de coque permanece prácticamente constante con un valor aproximado de 1830 kmol/hr, contrario a los casos anteriores, en las reacciones a bajas temperaturas (OBT) no hay competencia por de formación entre el agua y el CO<sub>2</sub> por efecto de la combustión del hidrocarburo. El siguiente punto a destacar, es que los flujos de CO, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> del efluente del reactor no tienen una presencia considerable a las condiciones de reacciones OBT.

Al alcanzar la temperatura intermedia acotada entre la primer y tercer condición límite comienza a apreciarse ligeramente un cambio en las pendientes de metano, coque y agua, es decir, aproximadamente a los 314°C comienza la combustión del metano y la tendencia indica que el coque se ve favorecido en su formación a medida que la temperatura en el reactor continúa aumentando; en la segunda temperatura correspondiente a T<sub>2</sub>= 500°C (773.15 K) en las que ocurren las reacciones de oxidación en altas temperaturas (OAT), se observa que el H<sub>2</sub> comienza a tener una presencia considerable a la salida del reactor. Una tercera temperatura T<sub>3</sub>= 850°C (1123.15K) fue señalada con el objetivo de dar muestra que es en estos puntos en donde el metano comienza la etapa de combustión y el coque empieza a aumentar hasta un valor aproximado de 2100 kmol/hr en el efluente.

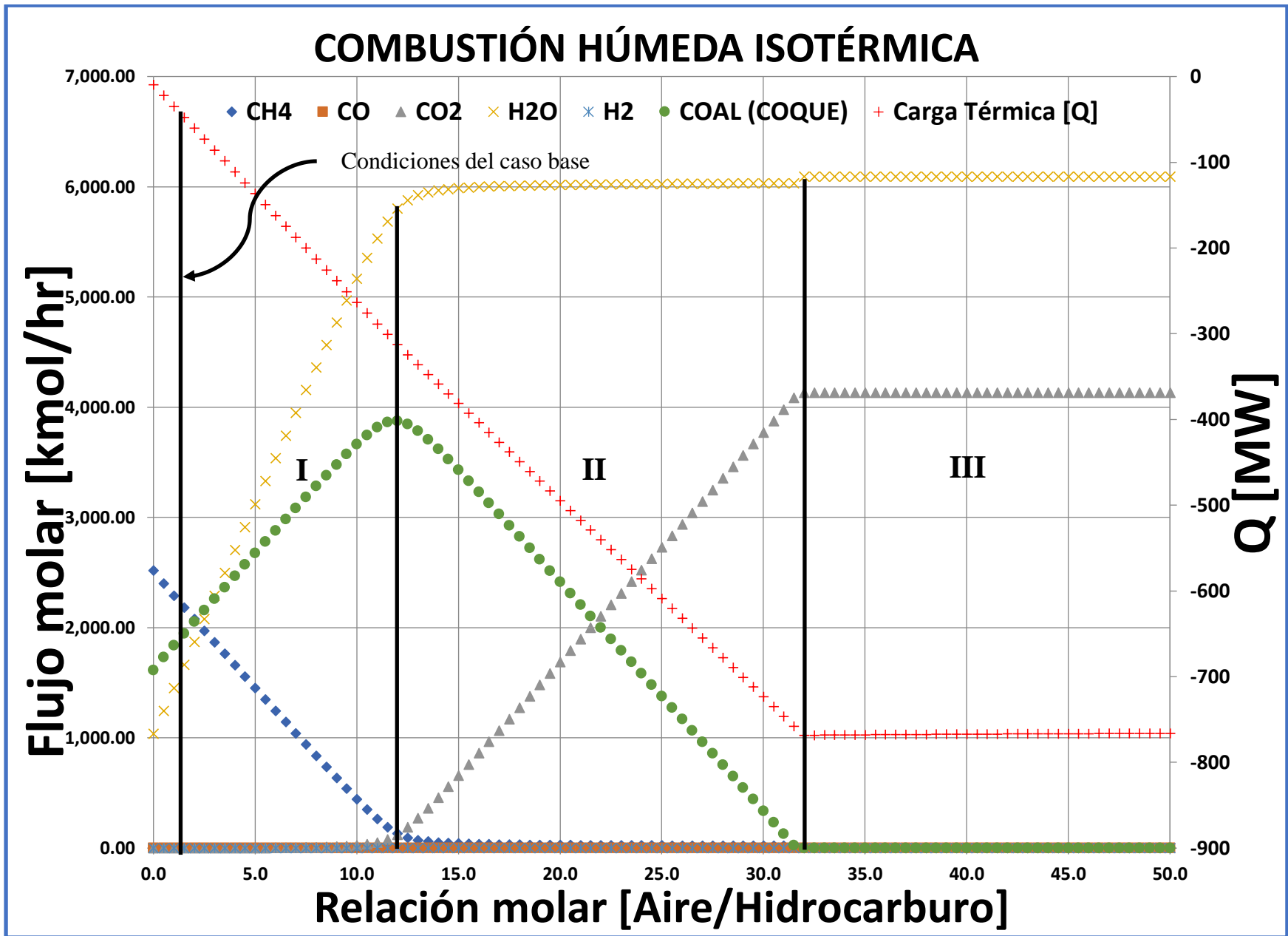
De la misma manera, la gráfica muestra que la carga térmica del reactor aumenta ocasionando que la transferencia de energía comience a disminuir, sobre todo si se toma en cuenta que el yacimiento en su mayoría es un medio rocoso, además de que las reacciones de oxidación comienzan a ser endotérmicas por encima de los 680°C.



Gráfica 3.5.

En el caso de la combustión húmeda isotérmica la linealidad de las curvas mostradas en la gráfica 3.6 permanece similar que en la gráfica 3.4. Además, se observa nuevamente que en la región I, el incremento en la relación molar de aire/hidrocarburo comienza a producir un cambio en las especies químicas predominantes para el análisis. El primero de estos cambios corresponde a la producción de coque, pues a una relación molar de 12 se alcanza el máximo en la formación de coque con una cantidad cercana a los 3900 kmol/hr. De igual forma el agotamiento del metano restante en la región II comienza a ser notorio, pues la conversión del mismo nuevamente comienza a ser competitivo entre el agua y el CO<sub>2</sub>, sin embargo, el agua comienza a ser la especie química predominante pues a medida que se sigue suministrando aire al reactor se alcanza un flujo del efluente superior a los 6000 kmol/hr, Por otro lado, el CO<sub>2</sub> formado en el reactor en la región III, consigue un valor cercano a los 4200 kmol/hr a la salida del reactor; nuevamente a las condiciones evaluadas, el monóxido de carbono y el H<sub>2</sub> no tienen una presencia considerable en el efluente del reactor.

En cuanto a la carga térmica del módulo R-100, ésta presenta una pendiente negativa a medida que aumenta el flujo de alimentación de aire al reactor. Queda en evidencia que la carga térmica mantiene una tendencia a la baja desde el punto de inicio de la prueba hasta alcanzar las 32 veces la relación molar aire/hidrocarburo, pero posterior a este punto, se observa que la carga térmica del reactor comienza a presentar un comportamiento constante logrando alcanzando un valor cercano a los -770 MW por lo que de nueva cuenta las reacciones en presencia mayoritaria de aire son altamente exotérmicas.

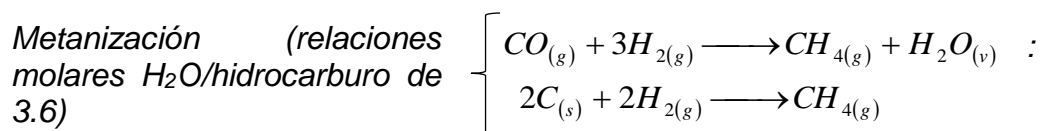
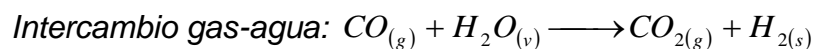
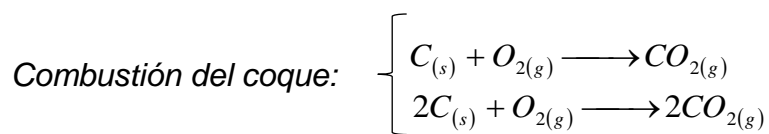


Gráfica 3.6.

La variación del flujo de agua a la entrada del reactor es un parámetro importante al simular el proceso de combustión in situ húmeda, pues como se muestra en la gráfica 3.7 un aumento en el flujo de agua suministrada no causa mayor impacto en el comportamiento del reactor en cuanto a la disposición de llevar a cabo la serie de reacciones químicas, sin embargo, por arriba de una proporción de 5 el reactor requiere de una carga térmica que ingrese al sistema de reacción para poder sostener la reacción. Esto en el seno del yacimiento es imposible, porque no hay una fuente térmica disponibles. Por lo que la proporción de 5 es una condición límite hasta donde podría sostenerse la operación de la reacción.

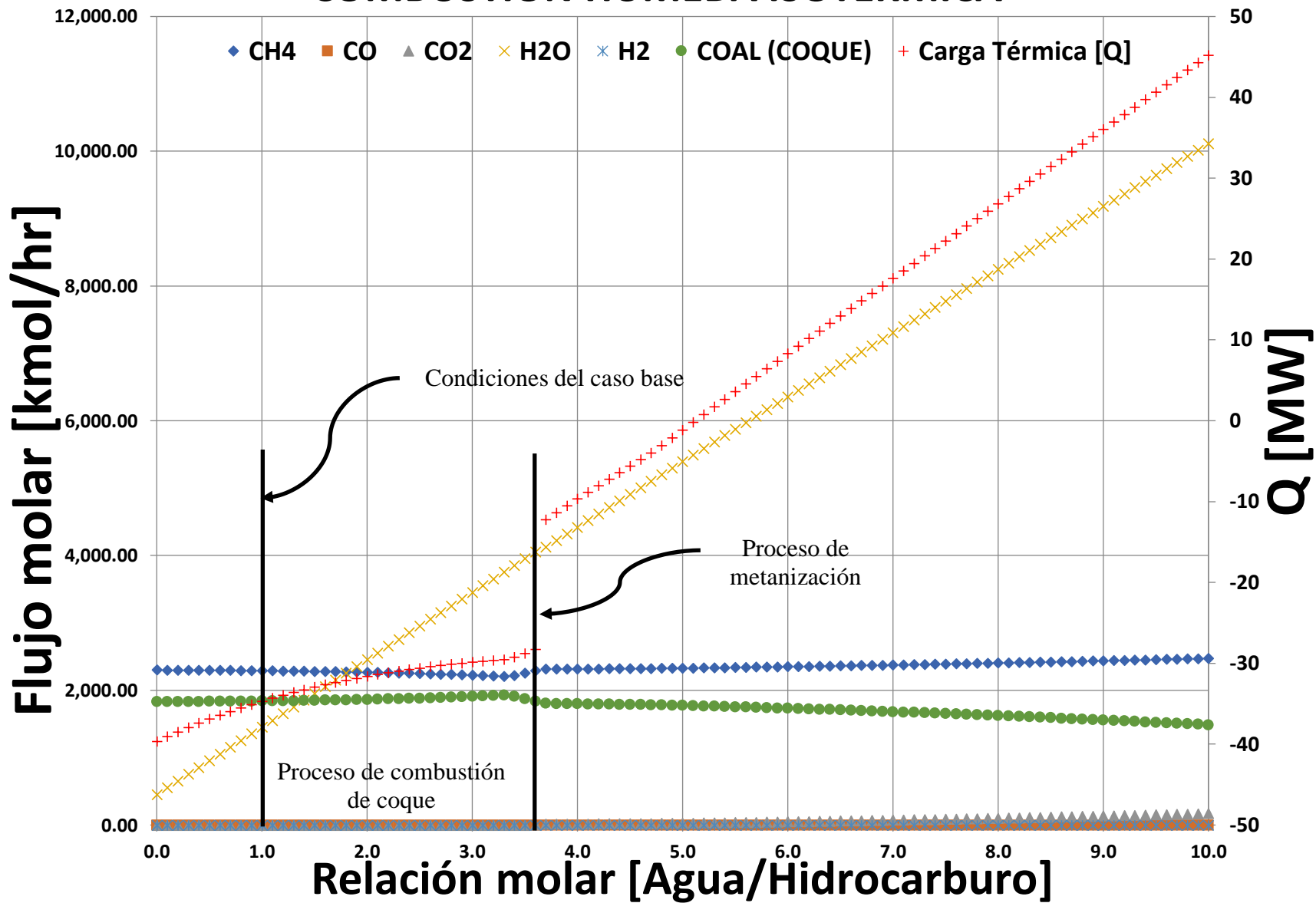
A diferencia de los casos anteriores, la producción de metano y de coque prácticamente permanece constante y la influencia de la presencia del agua es irrelevante hasta cierto punto como fue explicado en el párrafo anterior, en donde puede apagar la reacción química.

En cuanto a la carga térmica del reactor, hay un punto de quiebre al alcanzar un valor de 3.6 veces el flujo de agua suministrada, posteriormente hay un salto en el cual la tendencia en el comportamiento comienza a ser lineal y actúa de forma paralela con respecto al flujo de agua en el efluente del reactor. Teóricamente, este brinco puede ocurrir porque inicia un proceso de gasificación de coque en tres pasos:





# COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA

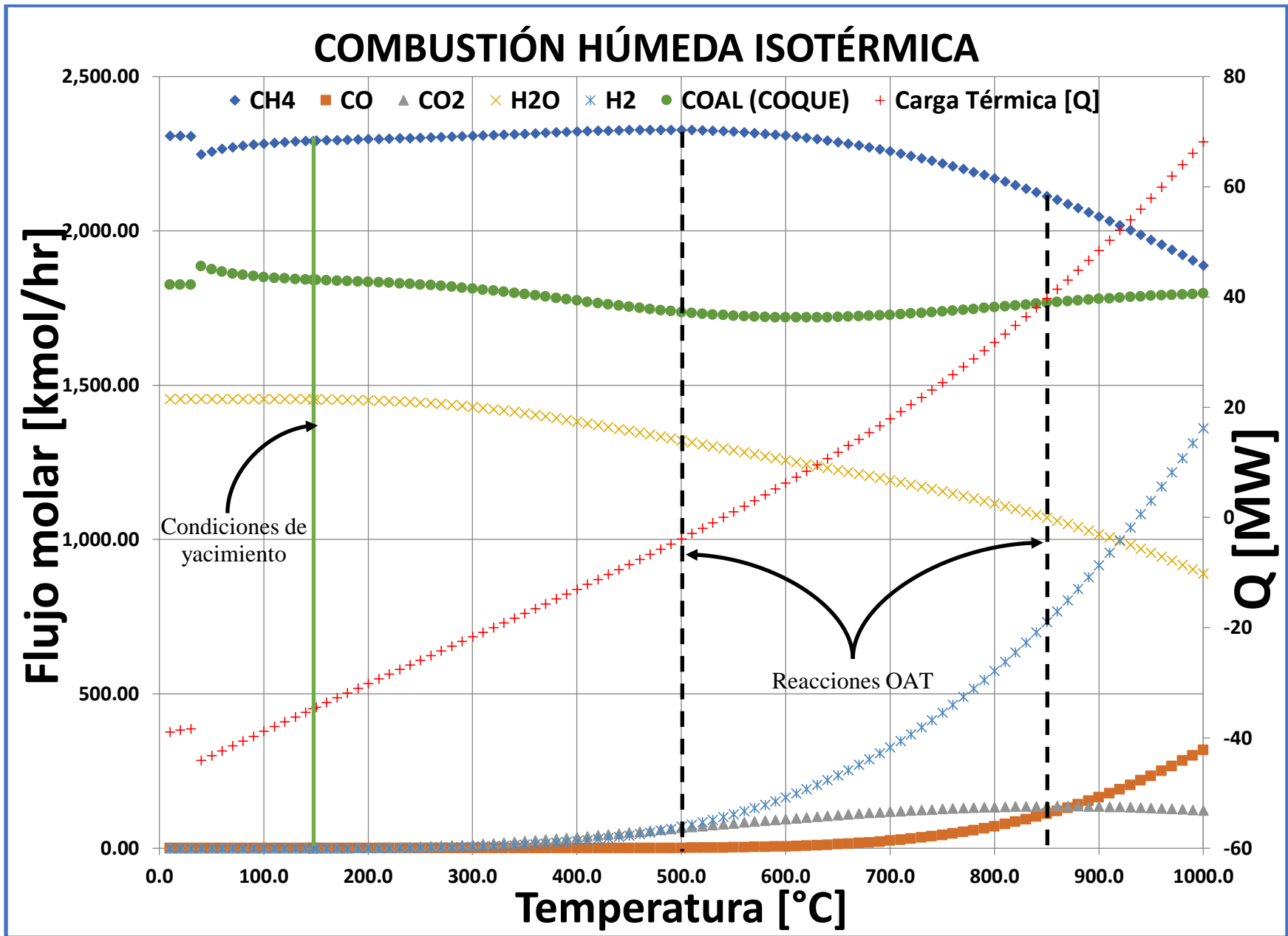


Gráfica 3.7.

Por último, en la gráfica 3.8 se muestra como variable manipulada a la temperatura del reactor en la cual se puede observar que la temperatura no afecta la primera región de la gráfica, es decir, las reacciones que se llevan a cabo corresponden a las reacciones de oxidación a baja temperatura (OAT), incluso si se sitúa en el punto correspondiente a las condiciones de yacimiento ( $T_1= 147^\circ\text{C}$ ). En el momento en que se alcanza la temperatura correspondiente a las reacciones de oxidación a altas temperaturas (OAT),  $T_2= 500^\circ\text{C}$ , el metano alcanza un tope de 2341.76 kmol/hr. Sin embargo, el coque comienza una etapa de disminución a medida que la temperatura del reactor va en aumento, pero el valor mínimo del flujo de coque en el efluente alcanza un valor aproximado de 1720 kmol/hr con una temperatura de  $620^\circ\text{C}$ , es también en este punto en donde el metano comienza nuevamente a disminuir el valor numérico del flujo en el efluente y por ende el coque es la especie química que se encuentra en el equilibrio debido a la combustión del hidrocarburo.

Otro punto importante a destacar es que el agua comienza a disminuir pues es aquí donde inicia la competencia por convertirse a metano, monóxido de carbono e hidrógeno molecular, aunque de éstos la conversión preponderante se da entre el  $\text{CH}_4$  y el  $\text{H}_2$ .

En contraste, si se observa la carga térmica, ésta presenta prácticamente un comportamiento cuadrático, obedeciendo a la formación de una media parábola, a medida que la temperatura de operación del reactor sigue en aumento, incluso atravesando por la temperatura correspondiente al primer caso límite, es decir, cuando el reactor alcanza las condiciones adiabáticas de operación ( $Q=0$  kW), por lo que posterior a ese punto las reacciones de oxidación tienden a volverse endotérmicas.



Gráfica 3.8.

### 3.4. Planteamiento de pseudoreacciones químicas

Una vez que los análisis de sensibilidad han arrojado los resultados necesarios se plantean las pseudoreacciones que pueden ser obtenidas a partir de la división de los segmentos presentados en las gráficas de los análisis de sensibilidad. El desarrollo se establece a partir del balance de materia con reacción química mostrado en la ecuación 3.2. Nuevamente, el planteamiento se realiza con base a lo descrito en los apartados 2.3, 2.4 y 2.5 correspondientes al capítulo 2. Considerando la ecuación general del balance de materia:

$$\{Entrada\} + \{Generación\} - \{Salida\} - \{Consumo\} = \{Acumulación\} \quad (3.2)$$

Todos los balances de materia se plantean en base molar y en estado estacionario, la ecuación se escribe de la siguiente manera para cada especie química:

$$\{Salida\} = \{Entrada\} + \{Generación\} - \{Consumo\} \quad (3.3)$$

El término de generación es para las especies químicas que se producen y es igual a:

$$\{Generación\} = v\xi \quad (3.4)$$

El término de consumo ( $\xi$ ) corresponde a las sustancias que funcionan como reactivos y se calcula con la siguiente ecuación:

$$\{Consumo\} = v\xi \quad (3.5)$$

Debido a la convención de signos que se está usando, el coeficiente estequiométrico ( $v$ ) es positivo en ambos casos. Además, se indicarán las coordenadas de relación molar (aire o agua) y temperatura a las que se plantean las pseudoreacciones. El desarrollo del cálculo de los coeficientes estequiométricos se muestra en el anexo IX.

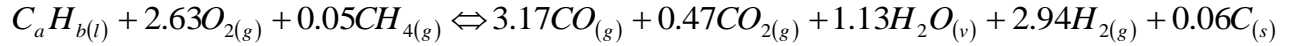
### 3.4.1. Combustión seca

- Caso adiabático (gráfica 3.1)

Región I: caso base (1.0, 690.27°C)



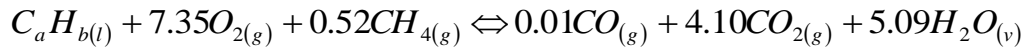
Región II: (11.5, 1220.67°C)



Región III: (15.5, 1364.24°C)

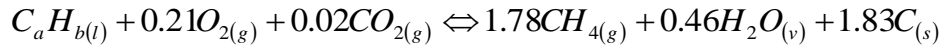


Región IV: (35.0, 1990.45°C)

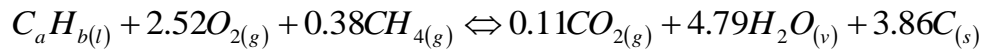


- Caso isotérmico (gráficas 3.4 y 3.5)

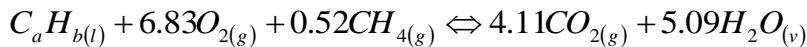
Región I: caso base, reacciones OBT (1.0, 147°C)



Región II: (12.0, 147°C)



Región III: (32.5, 147°C)



Reacciones OAT (T<sub>1</sub>= 500°C):



Reacciones OAT (T<sub>2</sub>= 850°C):

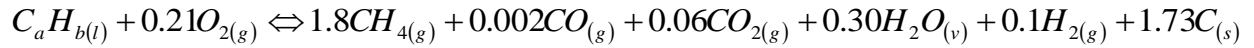


### 3.4.2. Combustión húmeda

- Caso adiabático (gráficas 3.2 y 3.3)

*Variación del flujo de aire de entrada al reactor*

Región I: caso base (1.0, 540.58°C)



Región II: (11.0, 1105.35°C)



Región III: (16.0, 1307.47°C)

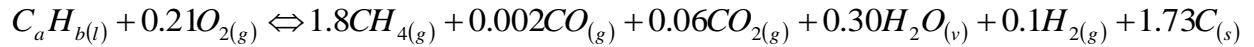


Región IV: (32.5, 2017.72°C):



*Variación del flujo de agua de entrada al reactor*

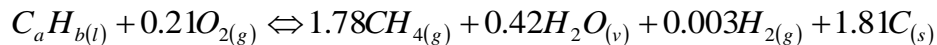
Región I: caso base (1.00, 540.58°C)



Región II: (2.05, 418.35°C)



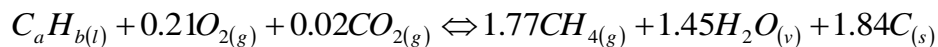
Región III: (4.50, 312.17°C)



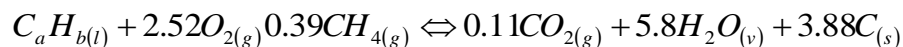
- Caso isotérmico (gráficas 3.6, 3.7 y 3.8)

*Variación del flujo de aire de entrada al reactor*

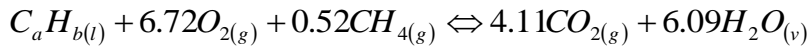
Región I: caso base, reacciones OBT (1.0, 147°C)



Región II: (12.0, 147°C)

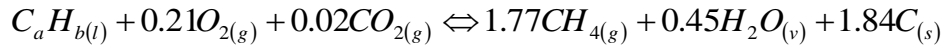


Región III: (32.0, 147°C)

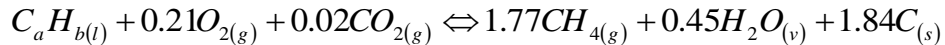


Variación del flujo de agua de entrada al reactor

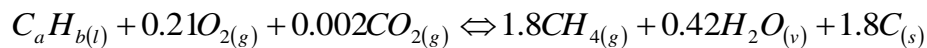
Caso base: reacciones OBT (1.0, 147°C)



Reacciones de combustión de coque: (3.6, 147°C)



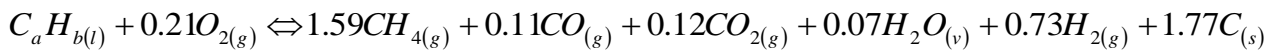
Proceso de metanización: (4.0, 147°C)



Reacciones OAT (T<sub>1</sub>= 500°C):



Reacciones OAT (T<sub>2</sub>= 850°C):



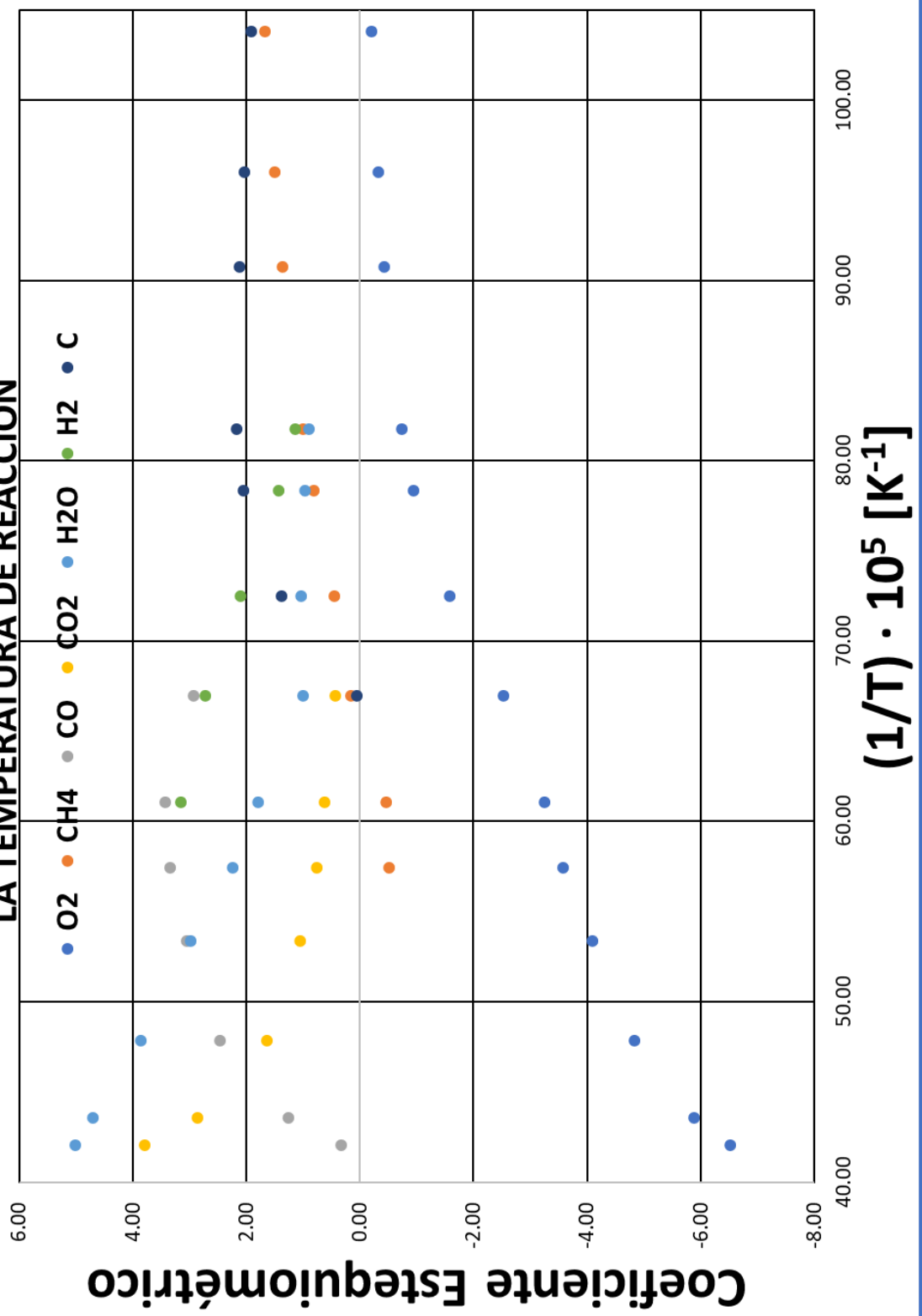
De lo anterior se concluye que la estequiometría de los componentes se encuentra en función de la temperatura a la que se evalúe la reacción tal y como se muestra en la tabla 3.8.

Tabla 3.8. Dependencia de los coeficientes estequiométricos con la temperatura.								
T [K]	1/Tx10 <sup>5</sup> [K <sup>-1</sup> ]	O <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	C
963.42	103.80	-0.21	1.669	0.007	-0.003	0.417	0.278	1.917
1041.57	96.01	-0.32	1.508	0.026	0.018	0.565	0.452	2.037
1102.11	90.73	-0.42	1.360	0.063	0.045	0.683	0.633	2.122
1223.23	81.75	-0.74	1.000	0.290	0.137	0.900	1.139	2.165
1276.30	78.35	-0.95	0.820	0.519	0.195	0.973	1.429	2.058
1379.64	72.48	-1.58	0.450	1.436	0.330	1.039	2.107	1.376
1493.82	66.94	-2.52	0.163	2.930	0.440	0.997	2.725	0.060
1637.39	61.07	-3.26	-0.457	3.423	0.629	1.798	3.145	0.000
1741.05	57.44	-3.57	-0.509	3.342	0.761	2.241	2.790	0.000
1873.83	53.37	-4.10	-0.520	3.056	1.058	2.979	2.070	0.000
2091.77	47.81	-4.83	-0.520	2.472	1.643	3.855	1.198	0.000
2296.62	43.54	-5.88	-0.520	1.256	2.859	4.705	0.367	0.000
2378.90	42.04	-6.51	-0.520	0.330	3.785	5.014	0.066	0.000

$$\begin{aligned}
O_2(T) &= -3 \times 10^{-6} \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 - 0.001 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 + 0.2959 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) - 16.735 & 960K \leq T \leq 2400K \\
CH_4(T) &= -6 \times 10^{-6} \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 - 0.0007 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 + 0.0553 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) - 4.9913 & 960K \leq T \leq 1800K \\
CO(T) &= -0.0003 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 - 0.0541 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 + 3.567 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) - 73.78 & 1500K \leq T \leq 2400K \\
CO_2(T) &= -0.0005 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 + 0.087 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 - 5.2176 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) + 105.31 & 1500K \leq T \leq 2400K \\
H_2O(T) &= -4 \times 10^{-5} \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 - 0.0101 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 + 0.9094 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) + 28.315 & 1200K \leq T \leq 2400K \\
H_2(T) &= 3 \times 10^{-5} \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 - 0.005 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 + 0.2209 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) + 2.5352 & 1200K \leq T \leq 1700K \\
C(T) &= 0.0002 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^3 - 0.0448 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right)^2 + 4.1433 \left( \frac{1}{T} \times 10^5 \right) - 124.62 & 960K \leq T \leq 1500K
\end{aligned}$$



**DEPENDENCIA DE LOS COEFICIENTES ESTEQUIOMÉTRICOS CON LA TEMPERATURA DE REACCIÓN**



Gráfica 3.9.

### 3.5. Cálculo de las constantes de equilibrio

Una vez que fueron establecidas las reacciones químicas presentes al equilibrio, es indispensable determinar la constante de equilibrio cuya función es saber si el desplazamiento en la reacción se da hacia los reactivos o los productos, de acuerdo a las condiciones de operación del reactor. Smith [13] define a la constante de equilibrio de acuerdo a las ecuaciones (3.6a) y (3.6b):

$$K = \exp\left[\frac{-\Delta G^\circ}{RT}\right] \quad (3.6a) \quad \ln K = \frac{-\Delta G^\circ}{RT} \quad (3.6b)$$

También por definición:  $\Delta G^\circ = \sum_i \nu_i G_i^0$  (3.7)

De la misma manera, Smith señala que  $G_i^0$  es una propiedad de la especie pura  $i$  en su estado estándar a presión fija y depende solo de la temperatura. A través de la ecuación (3.7) se obtiene que  $\Delta G(T, P^\circ)$  y por lo tanto  $K$  también son funciones exclusivas de la temperatura. A partir de su dependencia con la temperatura, se conoce a  $K(T)$  como la constante de equilibrio para la reacción para la temperatura  $T$ ; en consecuencia,  $\Delta G(T, P^\circ) = \sum_i \nu_i G_i(T, P^\circ)$ ,  $\Delta G(T, P^\circ)$  se le llama *cambio de la energía de Gibbs de la reacción a la temperatura  $T$* .

Las funciones  $\Delta G^\circ = \sum_i \nu_i G_i^0$  y  $\Delta G(T, P^\circ) = \sum_i \nu_i G_i(T, P^\circ)$  en la ecuación (3.7) son la diferencia entre la energía de Gibbs de los productos y los reactivos (ponderados por sus coeficientes estequiométricos) cuando  $\Delta G^\circ$ , cada uno de los compuestos que participa en la reacción se halla en su estado estándar como una sustancia pura en su estado de agregación más estable y presión estándar. Para el caso de  $\Delta G(T, P^\circ)$  la diferencia se calcula a la temperatura del sistema en la fase en la que se lleva a cabo la reacción química; de esta manera, el valor de  $\Delta G^\circ$  se determina para cada una de las reacciones independientes una vez que se establece las temperaturas de operación del reactor, y es independiente de la presión.

Para calcular las constantes de equilibrio es necesario conocer los valores de  $\Delta G(T, P^\circ)$  a las condiciones de reacción, dichos valores son calculados por el propio

simulador. La limitante en este procedimiento es que se aplica en el caso adiabático puesto que la variable a observar en cada uno de los análisis de sensibilidad es la temperatura máxima que alcanza el reactor, a diferencia del caso isotérmico. Para ejemplificar esto, en las tablas 3.9a, 3.9b, 3.9c y 3.9d se muestran los resultados de la obtención de las constantes de equilibrio ( $K_{eq}$ ) de la combustión seca adiabática en función de la temperatura, evaluada en las diferentes regiones de la gráfica 3.1. Sin embargo, se debe considerar un factor que no se debe pasar inadvertido, y ese es la presencia de  $O_2$  en el aire, ya que existe influencia directa de éste sobre la temperatura de reacción. Por omisión se descarta el hidrocarburo de la forma  $C_aH_b$ , pues la presencia del mismo hace que su  $\Delta G^\circ$  presente valores altos, en consecuencia, la  $K_{eq}$  presenta valores numéricos altos.

Tabla 3.9a. Región I.		
Componente	$\nu$	$\Delta G$ [kJ/mol]
$O_2$	-0.21	-14.34
$CH_4$	1.65	-17.89
$CO$	0.01	-210.41
$CO_2$	0.00	-416.45
$H_2O$	0.42	-215.34
$H_2$	0.28	-13.58
$C$	1.93	-6.66
$\Delta G_{Total}$		<b>-139.41</b>
<b>T [K]</b>		963.42
<b><math>\ln(K_{eq})</math></b>		17.42
<b><math>K_{eq}</math></b>		3.663E+07

Tabla 3.9b. Región II.		
Componente	$\nu$	$\Delta G$ [kJ/mol]
$O_2$	-2.63	-38.44
$CH_4$	-0.05	-16.11
$CO$	3.17	-280.90
$CO_2$	0.47	-453.30
$H_2O$	1.13	-219.59
$H_2$	2.94	-35.66
$C$	0.00	-21.87
$\Delta G_{Total}$		<b>-1431.77</b>
<b>T [K]</b>		1493.82
<b><math>\ln(K_{eq})</math></b>		115.60
<b><math>K_{eq}</math></b>		1.608E+50

Componente	v	$\Delta G$ [kJ/mol]
O <sub>2</sub>	-3.26	-46.26
CH <sub>4</sub>	-0.47	-18.66
CO	3.42	-301.22
CO <sub>2</sub>	0.64	-465.33
H <sub>2</sub> O	1.81	-222.37
H <sub>2</sub>	3.12	-42.77
C	0.00	-27.52
$\Delta G_{\text{Total}}$		<b>-1704.49</b>
T [K]		1637.39
$\ln(K_{\text{eq}})$		125.21
$K_{\text{eq}}$		2.385E+54

Componente	v	$\Delta G$ [kJ/mol]
O <sub>2</sub>	-7.35	-85.37
CH <sub>4</sub>	-0.52	-42.54
CO	0.01	-394.70
CO <sub>2</sub>	4.10	-525.92
H <sub>2</sub> O	5.09	-241.20
H <sub>2</sub>	0.00	-78.27
C	0.00	-59.90
$\Delta G_{\text{Total}}$		<b>-2740.73</b>
T [K]		2263.60
$\ln(K_{\text{eq}})$		145.63
$K_{\text{eq}}$		1.767E+63

A manera de resumen, los resultados obtenidos de las constantes de equilibrio con su respectivo  $\Delta G^\circ$  se presentan en las tablas 3.10 y 3.11 evaluados en los casos de combustión seca y húmeda, respectivamente.

Región	T [K]	1/T $10^4$ [K <sup>-1</sup> ]	$\ln(K_{\text{eq}})$	$\Delta G^\circ_{\text{Total}}$ [kJ/mol]	Gráfica
Reacción OBT	420.15	23.80	48.31	-168.76	3.5
Reacción OAT	773.15	12.93	21.28	-136.76	
I	963.42	10.38	17.42	-139.50	3.1
II	1493.82	6.69	115.60	-1435.76	
III	1637.39	6.11	146.95	-2000.53	
IV	2370.83	4.22	212.30	-4184.75	

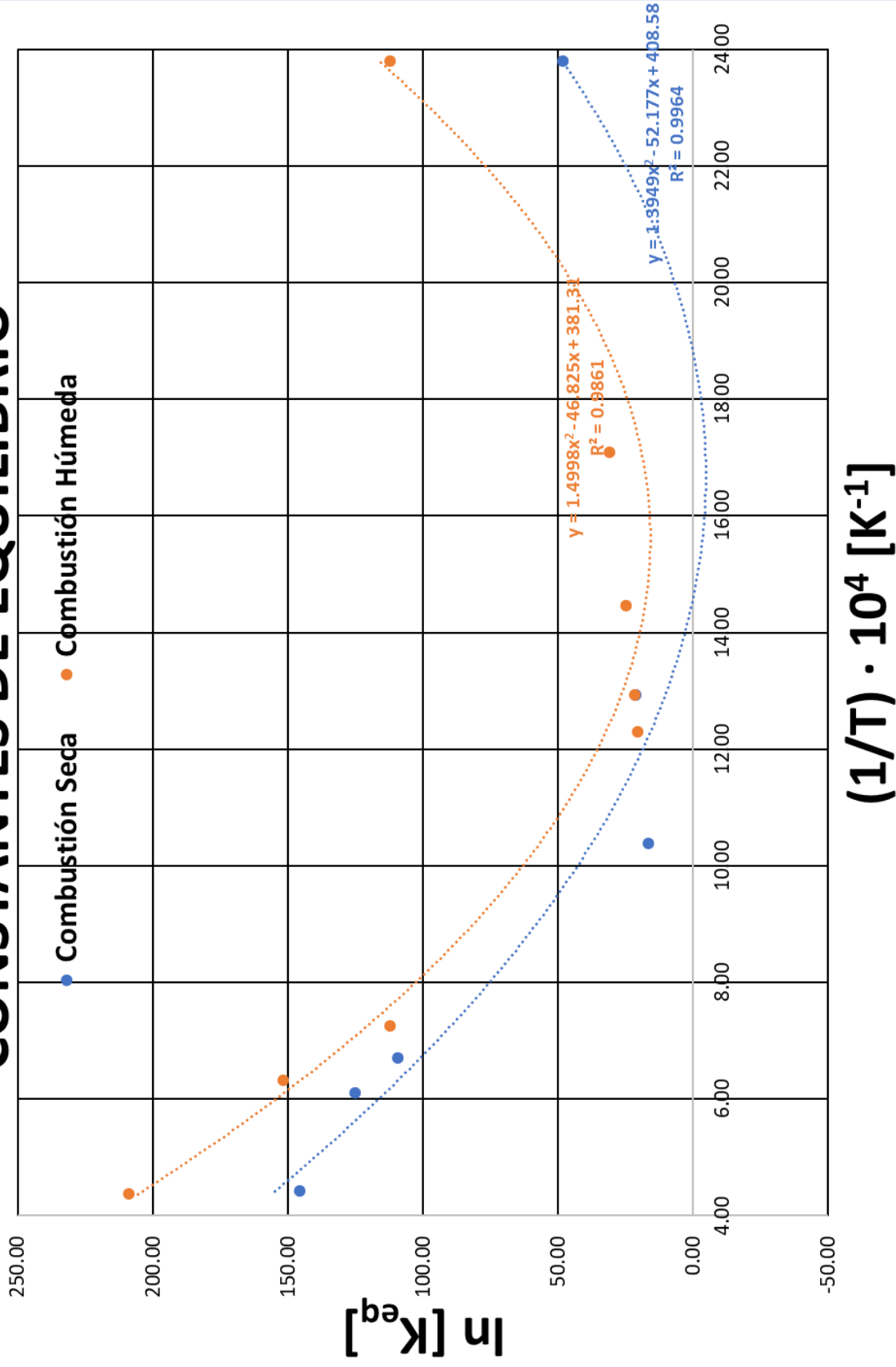
Región	T [K]	1/T $\cdot 10^4$ [K <sup>-1</sup> ]	$\ln(K_{\text{eq}})$	$\Delta G^\circ_{\text{Total}}$ [kJ/mol]	Gráfica
Reacción OBT	420.15	23.80	112.36	-392.49	3.8
Reacción OAT	773.15	12.93	21.80	-140.14	
III	585.32	17.08	31.09	-151.29	3.3
II	691.50	14.46	24.96	-143.48	
I	813.73	12.29	20.48	-138.58	3.2/3.3
II	1378.50	7.25	112.27	-1286.65	3.2
III	1580.62	6.33	151.59	-1992.06	
IV	2290.87	4.37	208.81	-3977.10	

Por último, en la gráfica 3.9 se grafican los valores del  $\ln(K_{eq})$  vs.  $1/T \cdot 10^4$ , arrojando como resultado que las constantes de equilibrio obedecen un comportamiento acorde a una ecuación de segundo grado y cuyas expresiones son las siguientes:

**Combustión Seca:**  $\ln(K) = 1.3949 \left( \frac{1}{T} \times 10^4 \right)^2 - 52.177 \left( \frac{1}{T} \times 10^4 \right) + 408.58$  (3.8)

**Combustión Húmeda:**  $\ln(K) = 1.4998 \left( \frac{1}{T} \times 10^4 \right)^2 - 46.825 \left( \frac{1}{T} \times 10^4 \right) + 381.31$  (3.9)

# CONSTANTES DE EQUILIBRIO

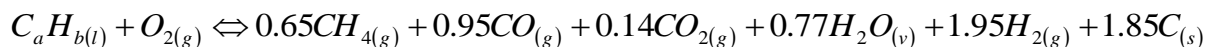


Gráfica 3.10.

### 3.6. Efecto del O<sub>2</sub> en las reacciones de combustión

Un análisis interesante resulta el saber qué pasaría si al yacimiento se le suministra O<sub>2</sub> puro para efectuar el proceso de combustión in situ. A continuación, se presentan las gráficas correspondientes a los análisis de sensibilidad asumiendo una composición molar del 100% de O<sub>2</sub>.

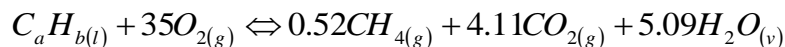
En la gráfica 3.10 se observa que el inicio de la reacción mostrada en la región I se verifica que a medida en que aumenta la relación molar del O<sub>2</sub> que es suministrado al reactor produciéndose el consumo del constituyente principal del aceite volátil (metano), convirtiéndose en su mayoría en H<sub>2</sub> y en coque. La reacción química que ocurre en este punto corresponde a la coordenada (1.0, 1193.31°C) de la misma gráfica, y se muestra a continuación:

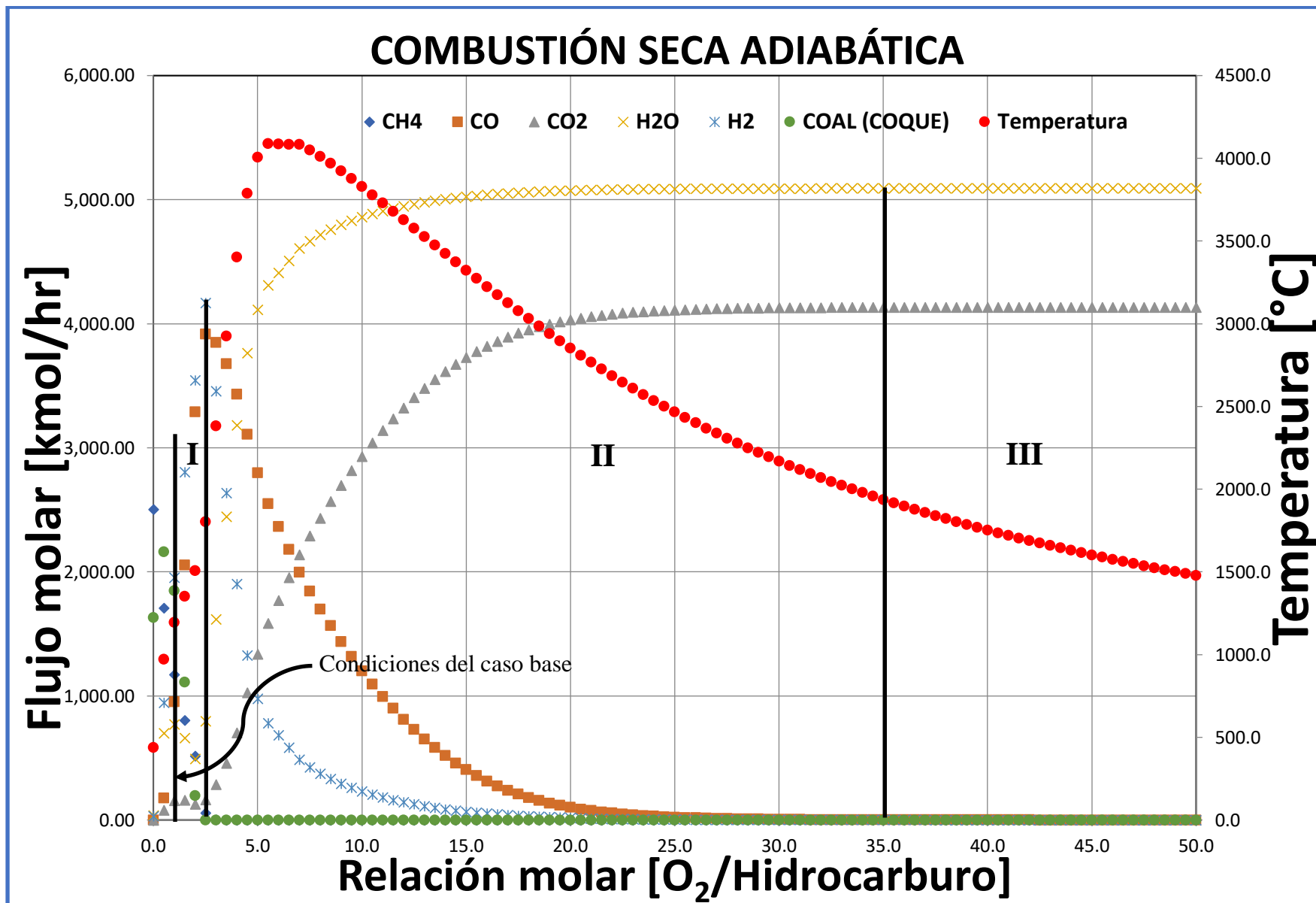


En la región II de la misma gráfica, la tendencia que se marca es que en este punto (2.5, 1801.64°C) se alcanza el valor máximo de H<sub>2</sub> en el efluente del reactor con un valor cercano a los 4200 kmol/hr, además de que el CO<sub>2</sub> comienza a tener una mayor presencia con un flujo aproximado de 3900 kmol/hr ocurriendo la siguiente reacción al equilibrio:



Por último, en la región III se observa que ocurren reacciones de combustión completa puesto que los únicos productos presentes en el efluente del reactor son el CO<sub>2</sub> y el agua, la coordenada en donde se observa esto es en el punto (35.0, 1936.62°C) y la reacción que caracteriza a esta región es la siguiente:

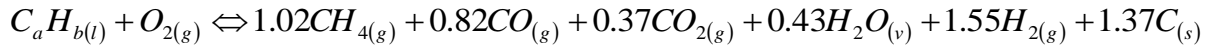




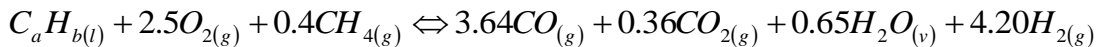
Gráfica 3.10.



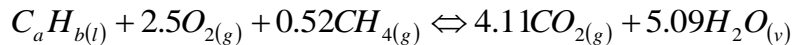
En el caso de la gráfica 3.11, ahora se le añade al reactor una corriente de alimentación de agua. El oxígeno puro provoca que el proceso de combustión sea acelerado, esto se puede observar en un punto en particular comprendido en la región I al tener 0.5 veces la relación molar O<sub>2</sub>/hidrocarburo donde el coque alcanza su valor máximo en el efluente con un valor cercano a los 1770 kmol/hr; sin embargo, en comparación con la gráfica 3.2 el coque desaparece cuando se llevan a cabo las reacciones en el caso base:

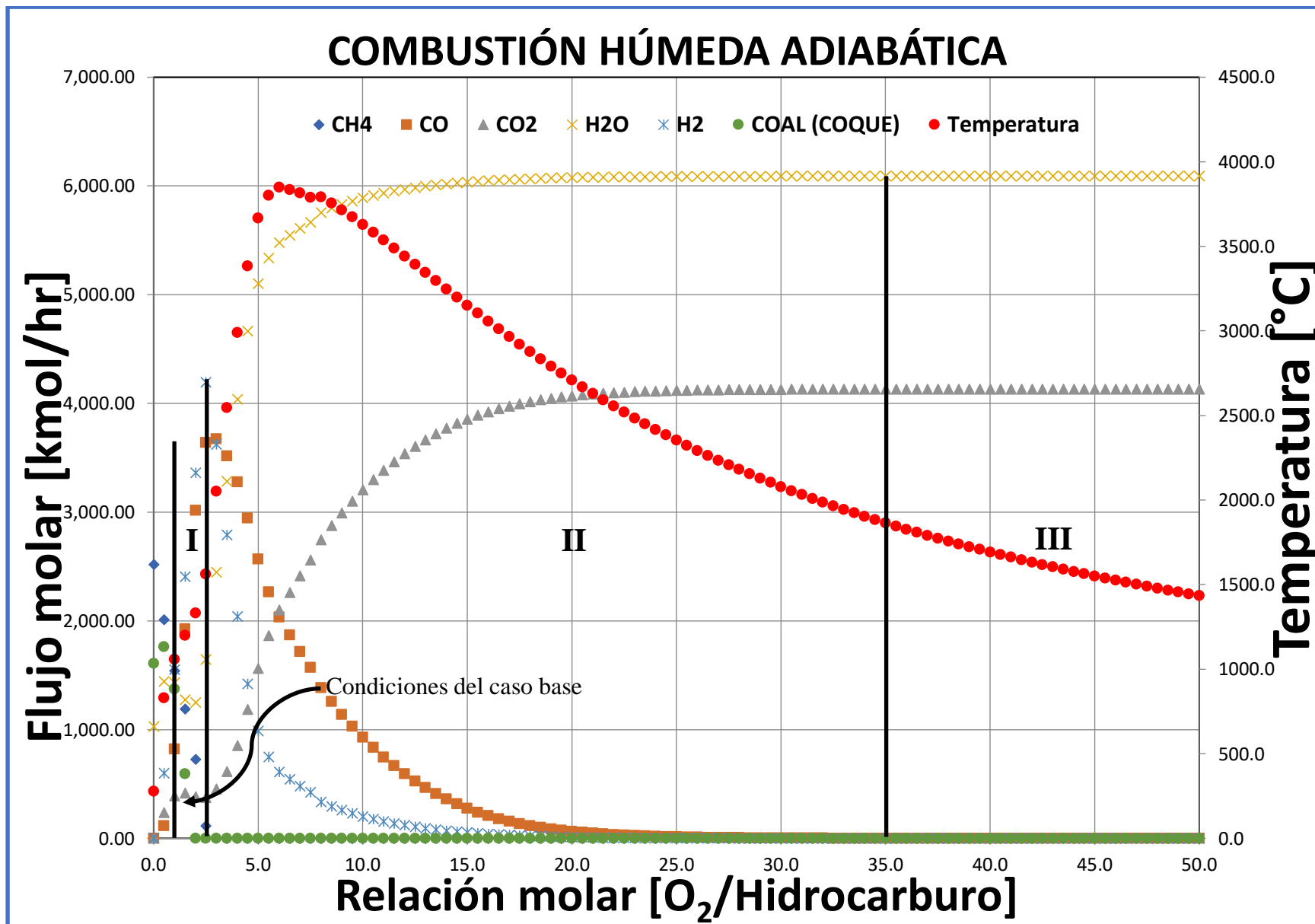


En la región II se alcanza el efluente máximo de H<sub>2</sub> al tener una alimentación de 2.5 veces O<sub>2</sub>, con un valor aproximado en la salida de 4200 kmol/hr. Asimismo, la competencia de las reacciones se da principalmente por la transformación del hidrocarburo en CO, CO<sub>2</sub>, algunas porciones de H<sub>2</sub> y agua, es decir, en esta zona puede establecerse que la reacción se da de la siguiente manera:



La estabilidad de las reacciones en la región III se observa cuando se alcanza una condición de combustión completa del hidrocarburo, esto es notorio en la gráfica 3.11 cuando se le suministra al reactor 35 veces el flujo de O<sub>2</sub>, además de que los pequeños remanentes de CO comienzan a transformarse en su mayoría a CO<sub>2</sub>, pero el producto mayoritario de las reacciones nuevamente es el agua con un flujo aproximado en la salida de 6100 kmol/hr. Otro punto interesante es que en las regiones II y III el metano se convierte en reactivo que reacciona junto con el hidrocarburo del aceite volátil y del oxígeno.

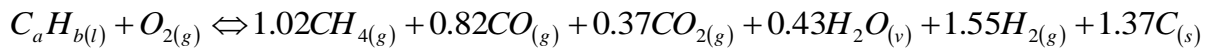




Gráfica 3.11.

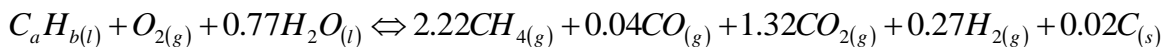
Los resultados mostrados en la gráfica 3.12 corresponden a la variación del flujo de entrada de agua al reactor, se presenta la división de la gráfica en dos secciones:

En la primera sección donde se considera el caso base, el suministro de agua aparentemente no provoca mayor cambio en las reacciones, pues se observan a todos los componentes presentes en el efluente del reactor, aunque la temperatura de operación continúa por encima de los 1000°C por lo cual la reacción que puede describir a dicho proceso se escribe de la siguiente manera:

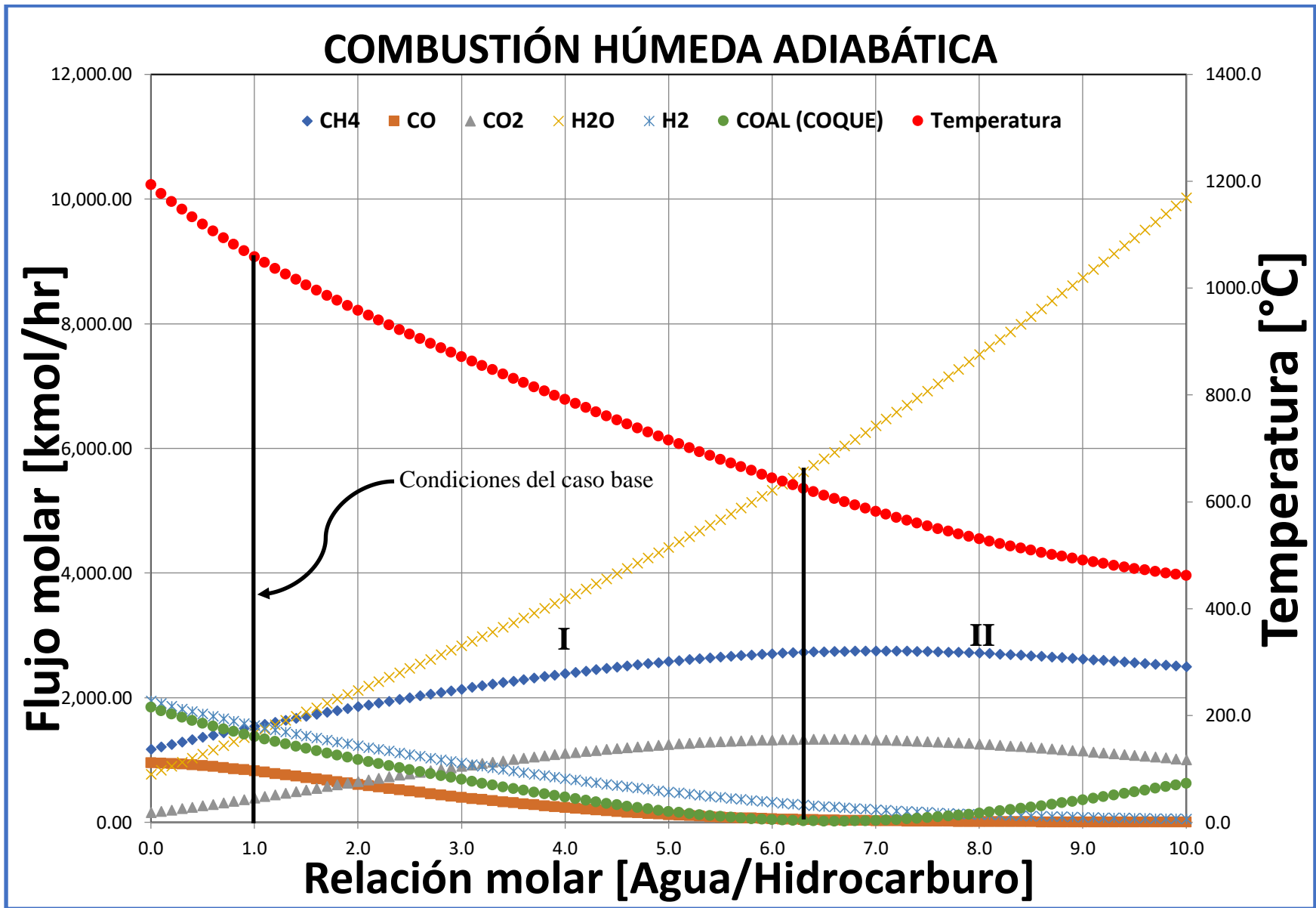


La condición de operación es que el O<sub>2</sub> suministrado al reactor permanezca constante con una relación molar de O<sub>2</sub>/hidrocarburo alrededor de 1. En el otro extremo, para la región II el aumento de agua favorece la disminución de la temperatura de reacción, haciendo que el proceso pudiera considerarse operativamente efectivo puesto que al tener una relación molar de agua/hidrocarburo de 6.4 se tiene dos cuestiones favorables: la primera es que la temperatura del reactor alcanza un valor de 625°C lo cual da indicio de que el método de combustión in situ puede aplicarse en el yacimiento con estas características; la segunda cuestión tiene que ver con el coque, pues se tiene flujo mínimos por debajo de los 20 kmol/hr haciendo que el aprovechamiento principa sea el del metano, aunque el inconveniente de este método tiene que ver con el exceso de agua porque no tiene conversión hacia otros componentes ocasionando que se acumule en a lo largo de la reacción.

En el equilibrio de la región III, se tiene que la reacción que describe estos puntos es la siguiente:



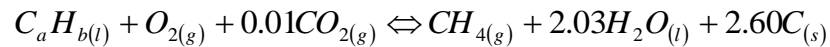
Tal y como lo indica la reacción, la presencia de agua sigue un comportamiento similar al caso anterior (región II).



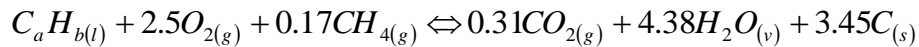
Gráfica 3.12.

Como se observó en el caso adiabático, el suministro de oxígeno puro al yacimiento ocasionaría que las temperaturas sean mayores que las que se obtiene en el caso donde se suministra aire ( $O_2+N_2$ ). Ahora la evaluación se dará manteniendo las condiciones de temperatura constante.

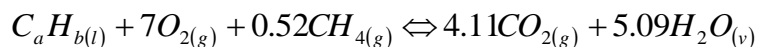
En primer lugar, la gráfica 3.13 muestra que el parámetro a variar es el flujo de  $O_2$  a la entrada del reactor, encontrándose que se puede dividir en tres regiones: en la primera se considera el caso base y se observa que el hidrocarburo, que en su mayoría es metano, entra en proceso de combustión con cantidades pequeñas de oxígeno y la competencia por su transformación se da entre el coque,  $CO_2$  y agua, ahora en esta etapa de la simulación queda en evidencia que el  $H_2$  y  $CO$  no tienen mayor presencia y en consecuencia la reacción al equilibrio para esta región puede escribirse de la siguiente forma:

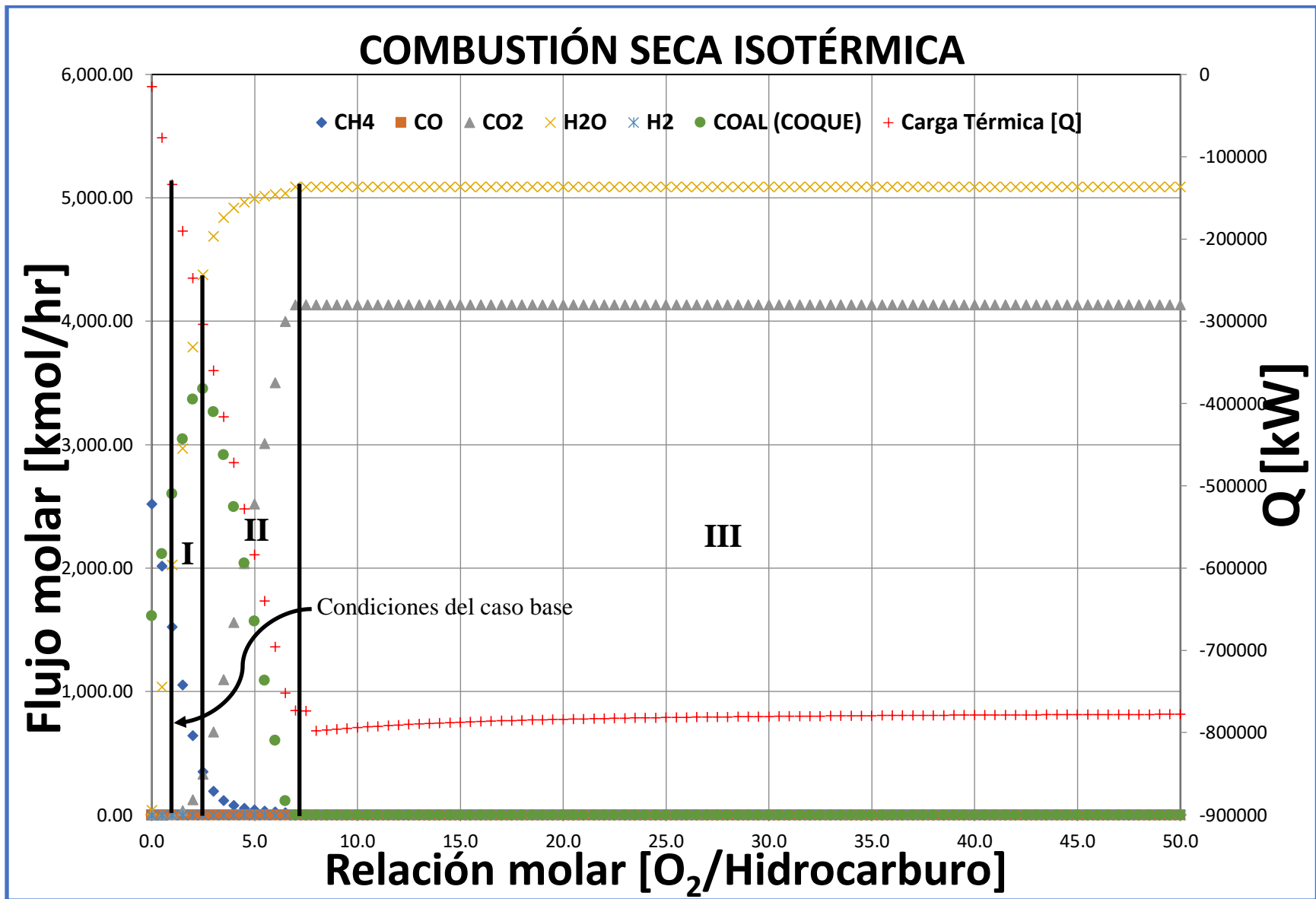


Para la región II, que se caracteriza por tener el efluente máximo de coque, con un valor cercano a los 3500 kmol/hr, el metano ahora actúa como reactivo dando lugar fundamentalmente a que los productos de reacción sean en su mayoría  $CO_2$  y agua, es decir, es en esta región donde se comienza a tener una reacción de combustión completa.



Cuando se alcanza un valor de 7.5 veces la relación molar de  $O_2$  con respecto al hidrocarburo, el  $CO_2$  y el agua alcanzan su valor máximo en el efluente con flujos de 4134 y 5092 kmol/hr, respectivamente. Si se analiza la carga térmica (Q), ésta decae de forma lineal precisamente hasta que la reacción de combustión se vuelve completa y se alcanza un valor constante al continuar el suministro de  $O_2$  que es de aproximadamente -779 MW, por lo cual comparativamente con la gráfica 3.4 las reacciones de nueva cuenta son altamente exotérmicas.





Gráfica 3.13.

---

## Capítulo 4: CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

---

- Se desarrolló una metodología que permite evaluar en distintos escenarios operativos de combustión in situ, utilizando un simulador comercial.
- El modelado termodinámico permite establecer el sentido de las reacciones y otorga un marco de referencia a cualquier estudio cinético.
- Con esta herramienta se puede hacer un diagnóstico de pruebas de combustión in situ llevadas a cabo con antelación.
- Las variables de operación importantes a considerar son:
  - **Temperatura:** establece los rangos de operación para obtener y/o reproducir las reacciones de oxidación (altas o bajas temperaturas) en el reactor.
  - **Proporción molar aire/hidrocarburo:** determina las zonas de operación del reactor en la que se observa quienes son las especies químicas predominantes en el equilibrio.
  - **Proporción molar agua/hidrocarburo:** es importante este parámetro, pues la presencia de agua ayuda a disminuir la formación de coque, además de ser un regulador térmico de las reacciones de oxidación.
- La reproducción de las reacciones OBT y OAT se da satisfactoriamente, pues se cumplen con las condiciones necesarias para que sean llevadas a cabo, teniendo en cuenta que el aceite utilizado para este trabajo es un aceite volátil, por lo que el reactor de Gibbs es una excelente herramienta para conocer si es factible o no llevar a cabo algún método de recuperación de petróleo.

- Queda en evidencia que, para el caso de este yacimiento, es necesaria la inyección de agua para disminuir la formación del coque y para regular la temperatura dentro del mismo con un adecuado diseño de operación con base en los resultados de un modelo SNY. Sin embargo, el suministro de agua depende del intervalo de temperaturas a la que se estén llevando a cabo las reacciones de combustión, pues se corre el riesgo de saturar al yacimiento con agua, complicando así el proceso de combustión in situ.
- Los resultados de los análisis de sensibilidad arrojan como resultado que a medida en que los materiales de inyección avancen en el seno del yacimiento, siempre habrá un punto en donde se formará coque, el cual es responsable junto con las sales de calcio (en este tipo de yacimientos), de favorecer un daño en el medio poroso. Por lo cual, se sugiere diseñar un modelo de simulación numérica de yacimiento (SNY) en donde se analice la mejor estrategia de inyección de aire o agua que evite las condiciones en que se favorece la formación de coque a gran escala, incorporando los resultados de un modelo cinético.
- Las especies predominantes en el equilibrio termodinámico son: metano, CO, CO<sub>2</sub>, agua y coque.
- Para determinar la factibilidad de los procesos de combustión in situ, es indispensable incorporar los modelos termodinámicos que describen el equilibrio físico y químico, así como los modelos cinéticos, si es que se desea desarrollar la estrategia de combustión in situ en un yacimiento.
- Hay que incentivar el uso de los simuladores de proceso en los procesos de yacimiento.



---

# ANEXOS

---

## ANEXO I. LISTA Y COMPOSICIÓN MOLAR DE ESPECIES QUÍMICAS DECLARADAS

AIR		N-C25	0.0	METOH	0.0
---		N-C26	0.0	ETOH	0.0
		N-C27	0.0	1-C3OH	0.0
STREAM ID	AIR	N-C28	0.0	I-C3OH	0.0
FROM :	----	N-C29	0.0	N-C4OH	0.0
TO :	DUPL1	N-C30	0.0	I-C4OH	0.0
		O2	209.0000	NH3	0.0
SUBSTREAM: MIXED		H2O	0.0		
PHASE:	VAPOR	CO	0.0		
COMPONENTS: KMOL/HR		H2	0.0		
CO2	0.0	NO	0.0		
H2S	0.0	NO2	0.0		
N2	791.0000	SO2	0.0		
CH4	0.0	SO3	0.0		
C2H6	0.0	CARBON	0.0		
C3H8	0.0	ETILENO	0.0		
I-C4	0.0	PROPILEN	0.0		
N-C4	0.0	ISOBUTIL	0.0		
I-C5	0.0	C-BUTEN	0.0		
N-C5	0.0	TR-BUTEN	0.0		
N-C6	0.0	PENTENE	0.0		
N-C7	0.0	C-PENTE	0.0		
N-C8	0.0	T-PENTE	0.0		
N-C9	0.0	BENZENE	0.0		
N-C10	0.0	TOLUENE	0.0		
N-C11	0.0	PHENAN	0.0		
N-C12	0.0	FLOURAN	0.0		
N-C13	0.0	CHRYSENE	0.0		
N-C14	0.0	B [A] PYR	0.0		
N-C15	0.0	STYRENE	0.0		
N-C16	0.0	ACETILEN	0.0		
N-C17	0.0	M-ACETIL	0.0		
N-C18	0.0	BUTYNE	0.0		
N-C19	0.0	C-PROP	0.0		
N-C20	0.0	OX-ETHYL	0.0		
N-C21	0.0	C-BUTAN	0.0		
N-C22	0.0	ACETONE	0.0		
N-C23	0.0	MEK	0.0		
N-C24	0.0	DIACETYL	0.0		

COMPONENTS: MOLE FRAC

CO2	0.0	NO2	0.0
H2S	0.0	SO2	0.0
N2	0.7910	SO3	0.0
CH4	0.0	CARBON	0.0
C2H6	0.0	ETILENO	0.0
C3H8	0.0	PROPILEN	0.0
I-C4	0.0	ISOBUTIL	0.0
N-C4	0.0	C-BUTEN	0.0
I-C5	0.0	TR-BUTEN	0.0
N-C5	0.0	PENTENE	0.0
N-C6	0.0	C-PENTE	0.0
N-C7	0.0	T-PENTE	0.0
N-C8	0.0	BENZENE	0.0
N-C9	0.0	TOLUENE	0.0
N-C10	0.0	PHENAN	0.0
N-C11	0.0	FLOURAN	0.0
N-C12	0.0	CHRYSENE	0.0
N-C13	0.0	B[A]PYR	0.0
N-C14	0.0	STYRENE	0.0
N-C15	0.0	ACETILEN	0.0
N-C16	0.0	M-ACETIL	0.0
N-C17	0.0	BUTYNE	0.0
N-C18	0.0	C-PROP	0.0
N-C19	0.0	OX-ETHYL	0.0
N-C20	0.0	C-BUTAN	0.0
N-C21	0.0	ACETONE	0.0
N-C22	0.0	MEK	0.0
N-C23	0.0	DIACETYL	0.0
N-C24	0.0	METOH	0.0
N-C25	0.0	ETOH	0.0
N-C26	0.0	1-C3OH	0.0
N-C27	0.0	I-C3OH	0.0
N-C28	0.0	N-C4OH	0.0
N-C29	0.0	I-C4OH	0.0
N-C30	0.0	NH3	0.0
O2	0.2090		
H2O	0.0		
CO	0.0		
H2	0.0		
NO	0.0		

TOTAL FLOW:	
KMOL/HR	1000.0000
KG/HR	2.8850+04
BBL/HR	443.0385
STATE VARIABLES:	
TEMP K	420.1500
PRES ATM	646.4211
VFRAC	1.0000
LFRAC	0.0
SFRAC	0.0
ENTHALPY:	
KJ/KMOL	3131.8510
KJ/KG	108.5202
KW	869.6811
ENTROPY:	
CAL/MOL-K	-10.1513
CAL/GM-K	-0.3519
DENSITY:	
MOL/CC	1.4197-02
GM/CC	0.4096
AVG MW	28.8504

PR		N-C25	2.5600	ETOH	0.0
--		N-C26	2.2900	I-C3OH	0.0
		N-C27	2.0600	I-C3OH	0.0
STREAM ID	PR	N-C28	1.8400	N-C4OH	0.0
FROM :	----	N-C29	1.6500	I-C4OH	0.0
TO :	DUPL2	N-C30	14.6100	NH3	0.0
		O2	0.0		
SUBSTREAM: MIXED		H2O	0.0		
PHASE:		CO	0.0		
LIQUID		H2	0.0		
COMPONENTS: KMOL/HR		NO	0.0		
CO2	18.7200	NO2	0.0		
H2S	13.4900	SO2	0.0		
N2	4.5400	SO3	0.0		
CH4	520.3300	CARBON	0.0		
C2H6	103.8200	ETILENO	0.0		
C3H8	59.5200	PROPILEN	0.0		
I-C4	10.9700	ISOBUTIL	0.0		
N-C4	26.2300	C-BUTEN	0.0		
I-C5	11.0200	TR-BUTEN	0.0		
N-C5	13.8500	PENTENE	0.0		
N-C6	25.5900	C-PENTE	0.0		
N-C7	24.7700	T-PENTE	0.0		
N-C8	19.3000	BENZENE	0.0		
N-C9	16.5000	TOLUENE	0.0		
N-C10	14.3700	PHENAN	0.0		
N-C11	12.6300	FLOURAN	0.0		
N-C12	11.1500	CHRYSENE	0.0		
N-C13	9.8900	B[A]PYR	0.0		
N-C14	8.7800	STYRENE	0.0		
N-C15	7.8200	ACETILEN	0.0		
N-C16	6.9700	M-ACETIL	0.0		
N-C17	6.2200	BUTYNE	0.0		
N-C18	5.5500	C-PROP	0.0		
N-C19	4.9600	OX-ETHYL	0.0		
N-C20	4.4400	C-BUTAN	0.0		
N-C21	3.9700	ACETONE	0.0		
N-C22	3.5600	MEK	0.0		
N-C23	3.1800	DIACETYL	0.0		
N-C24	2.8500	METOH	0.0		

COMPONENTS: MOLE FRAC

CO2 1.8720-02  
H2S 1.3490-02  
N2 4.5400-03  
CH4 0.5203  
C2H6 0.1038  
C3H8 5.9520-02  
I-C4 1.0970-02  
N-C4 2.6230-02  
I-C5 1.1020-02  
N-C5 1.3850-02  
N-C6 2.5590-02  
N-C7 2.4770-02  
N-C8 1.9300-02  
N-C9 1.6500-02  
N-C10 1.4370-02  
N-C11 1.2630-02  
N-C12 1.1150-02  
N-C13 9.8900-03  
N-C14 8.7800-03  
N-C15 7.8200-03  
N-C16 6.9700-03  
N-C17 6.2200-03  
N-C18 5.5500-03  
N-C19 4.9600-03  
N-C20 4.4400-03  
N-C21 3.9700-03  
N-C22 3.5600-03  
N-C23 3.1800-03  
N-C24 2.8500-03  
N-C25 2.5600-03  
N-C26 2.2900-03  
N-C27 2.0600-03  
N-C28 1.8400-03  
N-C29 1.6500-03

N-C30 1.4610-02  
O2 0.0  
H2O 0.0  
CO 0.0  
H2 0.0  
NO 0.0  
NO2 0.0  
SO2 0.0  
SO3 0.0  
CARBON 0.0  
ETILENO 0.0  
PROPILEN 0.0  
ISOBUTIL 0.0  
C-BUTEN 0.0  
TR-BUTEN 0.0  
PENTENE 0.0  
C-PENTE 0.0  
T-PENTE 0.0  
BENZENE 0.0  
TOLUENE 0.0  
PHENAN 0.0  
FLOURAN 0.0  
CHRYSENE 0.0  
B[A]PYR 0.0  
STYRENE 0.0  
ACETILEN 0.0  
M-ACETIL 0.0  
BUTYNE 0.0  
C-PROP 0.0  
OX-ETHYL 0.0  
C-BUTAN 0.0  
ACETONE 0.0  
MEK 0.0  
DIACETYL 0.0  
METOH 0.0

ETOH 0.0  
1-C3OH 0.0  
I-C3OH 0.0  
N-C4OH 0.0  
I-C4OH 0.0  
NH3 0.0

TOTAL FLOW:	
KMOL/HR	1000.0000
KG/HR	6.1073+04
BBL/HR	927.2159
STATE VARIABLES:	
TEMP K	420.1500
PRES ATM	646.4211
VFRAC	0.0
LFRAC	1.0000
SFRAC	0.0
ENTHALPY:	
KJ/KMOL	-1.3751+05
KJ/KG	-2251.5034
KW	-3.8196+04
ENTROPY:	
CAL/MOL-K	-95.1036
CAL/GM-K	-1.5572
DENSITY:	
MOL/CC	6.7835-03
GM/CC	0.4143
AVG MW	61.0731

WATER		N-C26	0.0	I-C3OH	0.0
-----		N-C27	0.0	N-C4OH	0.0
		N-C28	0.0	I-C4OH	0.0
STREAM ID	WATER	N-C29	0.0	NH3	0.0
FROM :	----	N-C30	0.0		
TO :	R-100	O2	0.0		
		H2O	1000.0000		
SUBSTREAM: MIXED		CO	0.0		
PHASE:		H2	0.0		
LIQUID		NO	0.0		
COMPONENTS: KMOL/HR		NO2	0.0		
CO2	0.0	SO2	0.0		
H2S	0.0	SO3	0.0		
N2	0.0	CARBON	0.0		
CH4	0.0	ETILENO	0.0		
C2H6	0.0	PROPILEN	0.0		
C3H8	0.0	ISOBUTIL	0.0		
I-C4	0.0	C-BUTEN	0.0		
N-C4	0.0	TR-BUTEN	0.0		
I-C5	0.0	PENTENE	0.0		
N-C5	0.0	C-PENTE	0.0		
N-C6	0.0	T-PENTE	0.0		
N-C7	0.0	BENZENE	0.0		
N-C8	0.0	TOLUENE	0.0		
N-C9	0.0	PHENAN	0.0		
N-C10	0.0	FLOURAN	0.0		
N-C11	0.0	CHRYSENE	0.0		
N-C12	0.0	B[A]PYR	0.0		
N-C13	0.0	STYRENE	0.0		
N-C14	0.0	ACETILEN	0.0		
N-C15	0.0	M-ACETIL	0.0		
N-C16	0.0	BUTYNE	0.0		
N-C17	0.0	C-PROP	0.0		
N-C18	0.0	OX-ETHYL	0.0		
N-C19	0.0	C-BUTAN	0.0		
N-C20	0.0	ACETONE	0.0		
N-C21	0.0	MEK	0.0		
N-C22	0.0	DIACETYL	0.0		
N-C23	0.0	METOH	0.0		
N-C24	0.0	ETOH	0.0		
N-C25	0.0	1-C3OH	0.0		

COMPONENTS: MOLE FRAC

CO2	0.0	NO2	0.0
H2S	0.0	SO2	0.0
N2	0.0	SO3	0.0
CH4	0.0	CARBON	0.0
C2H6	0.0	ETILENO	0.0
C3H8	0.0	PROPILEN	0.0
I-C4	0.0	ISOBUTIL	0.0
N-C4	0.0	C-BUTEN	0.0
I-C5	0.0	TR-BUTEN	0.0
N-C5	0.0	PENTENE	0.0
N-C6	0.0	C-PENTE	0.0
N-C7	0.0	T-PENTE	0.0
N-C8	0.0	BENZENE	0.0
N-C9	0.0	TOLUENE	0.0
N-C10	0.0	PHENAN	0.0
N-C11	0.0	FLOURAN	0.0
N-C12	0.0	CHRYSENE	0.0
N-C13	0.0	B[A]PYR	0.0
N-C14	0.0	STYRENE	0.0
N-C15	0.0	ACETILEN	0.0
N-C16	0.0	M-ACETIL	0.0
N-C17	0.0	BUTYNE	0.0
N-C18	0.0	C-PROP	0.0
N-C19	0.0	OX-ETHYL	0.0
N-C20	0.0	C-BUTAN	0.0
N-C21	0.0	ACETONE	0.0
N-C22	0.0	MEK	0.0
N-C23	0.0	DIACETYL	0.0
N-C24	0.0	METOH	0.0
N-C25	0.0	ETOH	0.0
N-C26	0.0	1-C3OH	0.0
N-C27	0.0	I-C3OH	0.0
N-C28	0.0	N-C4OH	0.0
N-C29	0.0	I-C4OH	0.0
N-C30	0.0	NH3	0.0
O2	0.0		
H2O	1.0000		
CO	0.0		
H2	0.0		
NO	0.0		

TOTAL FLOW:		
KMOL/HR		1000.0000
KG/HR		1.8015+04
BBL/HR		130.7519
STATE VARIABLES:		
TEMP	K	420.1500
PRES	ATM	646.4211
VFRAC		0.0
LFRAC		1.0000
SFRAC		0.0
ENTHALPY:		
KJ/KMOL		-2.7679+05
KJ/KG		-1.5364+04
KW		-7.6887+04
ENTROPY:		
CAL/MOL-K		-33.7306
CAL/GM-K		-1.8723
DENSITY:		
MOL/CC		4.8105-02
GM/CC		0.8666
AVG MW		18.0153

## ANEXO II. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN SECA ADIABÁTICA

BLOCK: R-100      MODEL: RGIBBS

```

INLET STREAMS:      PR-1      AIR-1
OUTLET STREAMS:     PRODUCT  SOLID
PROPERTY OPTION SET: PENG-ROB  STANDARD PR EQUATION OF STATE
    
```

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR )				
CO2	18.7200	16.1021	-2.61789	0.00000
H2S	13.4900	13.4900	-0.797719E-08	0.00000
N2	794.540	783.186	-11.3537	0.00000
CH4	520.330	2171.99	1651.66	0.00000
C2H6	103.820	2.10662	-101.713	-0.342199E-16
C3H8	59.5200	0.820924E-02	-59.5118	0.643526E-16
I-C4	10.9700	0.162897E-04	-10.9700	0.290181E-16
N-C4	26.2300	0.315362E-04	-26.2300	0.212588E-17
I-C5	11.0200	0.132115E-06	-11.0200	-0.527358E-16
N-C5	13.8500	0.103138E-06	-13.8500	-0.146679E-17
N-C6	25.5900	0.295031E-09	-25.5900	0.318310E-16
N-C7	24.7700	0.908145E-12	-24.7700	0.545045E-16
N-C8	19.3000	0.292404E-14	-19.3000	0.325735E-16
N-C9	16.5000	0.789077E-17	-16.5000	-0.478228E-18
N-C10	14.3700	0.236636E-19	-14.3700	-0.164674E-20
N-C11	12.6300	0.709166E-22	-12.6300	-0.561493E-23
N-C12	11.1500	0.197725E-24	-11.1500	-0.177332E-25
N-C13	9.89000	0.640804E-27	-9.89000	-0.647932E-28
N-C14	8.78000	0.190271E-29	-8.78000	-0.216710E-30
N-C15	7.82000	0.00000	-7.82000	0.00000
N-C16	6.97000	0.00000	-6.97000	0.00000
N-C17	6.22000	0.00000	-6.22000	0.00000
N-C18	5.55000	0.00000	-5.55000	0.00000
N-C19	4.96000	0.00000	-4.96000	0.00000
N-C20	4.44000	0.00000	-4.44000	0.00000
N-C21	3.97000	0.00000	-3.97000	0.00000
N-C22	3.56000	0.00000	-3.56000	0.00000
N-C23	3.18000	0.00000	-3.18000	0.00000
N-C24	2.85000	0.00000	-2.85000	0.00000
N-C25	2.56000	0.00000	-2.56000	0.00000



N-C26	2.29000	0.00000	-2.29000	0.00000
N-C27	2.06000	0.00000	-2.06000	0.00000
N-C28	1.84000	0.00000	-1.84000	0.00000
N-C29	1.65000	0.00000	-1.65000	0.00000
N-C30	14.6100	0.00000	-14.6100	0.00000
O2	210.000	0.597905E-20	-210.000	-0.284717E-22
H2O	0.00000	417.993	417.993	0.00000
CO	0.00000	7.24273	7.24273	0.00000
H2	0.00000	275.837	275.837	0.00000
NO	0.00000	0.113525E-12	0.113525E-12	0.00000
NO2	0.00000	0.630497E-24	0.630497E-24	0.00000
SO2	0.00000	0.797719E-08	0.797719E-08	0.00000
SO3	0.00000	0.775146E-18	0.775146E-18	0.00000
CARBON	0.00000	1934.12	1934.12	0.00000
ETILENO	0.00000	0.708726E-02	0.708726E-02	0.00000
PROPILEN	0.00000	0.231139E-03	0.231139E-03	0.00000
ISOBUTIL	0.00000	0.126490E-05	0.126490E-05	0.00000
C-BUTEN	0.00000	0.702062E-06	0.702062E-06	0.00000
TR-BUTEN	0.00000	0.815617E-06	0.815617E-06	0.00000
PENTENE	0.00000	0.272896E-08	0.272896E-08	0.00000
C-PENTE	0.00000	0.292152E-08	0.292152E-08	0.00000
T-PENTE	0.00000	0.561039E-08	0.561039E-08	0.00000
BENZENE	0.00000	0.126290E-07	0.126290E-07	0.00000
TOLUENE	0.00000	0.650675E-09	0.650675E-09	0.00000
PHENAN	0.00000	0.102477E-20	0.102477E-20	0.00000
FLOURAN	0.00000	0.117080E-24	0.117080E-24	0.00000
CHRYSENE	0.00000	0.883710E-29	0.883710E-29	0.00000
B[A]PYR	0.00000	0.608351E-30	0.608351E-30	0.00000
STYRENE	0.00000	0.446209E-13	0.446209E-13	0.00000
ACETILEN	0.00000	0.100666E-06	0.100666E-06	0.00000
M-ACETIL	0.00000	0.104331E-07	0.104331E-07	0.00000
BUTYNE	0.00000	0.372335E-10	0.372335E-10	0.00000
C-PROP	0.00000	0.101706E-06	0.101706E-06	0.00000
OX-ETHYL	0.00000	0.794409E-11	0.794409E-11	0.00000
C-BUTAN	0.00000	0.849093E-10	0.849093E-10	0.00000
NH3	0.00000	22.7074	22.7074	0.00000
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR )	2000.00	5644.79	3644.79	0.161121E-15
MASS (KG/HR )	89923.5	89923.5		-0.145643E-14
ENTHALPY (KW )	-37326.5	-37326.5		0.664651E-08

\*\*\* CO2 EQUIVALENT SUMMARY \*\*\*

FEED STREAMS CO2E	209512.	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	871827.	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	662315.	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	662315.	KG/HR

\*\*\* INPUT DATA \*\*\*

EQUILIBRIUM SPECIFICATIONS:

ONLY CHEMICAL EQUILIBRIUM IS CONSIDERED, THE FLUID PHASE IS VAPOR

CALCULATED TEMPERATURE	K	963.42
TEMPERATURE FOR FREE ENERGY EVALUATION	K	963.42
SYSTEM PRESSURE	ATM	646.42
SPECIFIED DUTY	KW	0.0000

FLUID PHASE SPECIES IN PRODUCT LIST:

CO2 H2S N2 CH4 C2H6 C3H8 I-C4 N-C4 I-C5 N-C5 N-C6 N-C7 N-C8 N-C9  
N-C10 N-C11 N-C12 N-C13 N-C14 N-C15 N-C16 N-C17 N-C18 N-C19 N-C20  
N-C21 N-C22 N-C23 N-C24 N-C25 N-C26 N-C27 N-C28 N-C29 N-C30 O2 H2O  
CO H2 NO NO2 SO2 SO3 ETILENO PROPILEN ISOBUTIL C-BUTEN TR-BUTEN  
PENTENE C-PENTE T-PENTE BENZENE TOLUENE PHENAN FLOURAN CHRYSENE  
B[A]PYR STYRENE ACETILEN M-ACETIL BUTYNE C-PROP OX-ETHYL C-BUTAN  
NH3

SOLIDS IN PRODUCT LIST:

CARBON (COQUE)

ATOM MATRIX:

ELEMENT	H	C	N	O	S
CO2	0.00	1.00	0.00	2.00	0.00
H2S	2.00	0.00	0.00	0.00	1.00
N2	0.00	0.00	2.00	0.00	0.00
CH4	4.00	1.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	6.00	2.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	8.00	3.00	0.00	0.00	0.00
I-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
N-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
I-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C6	14.00	6.00	0.00	0.00	0.00
N-C7	16.00	7.00	0.00	0.00	0.00
N-C8	18.00	8.00	0.00	0.00	0.00
N-C9	20.00	9.00	0.00	0.00	0.00
N-C10	22.00	10.00	0.00	0.00	0.00
N-C11	24.00	11.00	0.00	0.00	0.00
N-C12	26.00	12.00	0.00	0.00	0.00
N-C13	28.00	13.00	0.00	0.00	0.00
N-C14	30.00	14.00	0.00	0.00	0.00
N-C15	32.00	15.00	0.00	0.00	0.00
N-C16	34.00	16.00	0.00	0.00	0.00
N-C17	36.00	17.00	0.00	0.00	0.00
N-C18	38.00	18.00	0.00	0.00	0.00
N-C19	40.00	19.00	0.00	0.00	0.00
N-C20	42.00	20.00	0.00	0.00	0.00
N-C21	44.00	21.00	0.00	0.00	0.00
N-C22	46.00	22.00	0.00	0.00	0.00
N-C23	48.00	23.00	0.00	0.00	0.00
N-C24	50.00	24.00	0.00	0.00	0.00
N-C25	52.00	25.00	0.00	0.00	0.00
N-C26	54.00	26.00	0.00	0.00	0.00
N-C27	56.00	27.00	0.00	0.00	0.00
N-C28	58.00	28.00	0.00	0.00	0.00
N-C29	60.00	29.00	0.00	0.00	0.00
N-C30	62.00	30.00	0.00	0.00	0.00
O2	0.00	0.00	0.00	2.00	0.00
H2O	2.00	0.00	0.00	1.00	0.00
CO	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00
H2	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00

NO	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00
NO2	0.00	0.00	1.00	2.00	0.00
SO2	0.00	0.00	0.00	2.00	1.00
SO3	0.00	0.00	0.00	3.00	1.00
CARBON	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00
ETILENO	4.00	2.00	0.00	0.00	0.00
PROPILEN	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
ISOBUTIL	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
TR-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
PENTENE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
C-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
T-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
BENZENE	6.00	6.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENE	8.00	7.00	0.00	0.00	0.00
PHENAN	10.00	14.00	0.00	0.00	0.00
FLOURAN	10.00	16.00	0.00	0.00	0.00
CHRYSENE	12.00	18.00	0.00	0.00	0.00
B[A]PYR	12.00	20.00	0.00	0.00	0.00
STYRENE	8.00	8.00	0.00	0.00	0.00
ACETILEN	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
M-ACETIL	4.00	3.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE	6.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-PROP	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
OX-ETHYL	4.00	2.00	0.00	1.00	0.00
C-BUTAN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
NH3	3.00	0.00	1.00	0.00	0.00

*** RESULTS ***		
TEMPERATURE	K	963.42
PRESSURE	ATM	646.42
VAPOR FRACTION		1.0000
NUMBER OF FLUID PHASES		1

FLUID PHASE MOLE FRACTIONS:

PHASE OF TYPE	VAPOR
PHASE FRACTION	VAPOR
PLACED IN STREAM	PRODUCT
CO2	0.4339405E-02
H2S	0.3635461E-02
N2	0.2110632
CH4	0.5853362
C2H6	0.5677195E-03
C3H8	0.2212333E-05
I-C4	0.4389948E-08
O2	0.1611312E-23
CO	0.1951866E-02
H2	0.7433619E-01
NO	0.3059408E-16
ETILENO	0.1909967E-05
PROPILEN	0.6229041E-07
ISOBUTIL	0.3408804E-09
ACETILEN	0.2712882E-10
M-ACETIL	0.2811648E-11
C-PROP	0.2740898E-10
NH3	0.6119498E-02
C-BUTAN	0.2288245E-13
OX-ETHYL	0.2140877E-14
BUTYNE	0.1003417E-13
STYRENE	0.1202501E-16
B[A]PYR	0.1639465E-33
CHRYSENE	0.2381538E-32
FLOURAN	0.3155231E-28
PHENAN	0.2761680E-24
TOLUENE	0.1753524E-12
BENZENE	0.3403422E-11
T-PENTE	0.1511961E-11
C-PENTE	0.7873286E-12
PENTENE	0.7354363E-12
TR-BUTEN	0.2198030E-09
C-BUTEN	0.1892009E-09
SO3	0.2088964E-21
SO2	0.2149798E-11

NO2	0.1699146E-27
H2O	0.1126462
N-C30	0.000000
N-C29	0.000000
N-C28	0.000000
N-C27	0.000000
N-C26	0.000000
N-C25	0.000000
N-C24	0.000000
N-C23	0.000000
N-C22	0.000000
N-C21	0.000000
N-C20	0.000000
N-C19	0.000000
N-C18	0.000000
N-C17	0.000000
N-C16	0.000000
N-C15	0.000000
N-C14	0.5127679E-33
N-C13	0.1726923E-30
N-C12	0.5328542E-28
N-C11	0.1911152E-25
N-C10	0.6377185E-23
N-C9	0.2126507E-20
N-C8	0.7880095E-18
N-C7	0.2447386E-15
N-C6	0.7950872E-13
N-C5	0.2779504E-10
I-C5	0.3560396E-10
N-C4	0.8498789E-08

KMOL/HR 3710.671

SOLIDS PRESENT AT EQUILIBRIUM, PLACED IN STREAM SOLID

SOLID FLOW RATES (KMOL/HR):

COQUE 1934.122

## ANEXO III. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN HÚMEDA ADIABÁTICA

BLOCK: R-100      MODEL: RGIBBS

```

INLET STREAMS:      PR-1      AIR-1      WATER
OUTLET STREAMS:    PRODUCT  SOLID
PROPERTY OPTION SET: PENG-ROB  STANDARD PR EQUATION OF STATE
    
```

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR )				
CO2	18.7200	78.8064	60.0864	0.00000
H2S	13.4900	13.4900	-0.565024E-08	0.00000
N2	794.540	784.510	-10.0298	0.00000
CH4	520.330	2322.66	1802.33	0.00000
C2H6	103.820	1.18383	-102.636	0.235262E-16
C3H8	59.5200	0.297064E-02	-59.5170	0.484321E-16
I-C4	10.9700	0.451576E-05	-10.9700	0.195229E-16
N-C4	26.2300	0.725878E-05	-26.2300	0.650974E-16
I-C5	11.0200	0.223126E-07	-11.0200	0.415992E-16
N-C5	13.8500	0.151109E-07	-13.8500	-0.326256E-16
N-C6	25.5900	0.271448E-10	-25.5900	0.562553E-16
N-C7	24.7700	0.530863E-13	-24.7700	0.825133E-17
N-C8	19.3000	0.1111008E-15	-19.3000	-0.575169E-17
N-C9	16.5000	0.183931E-18	-16.5000	-0.111473E-19
N-C10	14.3700	0.345229E-21	-14.3700	-0.240243E-22
N-C11	12.6300	0.675868E-24	-12.6300	-0.535129E-25
N-C12	11.1500	0.117436E-26	-11.1500	-0.105324E-27
N-C13	9.89000	0.237311E-29	-9.89000	-0.239951E-30
N-C14	8.78000	0.00000	-8.78000	0.00000
N-C15	7.82000	0.00000	-7.82000	0.00000
N-C16	6.97000	0.00000	-6.97000	0.00000
N-C17	6.22000	0.00000	-6.22000	0.00000
N-C18	5.55000	0.00000	-5.55000	0.00000
N-C19	4.96000	0.00000	-4.96000	0.00000
N-C20	4.44000	0.00000	-4.44000	0.00000
N-C21	3.97000	0.00000	-3.97000	0.00000
N-C22	3.56000	0.00000	-3.56000	0.00000
N-C23	3.18000	0.00000	-3.18000	0.00000
N-C24	2.85000	0.00000	-2.85000	0.00000
N-C25	2.56000	0.00000	-2.56000	0.00000

N-C26	2.29000	0.00000	-2.29000	0.00000
N-C27	2.06000	0.00000	-2.06000	0.00000
N-C28	1.84000	0.00000	-1.84000	0.00000
N-C29	1.65000	0.00000	-1.65000	0.00000
N-C30	14.6100	0.00000	-14.6100	0.00000
O2	210.000	0.317603E-23	-210.000	-0.151239E-25
H2O	1000.00	1297.52	297.518	0.00000
CO	0.00000	2.30896	2.30896	0.00000
H2	0.00000	101.740	101.740	0.00000
NO	0.00000	0.300087E-15	0.300087E-15	0.00000
NO2	0.00000	0.162482E-27	0.162482E-27	0.00000
SO2	0.00000	0.565023E-08	0.565023E-08	0.00000
SO3	0.00000	0.114556E-18	0.114556E-18	0.00000
CARBON	0.00000	1727.55	1727.55	0.00000
ETILENO	0.00000	0.436970E-03	0.436970E-03	0.00000
PROPILEN	0.00000	0.124596E-04	0.124596E-04	0.00000
ISOBUTIL	0.00000	0.639670E-07	0.639670E-07	0.00000
C-BUTEN	0.00000	0.310263E-07	0.310263E-07	0.00000
TR-BUTEN	0.00000	0.367179E-07	0.367179E-07	0.00000
PENTENE	0.00000	0.608570E-10	0.608570E-10	0.00000
C-PENTE	0.00000	0.812452E-10	0.812452E-10	0.00000
T-PENTE	0.00000	0.161471E-09	0.161471E-09	0.00000
BENZENE	0.00000	0.208875E-09	0.208875E-09	0.00000
TOLUENE	0.00000	0.937083E-11	0.937083E-11	0.00000
PHENAN	0.00000	0.280800E-24	0.280800E-24	0.00000
FLOURAN	0.00000	0.437365E-29	0.437365E-29	0.00000
CHRYSENE	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
B[A]PYR	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
STYRENE	0.00000	0.703051E-16	0.703051E-16	0.00000
ACETILEN	0.00000	0.259882E-09	0.259882E-09	0.00000
M-ACETIL	0.00000	0.324516E-10	0.324516E-10	0.00000
BUTYNE	0.00000	0.730871E-13	0.730871E-13	0.00000
C-PROP	0.00000	0.267114E-08	0.267114E-08	0.00000
OX-ETHYL	0.00000	0.134748E-12	0.134748E-12	0.00000
C-BUTAN	0.00000	0.169816E-11	0.169816E-11	0.00000
NH3	0.00000	20.0597	20.0597	0.00000
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR )	3000.00	6349.84	3349.84	0.00000
MASS (KG/HR )	107939.	107939.		0.188743E-14
ENTHALPY (KW )	-114214.	-114214.		0.862947E-06

\*\*\* CO2 EQUIVALENT SUMMARY \*\*\*

FEED STREAMS CO2E	209512.	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	935017.	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	725505.	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	725505.	KG/HR

\*\*\* INPUT DATA \*\*\*

EQUILIBRIUM SPECIFICATIONS:

ONLY CHEMICAL EQUILIBRIUM IS CONSIDERED, THE FLUID PHASE IS VAPOR

CALCULATED TEMPERATURE	K	813.73
TEMPERATURE FOR FREE ENERGY EVALUATION	K	813.73
SYSTEM PRESSURE	ATM	646.42
SPECIFIED DUTY	KW	0.0000

FLUID PHASE SPECIES IN PRODUCT LIST:

CO2 H2S N2 CH4 C2H6 C3H8 I-C4 N-C4 I-C5 N-C5 N-C6 N-C7 N-C8 N-C9  
N-C10 N-C11 N-C12 N-C13 N-C14 N-C15 N-C16 N-C17 N-C18 N-C19 N-C20  
N-C21 N-C22 N-C23 N-C24 N-C25 N-C26 N-C27 N-C28 N-C29 N-C30 O2 H2O  
CO H2 NO NO2 SO2 SO3 ETILENO PROPILEN ISOBUTIL C-BUTEN TR-BUTEN  
PENTENE C-PENTE T-PENTE BENZENE TOLUENE PHENAN FLOURAN CHRYSENE  
B[A]PYR STYRENE ACETILEN M-ACETIL BUTYNE C-PROP OX-ETHYL C-BUTAN  
NH3

SOLIDS IN PRODUCT LIST:

CARBON (COQUE)

ATOM MATRIX:

ELEMENT	H	C	N	O	S
CO2	0.00	1.00	0.00	2.00	0.00
H2S	2.00	0.00	0.00	0.00	1.00
N2	0.00	0.00	2.00	0.00	0.00
CH4	4.00	1.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	6.00	2.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	8.00	3.00	0.00	0.00	0.00
I-C4	0.00	4.00	0.00	0.00	0.00
N-C4	0.00	4.00	0.00	0.00	0.00
I-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C6	14.00	6.00	0.00	0.00	0.00
N-C7	16.00	7.00	0.00	0.00	0.00
N-C8	18.00	8.00	0.00	0.00	0.00
N-C9	20.00	9.00	0.00	0.00	0.00
N-C10	22.00	10.00	0.00	0.00	0.00
N-C11	24.00	11.00	0.00	0.00	0.00
N-C12	26.00	12.00	0.00	0.00	0.00
N-C13	28.00	13.00	0.00	0.00	0.00
N-C14	30.00	14.00	0.00	0.00	0.00
N-C15	32.00	15.00	0.00	0.00	0.00
N-C16	34.00	16.00	0.00	0.00	0.00
N-C17	36.00	17.00	0.00	0.00	0.00
N-C18	38.00	18.00	0.00	0.00	0.00
N-C19	40.00	19.00	0.00	0.00	0.00
N-C20	42.00	20.00	0.00	0.00	0.00
N-C21	44.00	21.00	0.00	0.00	0.00
N-C22	46.00	22.00	0.00	0.00	0.00
N-C23	48.00	23.00	0.00	0.00	0.00
N-C24	50.00	24.00	0.00	0.00	0.00
N-C25	52.00	25.00	0.00	0.00	0.00
N-C26	54.00	26.00	0.00	0.00	0.00
N-C27	56.00	27.00	0.00	0.00	0.00
N-C28	58.00	28.00	0.00	0.00	0.00
N-C29	60.00	29.00	0.00	0.00	0.00
N-C30	62.00	30.00	0.00	0.00	0.00
O2	0.00	0.00	0.00	2.00	0.00
H2O	2.00	0.00	0.00	1.00	0.00
CO	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00
H2	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00

NO	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00
NO2	0.00	0.00	1.00	2.00	0.00
SO2	0.00	0.00	0.00	2.00	1.00
SO3	0.00	0.00	0.00	3.00	1.00
CARBON	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00
ETILENO	4.00	2.00	0.00	0.00	0.00
PROPILEN	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
ISOBUTIL	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
TR-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
PENTENE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
C-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
T-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
BENZENE	6.00	6.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENE	8.00	7.00	0.00	0.00	0.00
PHENAN	10.00	14.00	0.00	0.00	0.00
FLOURAN	10.00	16.00	0.00	0.00	0.00
CHRYSENE	12.00	18.00	0.00	0.00	0.00
B[A]PYR	12.00	20.00	0.00	0.00	0.00
STYRENE	8.00	8.00	0.00	0.00	0.00
ACETILEN	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
M-ACETIL	4.00	3.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE	6.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-PROP	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
OX-ETHYL	4.00	2.00	0.00	1.00	0.00
C-BUTAN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
NH3	3.00	0.00	1.00	0.00	0.00

*** RESULTS ***			
TEMPERATURE	K		813.73
PRESSURE	ATM		646.42
VAPOR FRACTION			1.0000
NUMBER OF FLUID PHASES			1



FLUID PHASE MOLE FRACTIONS:

PHASE	VAPOR
OF TYPE	VAPOR
PHASE FRACTION	1.000000
PLACED IN STREAM	PRODUCT
CO2	0.1704923E-01
H2S	0.2918470E-02
N2	0.1697235
CH4	0.5024927
C2H6	0.2561142E-03
C3H8	0.6426770E-06
I-C4	0.9769550E-09
O2	0.6871118E-27
CO	0.4995285E-03
H2	0.2201068E-01
NO	0.6492173E-19
ETILENO	0.9453560E-07
PROPILEN	0.2695543E-08
ISOBUTIL	0.1383884E-10
ACETILEN	0.5622368E-13
M-ACETIL	0.7020689E-14
C-PROP	0.5778834E-12
NH3	0.4339777E-02
C-BUTAN	0.3673853E-15
OX-ETHYL	0.2915185E-16
BUTYNE	0.1581189E-16
STYRENE	0.1521004E-19
B[A]PYR	0.000000
CHRYSENE	0.000000
FLOURAN	0.9462086E-33
PHENAN	0.6074929E-28
TOLUENE	0.2027316E-14
BENZENE	0.4518862E-13
T-PENTE	0.3493306E-13
C-PENTE	0.1757685E-13
PENTENE	0.1316599E-13
TR-BUTEN	0.7943661E-11
C-BUTEN	0.6712320E-11
SO3	0.2478348E-22
SO2	0.1222390E-11

NO2	0.3515197E-31
H2O	0.2807093
N-C30	0.000000
N-C29	0.000000
N-C28	0.000000
N-C27	0.000000
N-C26	0.000000
N-C25	0.000000
N-C24	0.000000
N-C23	0.000000
N-C22	0.000000
N-C21	0.000000
N-C20	0.000000
N-C19	0.000000
N-C18	0.000000
N-C17	0.000000
N-C16	0.000000
N-C15	0.000000
N-C14	0.000000
N-C13	0.5134067E-33
N-C12	0.2540658E-30
N-C11	0.1462196E-27
N-C10	0.7468789E-25
N-C9	0.3979214E-22
N-C8	0.2401575E-19
N-C7	0.1148487E-16
N-C6	0.5872604E-14
N-C5	0.3269151E-11
I-C5	0.4827183E-11
N-C4	0.1570387E-08

KMOL/HR 4622.284

SOLIDS PRESENT AT EQUILIBRIUM, PLACED IN STREAM SOLID	
SOLID FLOW RATES (KMOL/HR):	
COQUE	1727.553

## ANEXO IV. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN SECA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE YACIMIENTO

BLOCK: R-100      MODEL: RGIBBS

---

```

INLET STREAMS:      PR-1       AIR-1
OUTLET STREAMS:     PRODUCT    SOLID
PROPERTY OPTION SET: PENG-ROB   STANDARD PR EQUATION OF STATE
    
```

```

***  MASS AND ENERGY BALANCE  ***
                IN           OUT           GENERATION    RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE
MOLE (KMOL/HR )       2000.00       5403.86           3403.86       0.168305E-15
MASS (KG/HR   )       89919.5        89919.5           0.323665E-15
ENTHALPY (KW   )     -37326.3       -76949.7          0.514926
    
```

```

***  CO2 EQUIVALENT SUMMARY  ***
FEED STREAMS CO2E      209512.       KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E   923530.       KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION  714018.       KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION  0.00000       KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION  714018.       KG/HR
    
```

\*\*\* INPUT DATA \*\*\*

### EQUILIBRIUM SPECIFICATIONS:

```

ONLY CHEMICAL EQUILIBRIUM IS CONSIDERED, THE FLUID PHASE IS VAPOR
SYSTEM TEMPERATURE      K              420.15
TEMPERATURE FOR FREE ENERGY EVALUATION      K              420.15
SYSTEM PRESSURE         ATM             646.42
    
```

### FLUID PHASE SPECIES IN PRODUCT LIST:

```

CO2 H2S N2 CH4 C2H6 C3H8 I-C4 N-C4 I-C5 N-C5 N-C6 N-C7 N-C8 N-C9
N-C10 N-C11 N-C12 N-C13 N-C14 N-C15 N-C16 N-C17 N-C18 N-C19 N-C20
N-C21 N-C22 N-C23 N-C24 N-C25 N-C26 N-C27 N-C28 N-C29 N-C30 O2 H2O
CO H2 NO NO2 SO2 SO3 ETILENO PROPILEN ISOBUTIL C-BUTEN TR-BUTEN
PENTENE C-PENTE T-PENTE BENZENE TOLUENE PHENAN FLOURAN CHRYSENE
B[A]PYR STYRENE ACETILEN M-ACETIL BUTYNE C-PROP OX-ETHYL C-BUTAN
    
```

ACETONE MEK DIACETYL METOH ETOH 1-C3OH I-C3OH N-C4OH I-C4OH NH3

SOLIDS IN PRODUCT LIST:

CARBON (COQUE)

ATOM MATRIX:

ELEMENT	H	C	N	O	S
CO2	0.00	1.00	0.00	2.00	0.00
H2S	2.00	0.00	0.00	0.00	1.00
N2	0.00	0.00	2.00	0.00	0.00
CH4	4.00	1.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	6.00	2.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	8.00	3.00	0.00	0.00	0.00
I-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
N-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
I-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C6	14.00	6.00	0.00	0.00	0.00
N-C7	16.00	7.00	0.00	0.00	0.00
N-C8	18.00	8.00	0.00	0.00	0.00
N-C9	20.00	9.00	0.00	0.00	0.00
N-C10	22.00	10.00	0.00	0.00	0.00
N-C11	24.00	11.00	0.00	0.00	0.00
N-C12	26.00	12.00	0.00	0.00	0.00
N-C13	28.00	13.00	0.00	0.00	0.00
N-C14	30.00	14.00	0.00	0.00	0.00
N-C15	32.00	15.00	0.00	0.00	0.00
N-C16	34.00	16.00	0.00	0.00	0.00
N-C17	36.00	17.00	0.00	0.00	0.00
N-C18	38.00	18.00	0.00	0.00	0.00
N-C19	40.00	19.00	0.00	0.00	0.00
N-C20	42.00	20.00	0.00	0.00	0.00
N-C21	44.00	21.00	0.00	0.00	0.00
N-C22	46.00	22.00	0.00	0.00	0.00
N-C23	48.00	23.00	0.00	0.00	0.00
N-C24	50.00	24.00	0.00	0.00	0.00
N-C25	52.00	25.00	0.00	0.00	0.00
N-C26	54.00	26.00	0.00	0.00	0.00
N-C27	56.00	27.00	0.00	0.00	0.00
N-C28	58.00	28.00	0.00	0.00	0.00
N-C29	60.00	29.00	0.00	0.00	0.00

N-C30	62.00	30.00	0.00	0.00	0.00
O2	0.00	0.00	0.00	2.00	0.00
H2O	2.00	0.00	0.00	1.00	0.00
CO	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00
H2	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00
NO	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00
NO2	0.00	0.00	1.00	2.00	0.00
SO2	0.00	0.00	0.00	2.00	1.00
SO3	0.00	0.00	0.00	3.00	1.00
CARBON	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00
ETILENO	4.00	2.00	0.00	0.00	0.00
PROPILEN	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
ISOBUTIL	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
TR-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
PENTENE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
C-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
T-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
BENZENE	6.00	6.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENE	8.00	7.00	0.00	0.00	0.00
PHENAN	10.00	14.00	0.00	0.00	0.00
FLOURAN	10.00	16.00	0.00	0.00	0.00
CHRYSENE	12.00	18.00	0.00	0.00	0.00
B[A]PYR	12.00	20.00	0.00	0.00	0.00
STYRENE	8.00	8.00	0.00	0.00	0.00
ACETILEN	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
M-ACETIL	4.00	3.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE	6.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-PROP	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
OX-ETHYL	4.00	2.00	0.00	1.00	0.00
C-BUTAN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
ACETONE	6.00	3.00	0.00	1.00	0.00
MEK	8.00	4.00	0.00	1.00	0.00
DIACETYL	6.00	4.00	0.00	2.00	0.00
METOH	4.00	1.00	0.00	1.00	0.00
ETOH	6.00	2.00	0.00	1.00	0.00

1-C3OH	8.00	3.00	0.00	1.00	0.00	I-C4OH	10.00	4.00	0.00	1.00	0.00
I-C3OH	8.00	3.00	0.00	1.00	0.00	NH3	3.00	0.00	1.00	0.00	0.00
N-C4OH	10.00	4.00	0.00	1.00	0.00						

*** RESULTS ***			
TEMPERATURE	K		420.15
PRESSURE	ATM		646.42
HEAT DUTY	KW		-39623.
VAPOR FRACTION			1.0000
NUMBER OF FLUID PHASES			1

FLUID PHASE MOLE FRACTIONS:

PHASE OF TYPE	VAPOR
PHASE FRACTION	VAPOR
PLACED IN STREAM	PRODUCT
CO2	0.3927304E-04
H2S	0.3775507E-02
N2	0.2210223
CH4	0.6444549
C2H6	0.1152279E-04
C3H8	0.3723364E-08
I-C4	0.2243073E-11
O2	0.000000
CO	0.1022434E-09
H2	0.5084575E-04
NO	0.1483917E-37
ETILENO	0.3792719E-14
PROPILEN	0.7760144E-16
ISOBUTIL	0.5345833E-18
ACETILEN	0.8271375E-29
M-ACETIL	0.4539846E-29
C-PROP	0.2335991E-21
NH3	0.3258160E-02
I-C4OH	0.2379732E-20
N-C4OH	0.1290368E-20
I-C3OH	0.3654038E-15
1-C3OH	0.7565202E-17
ETOH	0.2470424E-13
METOH	0.2398874E-11

DIACETYL	0.000000
MEK	0.2202524E-18
ACETONE	0.2524005E-15
C-BUTAN	0.4568964E-25
OX-ETHYL	0.3725530E-30
BUTYNE	0.1135789E-32
STYRENE	0.000000
B[A]PYR	0.000000
CHRYSENE	0.000000
FLOURAN	0.000000
PHENAN	0.000000
TOLUENE	0.1902910E-25
BENZENE	0.6487618E-24
T-PENTE	0.7772618E-22
C-PENTE	0.2671145E-22
PENTENE	0.6895248E-23
TR-BUTEN	0.1487235E-18
C-BUTEN	0.9562900E-19
SO3	0.000000
SO2	0.5018726E-19
NO2	0.000000
H2O	0.1273875
N-C30	0.000000
N-C29	0.000000
N-C28	0.000000
N-C27	0.000000
N-C26	0.000000
N-C25	0.000000
N-C24	0.000000
N-C23	0.000000

N-C22	0.000000
N-C21	0.000000
N-C20	0.000000
N-C19	0.000000
N-C18	0.000000
N-C17	0.000000
N-C16	0.000000
N-C15	0.000000
N-C14	0.000000
N-C13	0.000000
N-C12	0.000000
N-C11	0.000000
N-C10	0.1318871E-33
N-C9	0.6595534E-30
N-C8	0.5144383E-26
N-C7	0.1334457E-22
N-C6	0.5595797E-19
N-C5	0.3005371E-15
I-C5	0.1130459E-14
N-C4	0.1150903E-11

KMOL/HR	3573.030
---------	----------

SOLIDS PRESENT AT EQUILIBRIUM, PLACED IN STREAM SOLID

SOLID FLOW RATES (KMOL/HR):

COQUE	1830.831
-------	----------

## ANEXO V. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE YACIMIENTO

BLOCK: R-100      MODEL: RGIBBS

-----  
 INLET STREAMS:            PR-1            AIR-1            WATER  
 OUTLET STREAMS:         PRODUCT         SOLID  
 PROPERTY OPTION SET:    PENG-ROB       STANDARD PR EQUATION OF STATE

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR )	3000.00	6410.57	3410.57	0.141874E-15
MASS (KG/HR )	107935.	107935.		-0.107857E-14
ENTHALPY (KW )	-114213.	-148886.		0.232883

	***	CO2 EQUIVALENT SUMMARY	***	
FEED STREAMS CO2E		209512.	KG/HR	
PRODUCT STREAMS CO2E		919355.	KG/HR	
NET STREAMS CO2E PRODUCTION		709843.	KG/HR	
UTILITIES CO2E PRODUCTION		0.00000	KG/HR	
TOTAL CO2E PRODUCTION		709843.	KG/HR	

\*\*\* INPUT DATA \*\*\*

### EQUILIBRIUM SPECIFICATIONS:

ONLY CHEMICAL EQUILIBRIUM IS CONSIDERED, THE FLUID PHASE IS VAPOR

SYSTEM TEMPERATURE	K	420.15
TEMPERATURE FOR FREE ENERGY EVALUATION	K	420.15
SYSTEM PRESSURE	ATM	646.42

### FLUID PHASE SPECIES IN PRODUCT LIST:

CO2 H2S N2 CH4 C2H6 C3H8 I-C4 N-C4 I-C5 N-C5 N-C6 N-C7 N-C8 N-C9  
 N-C10 N-C11 N-C12 N-C13 N-C14 N-C15 N-C16 N-C17 N-C18 N-C19 N-C20  
 N-C21 N-C22 N-C23 N-C24 N-C25 N-C26 N-C27 N-C28 N-C29 N-C30 O2 H2O  
 CO H2 NO NO2 SO2 SO3 ETILENO PROPILLEN ISOBUTIL C-BUTEN TR-BUTEN  
 PENTENE C-PENTE T-PENTE BENZENE TOLUENE PHENAN FLOURAN CHRYSENE  
 B[A]PYR STYRENE ACETILEN M-ACETIL BUTYNE C-PROP OX-ETHYL C-BUTAN

ACETONE MEK DIACETYL METOH ETOH 1-C3OH I-C3OH N-C4OH I-C4OH NH3

SOLIDS IN PRODUCT LIST:

CARBON (COQUE)

ATOM MATRIX:

ELEMENT	H	C	N	O	S
CO2	0.00	1.00	0.00	2.00	0.00
H2S	2.00	0.00	0.00	0.00	1.00
N2	0.00	0.00	2.00	0.00	0.00
CH4	4.00	1.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	6.00	2.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	8.00	3.00	0.00	0.00	0.00
I-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
N-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
I-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C6	14.00	6.00	0.00	0.00	0.00
N-C7	16.00	7.00	0.00	0.00	0.00
N-C8	18.00	8.00	0.00	0.00	0.00
N-C9	20.00	9.00	0.00	0.00	0.00
N-C10	22.00	10.00	0.00	0.00	0.00
N-C11	24.00	11.00	0.00	0.00	0.00
N-C12	26.00	12.00	0.00	0.00	0.00
N-C13	28.00	13.00	0.00	0.00	0.00
N-C14	30.00	14.00	0.00	0.00	0.00
N-C15	32.00	15.00	0.00	0.00	0.00
N-C16	34.00	16.00	0.00	0.00	0.00
N-C17	36.00	17.00	0.00	0.00	0.00
N-C18	38.00	18.00	0.00	0.00	0.00
N-C19	40.00	19.00	0.00	0.00	0.00
N-C20	42.00	20.00	0.00	0.00	0.00
N-C21	44.00	21.00	0.00	0.00	0.00
N-C22	46.00	22.00	0.00	0.00	0.00
N-C23	48.00	23.00	0.00	0.00	0.00
N-C24	50.00	24.00	0.00	0.00	0.00
N-C25	52.00	25.00	0.00	0.00	0.00
N-C26	54.00	26.00	0.00	0.00	0.00
N-C27	56.00	27.00	0.00	0.00	0.00
N-C28	58.00	28.00	0.00	0.00	0.00
N-C29	60.00	29.00	0.00	0.00	0.00

N-C30	62.00	30.00	0.00	0.00	0.00
O2	0.00	0.00	0.00	2.00	0.00
H2O	2.00	0.00	0.00	1.00	0.00
CO	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00
H2	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00
NO	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00
NO2	0.00	0.00	1.00	2.00	0.00
SO2	0.00	0.00	0.00	2.00	1.00
SO3	0.00	0.00	0.00	3.00	1.00
CARBON	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00
ETILENO	4.00	2.00	0.00	0.00	0.00
PROPILEN	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
ISOBUTIL	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
TR-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
PENTENE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
C-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
T-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
BENZENE	6.00	6.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENE	8.00	7.00	0.00	0.00	0.00
PHENAN	10.00	14.00	0.00	0.00	0.00
FLOURAN	10.00	16.00	0.00	0.00	0.00
CHRYSENE	12.00	18.00	0.00	0.00	0.00
B[A]PYR	12.00	20.00	0.00	0.00	0.00
STYRENE	8.00	8.00	0.00	0.00	0.00
ACETILEN	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
M-ACETIL	4.00	3.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE	6.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-PROP	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
OX-ETHYL	4.00	2.00	0.00	1.00	0.00
C-BUTAN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
ACETONE	6.00	3.00	0.00	1.00	0.00
MEK	8.00	4.00	0.00	1.00	0.00
DIACETYL	6.00	4.00	0.00	2.00	0.00
METOH	4.00	1.00	0.00	1.00	0.00
ETOH	6.00	2.00	0.00	1.00	0.00
1-C3OH	8.00	3.00	0.00	1.00	0.00
I-C3OH	8.00	3.00	0.00	1.00	0.00
N-C4OH	10.00	4.00	0.00	1.00	0.00

I-C4OH 10.00 4.00 0.00 1.00 0.00

NH3 3.00 0.00 1.00 0.00 0.00

*** RESULTS ***	
TEMPERATURE	K 420.15
PRESSURE	ATM 646.42
HEAT DUTY	KW -34673.
VAPOR FRACTION	1.0000
NUMBER OF FLUID PHASES	1

FLUID PHASE MOLE FRACTIONS:

PHASE OF TYPE	VAPOR
PHASE FRACTION	VAPOR
PLACED IN STREAM	PRODUCT
CO2	0.6293286E-04
H2S	0.2952200E-02
N2	0.1712805
CH4	0.5016396
C2H6	0.1072932E-04
C3H8	0.3792382E-08
I-C4	0.2345748E-11
O2	0.000000
CO	0.9149466E-10
H2	0.2964812E-04
NO	0.000000
ETILENO	0.3525610E-14
PROPILEN	0.8287112E-16
ISOBUTIL	0.6096005E-18
ACETILEN	0.8471462E-29
M-ACETIL	0.5642656E-29
C-PROP	0.2759522E-21
NH3	0.5636606E-02
I-C4OH	0.5793392E-20
N-C4OH	0.3358568E-20
I-C3OH	0.7904593E-15
1-C3OH	0.1862941E-16
ETOH	0.5754868E-13
METOH	0.6307290E-11
DIACETYL	0.000000

MEK	0.4867344E-18
ACETONE	0.5399982E-15
C-BUTAN	0.6080752E-25
OX-ETHYL	0.7213666E-30
BUTYNE	0.000000
STYRENE	0.000000
B[A]PYR	0.000000
CHRYSENE	0.000000
FLOURAN	0.000000
PHENAN	0.000000
TOLUENE	0.3910143E-25
BENZENE	0.1244619E-23
T-PENTE	0.9881415E-22
C-PENTE	0.3397319E-22
PENTENE	0.8428295E-23
TR-BUTEN	0.1759602E-18
C-BUTEN	0.1160137E-18
SO3	0.000000
SO2	0.8460358E-19
NO2	0.000000
H2O	0.3183878
N-C30	0.000000
N-C29	0.000000
N-C28	0.000000
N-C27	0.000000
N-C26	0.000000
N-C25	0.000000
N-C24	0.000000
N-C23	0.000000
N-C22	0.000000
N-C21	0.000000
N-C20	0.000000



N-C19	0.000000
N-C18	0.000000
N-C17	0.000000
N-C16	0.000000
N-C15	0.000000
N-C14	0.000000
N-C13	0.000000
N-C12	0.000000
N-C11	0.000000
N-C10	0.000000
N-C9	0.9033595E-30
N-C8	0.6693353E-26
N-C7	0.1737223E-22
N-C6	0.6978874E-19
N-C5	0.3545247E-15
I-C5	0.1289453E-14
N-C4	0.1274797E-11

KMOL/HR                    4569.474

SOLIDS PRESENT AT EQUILIBRIUM, PLACED IN STREAM SOLID

SOLID FLOW RATES (KMOL/HR):  
COQUE                            1841.095

## ANEXO VI. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN SECA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE OAT

BLOCK: R-100      MODEL: RGIBBS

-----  
 INLET STREAMS:            PR-1            AIR-1  
 OUTLET STREAMS:         PRODUCT        SOLID  
 PROPERTY OPTION SET:    PENG-ROB    STANDARD PR EQUATION OF STATE

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR )	2000.00	5453.44	3453.44	0.00000
MASS (KG/HR )	89919.5	89919.5		-0.161833E-15
ENTHALPY (KW )	-37326.3	-54035.4		0.309225

	***	CO2 EQUIVALENT SUMMARY	***
FEED STREAMS CO2E	209512.	KG/HR	
PRODUCT STREAMS CO2E	911865.	KG/HR	
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	702353.	KG/HR	
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR	
TOTAL CO2E PRODUCTION	702353.	KG/HR	

\*\*\* INPUT DATA \*\*\*

### EQUILIBRIUM SPECIFICATIONS:

ONLY CHEMICAL EQUILIBRIUM IS CONSIDERED, THE FLUID PHASE IS VAPOR

SYSTEM TEMPERATURE	K	773.15
TEMPERATURE FOR FREE ENERGY EVALUATION	K	773.15
SYSTEM PRESSURE	ATM	646.42

### FLUID PHASE SPECIES IN PRODUCT LIST:

CO2 H2S N2 CH4 C2H6 C3H8 I-C4 N-C4 I-C5 N-C5 N-C6 N-C7 N-C8 N-C9  
 N-C10 N-C11 N-C12 N-C13 N-C14 N-C15 N-C16 N-C17 N-C18 N-C19 N-C20  
 N-C21 N-C22 N-C23 N-C24 N-C25 N-C26 N-C27 N-C28 N-C29 N-C30 O2 H2O  
 CO H2 NO NO2 SO2 SO3 ETILENO PROPILLEN ISOBUTIL C-BUTEN TR-BUTEN  
 PENTENE C-PENTE T-PENTE BENZENE TOLUENE PHENAN FLOURAN CHRYSENE  
 B[A]PYR STYRENE ACETILEN M-ACETIL BUTYNE C-PROP OX-ETHYL C-BUTAN

ACETONE MEK DIACETYL METOH ETOH 1-C3OH I-C3OH N-C4OH I-C4OH NH3

SOLIDS IN PRODUCT LIST:

CARBON (COQUE)

ATOM MATRIX:

ELEMENT	H	C	N	O	S
CO2	0.00	1.00	0.00	2.00	0.00
H2S	2.00	0.00	0.00	0.00	1.00
N2	0.00	0.00	2.00	0.00	0.00
CH4	4.00	1.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	6.00	2.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	8.00	3.00	0.00	0.00	0.00
I-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
N-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
I-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C6	14.00	6.00	0.00	0.00	0.00
N-C7	16.00	7.00	0.00	0.00	0.00
N-C8	18.00	8.00	0.00	0.00	0.00
N-C9	20.00	9.00	0.00	0.00	0.00
N-C10	22.00	10.00	0.00	0.00	0.00
N-C11	24.00	11.00	0.00	0.00	0.00
N-C12	26.00	12.00	0.00	0.00	0.00
N-C13	28.00	13.00	0.00	0.00	0.00
N-C14	30.00	14.00	0.00	0.00	0.00
N-C15	32.00	15.00	0.00	0.00	0.00
N-C16	34.00	16.00	0.00	0.00	0.00
N-C17	36.00	17.00	0.00	0.00	0.00
N-C18	38.00	18.00	0.00	0.00	0.00
N-C19	40.00	19.00	0.00	0.00	0.00
N-C20	42.00	20.00	0.00	0.00	0.00
N-C21	44.00	21.00	0.00	0.00	0.00
N-C22	46.00	22.00	0.00	0.00	0.00
N-C23	48.00	23.00	0.00	0.00	0.00
N-C24	50.00	24.00	0.00	0.00	0.00
N-C25	52.00	25.00	0.00	0.00	0.00
N-C26	54.00	26.00	0.00	0.00	0.00
N-C27	56.00	27.00	0.00	0.00	0.00
N-C28	58.00	28.00	0.00	0.00	0.00

N-C29	60.00	29.00	0.00	0.00	0.00
N-C30	62.00	30.00	0.00	0.00	0.00
O2	0.00	0.00	0.00	2.00	0.00
H2O	2.00	0.00	0.00	1.00	0.00
CO	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00
H2	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00
NO	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00
NO2	0.00	0.00	1.00	2.00	0.00
SO2	0.00	0.00	0.00	2.00	1.00
SO3	0.00	0.00	0.00	3.00	1.00
CARBON	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00
ETILENO	4.00	2.00	0.00	0.00	0.00
PROPILEN	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
ISOBUTIL	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
TR-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
PENTENE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
C-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
T-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
BENZENE	6.00	6.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENE	8.00	7.00	0.00	0.00	0.00
PHENAN	10.00	14.00	0.00	0.00	0.00
FLOURAN	10.00	16.00	0.00	0.00	0.00
CHRYSENE	12.00	18.00	0.00	0.00	0.00
B[A]PYR	12.00	20.00	0.00	0.00	0.00
STYRENE	8.00	8.00	0.00	0.00	0.00
ACETILEN	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
M-ACETIL	4.00	3.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE	6.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-PROP	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
OX-ETHYL	4.00	2.00	0.00	1.00	0.00
C-BUTAN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
ACETONE	6.00	3.00	0.00	1.00	0.00
MEK	8.00	4.00	0.00	1.00	0.00
DIACETYL	6.00	4.00	0.00	2.00	0.00
METOH	4.00	1.00	0.00	1.00	0.00
ETOH	6.00	2.00	0.00	1.00	0.00
1-C3OH	8.00	3.00	0.00	1.00	0.00

I-C3OH 8.00 3.00 0.00 1.00 0.00  
 N-C4OH 10.00 4.00 0.00 1.00 0.00

I-C4OH 10.00 4.00 0.00 1.00 0.00  
 NH3 3.00 0.00 1.00 0.00 0.00

*** RESULTS ***		
TEMPERATURE	K	773.15
PRESSURE	ATM	646.42
HEAT DUTY	KW	-16709.
VAPOR FRACTION		1.0000
NUMBER OF FLUID PHASES		1

FLUID PHASE MOLE  
 FRACTIONS:

PHASE OF TYPE	VAPOR FRACTION	PRODUCT	
PLACED IN STREAM	1.000000		
CO2	0.2496090E-02		N-C19 0.000000
H2S	0.3743335E-02		N-C20 0.000000
N2	0.2182239		O2 0.4716878E-29
CH4	0.6306230		H2O 0.1212873
C2H6	0.2837403E-03		CO 0.1003648E-03
C3H8	0.6797860E-06		H2 0.1818111E-01
I-C4	0.1055552E-08		NO 0.3142495E-20
N-C4	0.1582578E-08		NO2 0.000000
I-C5	0.4912696E-11		SO2 0.1083424E-12
N-C5	0.3149417E-11		SO3 0.3912771E-24
N-C6	0.5361324E-14		ETILENO 0.4373991E-07
N-C7	0.1003786E-16		PROPILEN 0.1308827E-08
N-C8	0.2047654E-19		ISOBUTIL 0.7325886E-11
N-C9	0.3177336E-22		C-BUTEN 0.3359626E-11
N-C10	0.5690222E-25		TR-BUTEN 0.4032041E-11
N-C11	0.1087484E-27		PENTENE 0.5872857E-14
N-C12	0.1803874E-30		C-PENTE 0.8376567E-14
N-C13	0.000000		T-PENTE 0.1689500E-13
N-C14	0.000000		BENZENE 0.1303554E-13
N-C15	0.000000		TOLUENE 0.6146619E-15
N-C16	0.000000		STYRENE 0.2134420E-20
N-C17	0.000000		ACETILEN 0.7842240E-14
N-C18	0.000000		M-ACETIL 0.1133866E-14
			BUTYNE 0.2436681E-17
			C-PROP 0.2177032E-12
			OX-ETHYL 0.2467965E-17
			C-BUTAN 0.1395237E-15
			ACETONE 0.8997781E-10
			MEK 0.5253910E-12
			DIACETYL 0.1701494E-24

METOH	0.3719951E-07
ETOH	0.6590982E-09
1-C3OH	0.1718807E-11
I-C3OH	0.1186604E-10
N-C4OH	0.2491701E-14
I-C4OH	0.1756006E-14
NH3	0.5060342E-02
B[A]PYR	0.000000
CHRYSENE	0.000000
FLOURAN	0.000000
PHENAN	0.4226823E-29
N-C30	0.000000
N-C29	0.000000
N-C28	0.000000
N-C27	0.000000
N-C26	0.000000
N-C25	0.000000
N-C24	0.000000
N-C23	0.000000
N-C22	0.000000
N-C21	0.000000

KMOL/HR                    3603.738

SOLIDS PRESENT AT EQUILIBRIUM, PLACED IN STREAM SOLID

SOLID FLOW RATES (KMOL/HR):  
COQUE                    1849.700

## ANEXO VII. RESULTADOS DE COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA A CONDICIONES DE OAT

BLOCK: R-100      MODEL: RGIBBS

-----  
 INLET STREAMS:            PR-1            AIR-1            WATER  
 OUTLET STREAMS:         PRODUCT         SOLID  
 PROPERTY OPTION SET:    PENG-ROB    STANDARD PR EQUATION OF STATE

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE DIFF.
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR )	3000.00	6343.11	3343.11	0.430149E-15
MASS (KG/HR )	107935.	107935.		0.134821E-14
ENTHALPY (KW )	-114213.	-118061.		0.325906E-01

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	209512.	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	936334.	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	726822.	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	726822.	KG/HR

\*\*\* INPUT DATA \*\*\*

### EQUILIBRIUM SPECIFICATIONS:

ONLY CHEMICAL EQUILIBRIUM IS CONSIDERED, THE FLUID PHASE IS VAPOR

SYSTEM TEMPERATURE	K	773.15
TEMPERATURE FOR FREE ENERGY EVALUATION	K	773.15
SYSTEM PRESSURE	ATM	646.42

### FLUID PHASE SPECIES IN PRODUCT LIST:

CO2 H2S N2 CH4 C2H6 C3H8 I-C4 N-C4 I-C5 N-C5 N-C6 N-C7 N-C8 N-C9  
 N-C10 N-C11 N-C12 N-C13 N-C14 N-C15 N-C16 N-C17 N-C18 N-C19 N-C20  
 N-C21 N-C22 N-C23 N-C24 N-C25 N-C26 N-C27 N-C28 N-C29 N-C30 O2 H2O  
 CO H2 NO NO2 SO2 SO3 ETILENO PROPILLEN ISOBUTIL C-BUTEN TR-BUTEN  
 PENTENE C-PENTE T-PENTE BENZENE TOLUENE PHENAN FLOURAN CHRYSENE  
 B[A]PYR STYRENE ACETILEN M-ACETIL BUTYNE C-PROP OX-ETHYL C-BUTAN

ACETONE MEK DIACETYL METOH ETOH 1-C3OH I-C3OH N-C4OH I-C4OH NH3

SOLIDS IN PRODUCT LIST:

CARBON (COQUE)

ATOM MATRIX:

ELEMENT	H	C	N	O	S
CO2	0.00	1.00	0.00	2.00	0.00
H2S	2.00	0.00	0.00	0.00	1.00
N2	0.00	0.00	2.00	0.00	0.00
CH4	4.00	1.00	0.00	0.00	0.00
C2H6	6.00	2.00	0.00	0.00	0.00
C3H8	8.00	3.00	0.00	0.00	0.00
I-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
N-C4	10.00	4.00	0.00	0.00	0.00
I-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C5	12.00	5.00	0.00	0.00	0.00
N-C6	14.00	6.00	0.00	0.00	0.00
N-C7	16.00	7.00	0.00	0.00	0.00
N-C8	18.00	8.00	0.00	0.00	0.00
N-C9	20.00	9.00	0.00	0.00	0.00
N-C10	22.00	10.00	0.00	0.00	0.00
N-C11	24.00	11.00	0.00	0.00	0.00
N-C12	26.00	12.00	0.00	0.00	0.00
N-C13	28.00	13.00	0.00	0.00	0.00
N-C14	30.00	14.00	0.00	0.00	0.00
N-C15	32.00	15.00	0.00	0.00	0.00
N-C16	34.00	16.00	0.00	0.00	0.00
N-C17	36.00	17.00	0.00	0.00	0.00
N-C18	38.00	18.00	0.00	0.00	0.00
N-C19	40.00	19.00	0.00	0.00	0.00
N-C20	42.00	20.00	0.00	0.00	0.00
N-C21	44.00	21.00	0.00	0.00	0.00
N-C22	46.00	22.00	0.00	0.00	0.00
N-C23	48.00	23.00	0.00	0.00	0.00
N-C24	50.00	24.00	0.00	0.00	0.00
N-C25	52.00	25.00	0.00	0.00	0.00
N-C26	54.00	26.00	0.00	0.00	0.00
N-C27	56.00	27.00	0.00	0.00	0.00
N-C28	58.00	28.00	0.00	0.00	0.00

N-C29	60.00	29.00	0.00	0.00	0.00
N-C30	62.00	30.00	0.00	0.00	0.00
O2	0.00	0.00	0.00	2.00	0.00
H2O	2.00	0.00	0.00	1.00	0.00
CO	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00
H2	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00
NO	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00
NO2	0.00	0.00	1.00	2.00	0.00
SO2	0.00	0.00	0.00	2.00	1.00
SO3	0.00	0.00	0.00	3.00	1.00
CARBON	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00
ETILENO	4.00	2.00	0.00	0.00	0.00
PROPILEN	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
ISOBUTIL	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
TR-BUTEN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
PENTENE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
C-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
T-PENTE	10.00	5.00	0.00	0.00	0.00
BENZENE	6.00	6.00	0.00	0.00	0.00
TOLUENE	8.00	7.00	0.00	0.00	0.00
PHENAN	10.00	14.00	0.00	0.00	0.00
FLOURAN	10.00	16.00	0.00	0.00	0.00
CHRYSENE	12.00	18.00	0.00	0.00	0.00
B[A]PYR	12.00	20.00	0.00	0.00	0.00
STYRENE	8.00	8.00	0.00	0.00	0.00
ACETILEN	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
M-ACETIL	4.00	3.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE	6.00	4.00	0.00	0.00	0.00
C-PROP	6.00	3.00	0.00	0.00	0.00
OX-ETHYL	4.00	2.00	0.00	1.00	0.00
C-BUTAN	8.00	4.00	0.00	0.00	0.00
ACETONE	6.00	3.00	0.00	1.00	0.00
MEK	8.00	4.00	0.00	1.00	0.00
DIACETYL	6.00	4.00	0.00	2.00	0.00
METOH	4.00	1.00	0.00	1.00	0.00
ETOH	6.00	2.00	0.00	1.00	0.00
1-C3OH	8.00	3.00	0.00	1.00	0.00

I-C3OH 8.00 3.00 0.00 1.00 0.00  
 N-C4OH 10.00 4.00 0.00 1.00 0.00

I-C4OH 10.00 4.00 0.00 1.00 0.00  
 NH3 3.00 0.00 1.00 0.00 0.00

*** RESULTS ***		
TEMPERATURE	K	773.15
PRESSURE	ATM	646.42
HEAT DUTY	KW	-3847.7
VAPOR FRACTION		1.0000
NUMBER OF FLUID PHASES		1

FLUID PHASE MOLE FRACTIONS:

PHASE OF TYPE	VAPOR
PHASE FRACTION	1.000000
PLACED IN STREAM	PRODUCT
CO2	0.1441557E-01
H2S	0.2928700E-02
N2	0.1706162
CH4	0.5052626
C2H6	0.2125214E-03
C3H8	0.4721502E-06
I-C4	0.6749964E-09
N-C4	0.1017891E-08
I-C5	0.2907203E-11
N-C5	0.1872391E-11
N-C6	0.2949049E-14
N-C7	0.5085065E-17
N-C8	0.9474656E-20
N-C9	0.1364104E-22
N-C10	0.2246459E-25
N-C11	0.3924601E-28
N-C12	0.5977962E-31
N-C13	0.000000
N-C14	0.000000
N-C15	0.000000
N-C16	0.000000
N-C17	0.000000
N-C18	0.000000
N-C19	0.000000
N-C20	0.000000

O2	0.2672009E-28
H2O	0.2869171
CO	0.2300034E-03
H2	0.1522318E-01
NO	0.6259784E-20
NO2	0.1123598E-32
SO2	0.5639093E-12
SO3	0.4951567E-23
ETILENO	0.3606531E-07
PROPILEN	0.1007396E-08
ISOBUTIL	0.5201495E-11
C-BUTEN	0.2403835E-11
TR-BUTEN	0.2870126E-11
PENTENE	0.3857979E-14
C-PENTE	0.5528686E-14
T-PENTE	0.1113919E-13
BENZENE	0.1109903E-13
TOLUENE	0.4867044E-15
STYRENE	0.1726017E-20
ACETILEN	0.7144636E-14
M-ACETIL	0.9717251E-15
BUTYNE	0.1924157E-17
C-PROP	0.1694625E-12
OX-ETHYL	0.5239350E-17
C-BUTAN	0.1007769E-15
ACETONE	0.1773569E-09
MEK	0.9533155E-12
DIACETYL	0.8286356E-24
METOH	0.7937777E-07
ETOH	0.1256044E-08
1-C3OH	0.3018909E-11



I-C3OH	0.2059534E-10
N-C4OH	0.4053295E-14
I-C4OH	0.2829386E-14
NH3	0.4193468E-02
B[A]PYR	0.000000
CHRYSENE	0.000000
FLOURAN	0.000000
PHENAN	0.3798603E-29
N-C30	0.000000
N-C29	0.000000
N-C28	0.000000
N-C27	0.000000
N-C26	0.000000
N-C25	0.000000
N-C24	0.000000
N-C23	0.000000
N-C22	0.000000
N-C21	0.000000

KMOL/HR                    4606.139

SOLIDS PRESENT AT EQUILIBRIUM, PLACED IN STREAM SOLID	
SOLID FLOW RATES (KMOL/HR) :	
COQUE	1736.975

## ANEXO VIII. RESULTADOS DE LOS ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

### Combustión Adiabática

Tabla A.1. Combustión Seca Adiabática variando el flujo de aire.								
Caso	Relación molar aire/hidrocarburo	Flujo Molar [kmol/hr]						Temperatura [°C]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	0.0	2502.47	6.37E-03	0.04	37.34	31.09	1629.26	436.51
2	0.5	2341.37	0.85	3.69	239.22	128.14	1784.36	585.50
3	1.0	2171.99	7.24	16.10	417.99	275.84	1934.12	690.27
4	1.5	2007.55	26.64	37.28	566.24	448.32	2057.72	768.42
5	2.0	1856.40	64.43	64.53	683.94	627.42	2143.85	828.96
6	2.5	1721.07	122.37	94.94	775.19	803.12	2191.01	877.29
7	3.0	1601.00	199.67	126.33	845.11	970.83	2202.63	916.89
8	3.5	1494.50	294.38	157.36	898.34	1128.88	2183.62	950.08
9	4.0	1399.72	404.30	187.26	938.62	1277.04	2138.81	978.46
10	4.5	1314.92	527.32	215.65	968.81	1415.73	2072.41	1003.15
11	5.0	1238.63	661.62	242.36	991.10	1545.61	1987.89	1024.95
12	5.5	1169.63	805.62	267.35	1007.12	1667.40	1888.08	1044.43
13	6.0	1106.91	958.00	290.64	1018.15	1781.81	1775.29	1062.03
14	6.5	1049.63	1117.67	312.31	1025.16	1889.50	1651.38	1078.08
15	7.0	997.11	1283.68	332.43	1028.90	1991.05	1517.90	1092.83
16	7.5	948.75	1455.27	351.09	1029.98	2087.01	1376.12	1106.49
17	8.0	904.09	1631.76	368.40	1028.88	2177.84	1227.10	1119.20
18	8.5	862.70	1812.58	384.44	1025.97	2263.96	1071.72	1131.11
19	9.0	824.24	1997.26	399.30	1021.58	2345.75	910.73	1142.32
20	9.5	788.41	2185.37	413.06	1015.96	2423.55	744.77	1152.91
21	10.0	754.95	2376.54	425.79	1009.32	2497.65	574.40	1162.95

22	10.5	723.63	2570.46	437.57	1001.84	2568.33	400.08	1172.51
23	11.0	694.27	2766.84	448.46	993.67	2635.81	222.23	1181.64
24	11.5	666.68	2965.45	458.53	984.92	2700.32	41.20	1190.38
25	12.0	576.61	3081.15	474.47	1047.34	2818.26	0	1204.30
26	12.5	472.70	3166.76	493.17	1134.34	2939.68	0	1220.67
27	13.0	375.31	3244.43	513.21	1226.59	3043.45	0	1238.40
28	13.5	286.21	3311.93	535.06	1325.39	3124.83	0	1257.95
29	14.0	207.61	3366.44	559.35	1432.30	3177.95	0	1279.88
30	14.5	141.85	3404.84	586.84	1548.93	3196.52	0	1304.75
31	15.0	90.79	3424.50	618.32	1676.30	3175.71	0	1332.92
32	15.5	54.66	3424.61	654.39	1814.06	3115.14	0	1364.24
33	16.0	31.45	3407.08	695.15	1960.05	3020.59	0	1397.90
34	16.5	17.67	3375.70	740.33	2111.08	2901.89	0	1432.80
35	17.0	9.87	3334.32	789.51	2264.09	2768.76	0	1467.90
36	17.5	5.55	3285.77	842.39	2416.88	2628.35	0	1502.52
37	18.0	3.15	3231.71	898.85	2568.03	2485.21	0	1536.28
38	18.5	1.81	3173.01	958.88	2716.65	2342.01	0	1569.02
39	19.0	1.05	3110.06	1022.59	2862.17	2200.35	0	1600.68
40	19.5	0.62	3042.97	1090.12	3004.20	2061.20	0	1631.27
41	20.0	0.37	2971.71	1161.63	3142.41	1925.21	0	1660.81
42	20.5	0.22	2896.20	1237.29	3276.56	1792.85	0	1689.34
43	21.0	0.13	2816.30	1317.28	3406.42	1664.46	0	1716.93
44	21.5	0.08	2731.89	1401.74	3531.81	1540.31	0	1743.60
45	22.0	0.05	2642.85	1490.81	3652.54	1420.66	0	1769.42
46	22.5	0.03	2549.09	1584.59	3768.48	1305.69	0	1794.41
47	23.0	0.02	2450.57	1683.13	3879.51	1195.57	0	1818.62
48	23.5	1.02E-02	2347.28	1786.42	3985.55	1090.46	0	1842.07
49	24.0	6.07E-03	2239.30	1894.41	4086.55	990.46	0	1864.79
50	24.5	3.57E-03	2126.76	2006.95	4182.52	895.67	0	1886.79
51	25.0	2.07E-03	2009.85	2123.85	4273.49	806.11	0	1908.10
52	25.5	1.19E-03	1888.75	2244.96	4359.58	721.70	0	1928.72
53	26.0	6.71E-04	1763.52	2370.19	4440.96	642.23	0	1948.71

54	26.5	3.70E-04	1634.04	2499.67	4517.82	567.38	0	1968.12
55	27.0	1.98E-04	1500.06	2633.65	4590.31	496.76	0	1987.02
56	27.5	1.02E-04	1361.34	2772.37	4658.56	430.06	0	2005.46
57	28.0	4.97E-05	1217.86	2915.85	4722.68	367.10	0	2023.47
58	28.5	2.27E-05	1069.83	3063.88	4782.77	307.81	0	2041.05
59	29.0	9.50E-06	917.62	3216.09	4838.95	252.13	0	2058.16
60	29.5	3.51E-06	761.76	3371.95	4891.35	200.03	0	2074.76
61	30.0	1.08E-06	603.00	3530.71	4940.09	151.46	0	2090.72
62	30.5	2.49E-07	442.74	3690.97	4985.12	106.53	0	2105.75
63	31.0	3.46E-08	285.16	3848.55	5025.79	65.91	0	2118.82
64	31.5	2.19E-09	148.68	3985.03	5058.43	33.29	0	2125.41
65	32.0	1.31E-10	73.96	4059.75	5075.34	16.38	0	2116.55
66	32.5	1.92E-11	44.97	4088.74	5081.73	10.00	0	2097.68
67	33.0	4.89E-12	31.18	4102.53	5084.74	6.99	0	2076.30
68	33.5	1.65E-12	23.12	4110.59	5086.49	5.24	0	2054.47
69	34.0	6.51E-13	17.83	4115.88	5087.65	4.08	0	2032.77
70	34.5	2.85E-13	14.09	4119.62	5088.47	3.26	0	2011.41
71	35.0	1.34E-13	11.34	4122.37	5089.08	2.65	0	1990.45
72	35.5	6.63E-14	9.24	4124.47	5089.54	2.19	0	1969.93
73	36.0	3.42E-14	7.61	4126.10	5089.91	1.82	0	1949.86
74	36.5	1.82E-14	6.31	4127.40	5090.20	1.53	0	1930.22
75	37.0	9.95E-15	5.27	4128.44	5090.44	1.29	0	1911.02
76	37.5	5.56E-15	4.43	4129.28	5090.63	1.10	0	1892.24
77	38.0	3.16E-15	3.73	4129.98	5090.79	0.9378	0	1873.86
78	38.5	1.83E-15	3.16	4130.55	5090.93	0.8038	0	1855.89
79	39.0	1.07E-15	2.69	4131.02	5091.04	0.6913	0	1838.29
80	39.5	6.36E-16	2.29	4131.42	5091.13	0.5964	0	1821.07
81	40.0	3.82E-16	1.96	4131.75	5091.21	0.5160	0	1804.21
82	40.5	2.31E-16	1.68	4132.03	5091.28	0.4476	0	1787.70
83	41.0	1.42E-16	1.44	4132.27	5091.34	0.3891	0	1771.53
84	41.5	8.73E-17	1.24	4132.47	5091.39	0.3389	0	1755.68
85	42.0	5.42E-17	1.07	4132.64	5091.43	0.2958	0	1740.15

86	42.5	3.39E-17	0.93	4132.78	5091.47	0.2586	0	1724.92
87	43.0	2.14E-17	0.80	4132.91	5091.50	0.2265	0	1709.99
88	43.5	1.35E-17	0.69	4133.02	5091.53	0.1987	0	1695.35
89	44.0	8.61E-18	0.60	4133.11	5091.56	0.1745	0	1680.99
90	44.5	5.52E-18	0.52	4133.19	5091.58	0.1535	0	1666.89
91	45.0	3.55E-18	0.46	4133.25	5091.59	0.1352	0	1653.06
92	45.5	2.29E-18	0.40	4133.31	5091.61	0.1192	0	1639.49
93	46.0	1.49E-18	0.35	4133.36	5091.62	0.1052	0	1626.16
94	46.5	9.72E-19	0.30	4133.41	5091.64	0.0930	0	1613.07
95	47.0	6.36E-19	0.26	4133.45	5091.65	0.0822	0	1600.22
96	47.5	4.18E-19	0.23	4133.48	5091.66	0.0728	0	1587.59
97	48.0	2.76E-19	0.20	4133.51	5091.67	0.0645	0	1575.19
98	48.5	1.83E-19	0.18	4133.53	5091.67	0.0573	0	1563.00
99	49.0	1.21E-19	0.16	4133.55	5091.68	0.0508	0	1551.01
100	49.5	8.09E-20	0.14	4133.57	5091.68	0.0452	0	1539.23
101	50.0	5.41E-20	0.12	4133.59	5091.69	0.0402	0	1527.65

COMBUSTIÓN SECA ADIABÁTICA  
SENSITIVITY BLOCK: AIR

-----

SAMPLED VARIABLES:

FCH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FCO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FCO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FH2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FH2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FCOAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
TEMP : TEMPERATURE IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED

VARIED VARIABLES:

VARY 1: TOTAL MOLEFLOW IN STREAM AIR SUBSTREAM MIXED  
LOWER LIMIT = 0.0 KMOL/HR  
UPPER LIMIT = 5.0000+04 KMOL/HR  
INCREMENT = 500.0000

-----CASO BASE-----  
VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
FCH4	2171.99	KMOL/HR
FCO	7.24273	KMOL/HR
FCO2	16.1021	KMOL/HR
FH2O	417.993	KMOL/HR
FH2	275.837	KMOL/HR
FCOAL	1934.12	KMOL/HR
TEMP	963.418	K

 Caso base

Tabla A.2. Combustión Húmeda Adiabática variando el flujo de aire.								
Caso	Relación molar aire/hidrocarburo	Flujo Molar [kmol/hr]						Temperatura [°C]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	0.0	2521.23	7.74E-04	3.94	1029.56	3.21	1607.96	278.53
2	0.5	2419.74	0.16	30.95	1185.38	30.56	1681.38	426.37
3	1.0	2322.66	2.31	78.81	1297.52	101.74	1727.55	540.58
4	1.5	2218.46	11.68	135.21	1385.34	213.57	1765.33	629.66
5	2.0	2110.52	34.40	193.61	1455.81	352.04	1791.75	700.17
6	2.5	2004.17	74.41	250.81	1511.41	503.79	1800.70	756.94
7	3.0	1902.82	132.87	305.19	1554.19	659.58	1789.17	803.48
8	3.5	1807.98	209.11	356.03	1586.28	813.98	1756.96	842.36
9	4.0	1720.03	301.54	403.14	1609.62	964.10	1705.44	875.40
10	4.5	1638.73	408.34	446.62	1625.87	1108.55	1636.57	903.92
11	5.0	1563.61	527.74	486.66	1636.39	1246.81	1552.38	928.89
12	5.5	1494.11	658.13	523.51	1642.28	1378.80	1454.75	951.02
13	6.0	1429.68	798.13	557.46	1644.39	1504.69	1345.35	970.85
14	6.5	1369.83	946.53	588.74	1643.43	1624.74	1225.63	988.79
15	7.0	1314.08	1102.32	617.60	1639.93	1739.29	1096.84	1005.14
16	7.5	1262.03	1264.64	644.23	1634.34	1848.68	960.04	1020.16
17	8.0	1213.33	1432.74	668.84	1627.02	1953.22	816.13	1034.05
18	8.5	1167.65	1605.98	691.60	1618.26	2053.25	665.90	1046.96
19	9.0	1124.73	1783.83	712.65	1608.32	2149.06	510.02	1059.02
20	9.5	1084.31	1965.80	732.13	1597.38	2240.92	349.06	1070.34
21	10.0	1046.18	2151.48	750.17	1585.62	2329.08	183.54	1081.01
22	10.5	1010.15	2340.51	766.87	1573.18	2413.77	13.90	1091.10
23	11.0	900.27	2455.71	775.85	1650.02	2556.02	0	1105.35
24	11.5	786.34	2560.76	785.10	1736.48	2697.06	0	1120.16

25	12.0	675.70	2661.48	795.35	1825.27	2829.67	0	1135.33
26	12.5	569.14	2756.96	806.71	1917.07	2951.65	0	1151.10
27	13.0	467.69	2845.99	819.36	2012.74	3060.17	0	1167.74
28	13.5	372.68	2926.98	833.57	2113.31	3151.64	0	1185.57
29	14.0	285.77	2997.86	849.76	2220.06	3221.51	0	1205.03
30	14.5	209.00	3056.03	868.47	2334.47	3264.34	0	1226.58
31	15.0	144.52	3098.65	890.42	2457.95	3274.39	0	1250.70
32	15.5	94.00	3123.23	916.41	2591.38	3247.33	0	1277.70
33	16.0	57.69	3128.87	947.12	2734.33	3182.80	0	1307.47
34	16.5	33.85	3117.02	982.83	2884.77	3085.89	0	1339.40
35	17.0	19.35	3090.93	1023.42	3039.66	2965.51	0	1372.53
36	17.5	10.96	3054.18	1068.56	3196.13	2830.77	0	1405.99
37	18.0	6.23	3009.56	1117.92	3352.03	2688.66	0	1439.12
38	18.5	3.56	2958.85	1171.29	3506.00	2543.72	0	1471.57
39	19.0	2.06	2903.07	1228.58	3657.21	2398.69	0	1503.15
40	19.5	1.20	2842.73	1289.77	3805.15	2255.16	0	1533.79
41	20.0	0.71	2778.07	1354.93	3949.48	2114.13	0	1563.48
42	20.5	0.42	2709.15	1424.14	4089.96	1976.20	0	1592.23
43	21.0	0.25	2635.97	1497.49	4226.40	1841.80	0	1620.08
44	21.5	0.15	2558.46	1575.10	4358.63	1711.24	0	1647.06
45	22.0	0.09	2476.55	1657.07	4486.51	1584.76	0	1673.21
46	22.5	0.05	2390.18	1743.48	4609.92	1462.57	0	1698.56
47	23.0	0.03	2299.29	1834.39	4728.74	1344.83	0	1723.16
48	23.5	0.02	2203.84	1929.85	4842.89	1231.68	0	1747.02
49	24.0	0.01	2103.87	2029.83	4952.29	1123.27	0	1770.19
50	24.5	6.76E-03	1999.43	2134.27	5056.91	1019.70	0	1792.67
51	25.0	3.93E-03	1890.67	2243.04	5156.72	921.08	0	1814.48
52	25.5	2.25E-03	1777.76	2355.95	5251.77	827.46	0	1835.63
53	26.0	1.27E-03	1660.88	2472.82	5342.14	738.81	0	1856.14
54	26.5	7.00E-04	1540.11	2593.60	5427.97	654.96	0	1876.04
55	27.0	3.75E-04	1415.31	2718.39	5509.42	575.60	0	1895.39
56	27.5	1.94E-04	1286.19	2847.52	5586.66	500.34	0	1914.26

57	28.0	9.50E-05	1152.42	2981.29	5659.79	428.86	0	1932.70
58	28.5	4.36E-05	1013.90	3119.81	5728.88	360.98	0	1950.74
59	29.0	1.82E-05	870.78	3262.93	5794.01	296.67	0	1968.38
60	29.5	6.73E-06	723.44	3410.27	5855.24	235.93	0	1985.60
61	30.0	2.06E-06	572.41	3561.30	5912.66	178.79	0	2002.32
62	30.5	4.62E-07	418.54	3715.17	5966.29	125.32	0	2018.39
63	31.0	5.84E-08	264.19	3869.52	6015.73	75.95	0	2033.25
64	31.5	2.28E-09	122.95	4010.76	6057.57	34.15	0	2043.47
65	32.0	5.89E-11	49.64	4084.07	6078.09	13.64	0	2036.36
66	32.5	6.77E-12	28.30	4105.41	6083.91	7.82	0	2017.72
67	33.0	1.62E-12	19.28	4114.43	6086.35	5.38	0	1997.18
68	33.5	5.36E-13	14.21	4119.50	6087.72	4.01	0	1976.52
69	34.0	2.10E-13	10.93	4122.78	6088.61	3.12	0	1956.13
70	34.5	9.21E-14	8.63	4125.08	6089.24	2.49	0	1936.13
71	35.0	4.33E-14	6.94	4126.77	6089.70	2.03	0	1916.54
72	35.5	2.15E-14	5.66	4128.05	6090.06	1.67	0	1897.37
73	36.0	1.11E-14	4.66	4129.05	6090.34	1.39	0	1878.63
74	36.5	5.95E-15	3.87	4129.84	6090.56	1.17	0	1860.30
75	37.0	3.26E-15	3.23	4130.48	6090.74	0.99	0	1842.37
76	37.5	1.83E-15	2.72	4130.99	6090.89	0.84	0	1824.82
77	38.0	1.04E-15	2.29	4131.42	6091.01	0.72	0	1807.65
78	38.5	6.05E-16	1.94	4131.77	6091.11	0.62	0	1790.85
79	39.0	3.56E-16	1.65	4132.06	6091.20	0.53	0	1774.39
80	39.5	2.12E-16	1.41	4132.30	6091.27	0.46	0	1758.28
81	40.0	1.28E-16	1.21	4132.50	6091.33	0.40	0	1742.49
82	40.5	7.76E-17	1.03	4132.68	6091.39	0.34	0	1727.02
83	41.0	4.76E-17	0.89	4132.82	6091.43	0.30	0	1711.86
84	41.5	2.94E-17	0.77	4132.94	6091.47	0.26	0	1696.99
85	42.0	1.83E-17	0.66	4133.05	6091.50	0.23	0	1682.42
86	42.5	1.15E-17	0.57	4133.14	6091.53	0.20	0	1668.12
87	43.0	7.26E-18	0.49	4133.22	6091.55	0.18	0	1654.10
88	43.5	4.61E-18	0.43	4133.28	6091.58	0.15	0	1640.33



89	44.0	2.94E-18	0.37	4133.34	6091.60	0.13	0	1626.83
90	44.5	1.89E-18	0.32	4133.39	6091.61	0.12	0	1613.57
91	45.0	1.22E-18	0.28	4133.43	6091.63	0.10	0	1600.55
92	45.5	7.90E-19	0.25	4133.46	6091.64	0.09	0	1587.76
93	46.0	5.14E-19	0.21	4133.50	6091.65	0.08	0	1575.20
94	46.5	3.36E-19	0.19	4133.52	6091.66	0.07	0	1562.86
95	47.0	2.21E-19	0.16	4133.55	6091.67	0.0638	0	1550.74
96	47.5	1.45E-19	0.14	4133.57	6091.67	0.0565	0	1538.82
97	48.0	9.60E-20	0.13	4133.58	6091.68	0.0501	0	1527.11
98	48.5	6.37E-20	0.11	4133.60	6091.69	0.0445	0	1515.59
99	49.0	4.24E-20	0.10	4133.61	6091.69	0.0395	0	1504.27
100	49.5	2.83E-20	0.09	4133.62	6091.69	0.0351	0	1493.13
101	50.0	1.90E-20	0.07	4133.64	6091.70	0.0313	0	1482.18

COMBUSTIÓN HÚMEDA ADIABÁTICA  
 SENSITIVITY BLOCK: AIR

-----

SAMPLED VARIABLES:

FCH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 FCO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 FCO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 FH2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 FH2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 FCOAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 TEMP : TEMPERATURE IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED

VARIED VARIABLES:

VARY 1: TOTAL MOLEFLOW IN STREAM AIR SUBSTREAM MIXED  
 LOWER LIMIT = 0.0 KMOL/HR  
 UPPER LIMIT = 5.0000+04 KMOL/HR  
 INCREMENT = 500.0000

-----CASO BASE-----  
 VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
 RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
FCH4	2322.66	KMOL/HR
FCO	2.30896	KMOL/HR
FCO2	78.8064	KMOL/HR
FH2O	1297.52	KMOL/HR
FH2	101.740	KMOL/HR
FCOAL	1727.55	KMOL/HR
TEMP	813.734	K

 Caso base

Tabla A.3. Combustión Húmeda Adiabática variando el flujo de agua.

Caso	Relación molar agua/hidrocarburo	Flujo Molar [kmol/hr]						Temperatura [°C]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	0.00	2171.99	7.24	16.10	417.99	275.84	1934.12	690.27
2	0.05	2181.22	7.23	19.12	461.98	263.81	1922.00	682.18
3	0.10	2190.33	7.15	22.26	505.78	252.19	1909.94	674.16
4	0.15	2199.32	7.00	25.50	549.44	240.95	1897.97	666.20
5	0.20	2208.18	6.80	28.82	592.99	230.08	1886.09	658.30
6	0.25	2216.88	6.56	32.21	636.47	219.58	1874.35	650.47
7	0.30	2225.42	6.29	35.63	679.90	209.45	1862.76	642.70
8	0.35	2233.79	6.00	39.06	723.31	199.66	1851.34	634.99
9	0.40	2241.98	5.70	42.50	766.73	190.22	1840.12	627.34
10	0.45	2249.97	5.38	45.93	810.20	181.13	1829.11	619.75
11	0.50	2257.76	5.06	49.32	853.73	172.36	1818.34	612.22
12	0.55	2265.34	4.75	52.67	897.35	163.93	1807.83	604.75
13	0.60	2272.69	4.43	55.96	941.08	155.81	1797.59	597.35
14	0.65	2279.82	4.13	59.18	984.95	148.01	1787.64	590.01
15	0.70	2286.70	3.83	62.31	1028.98	140.52	1778.00	582.74
16	0.75	2293.34	3.54	65.35	1073.19	133.34	1768.69	575.53
17	0.80	2299.73	3.27	68.29	1117.59	126.45	1759.73	568.40
18	0.85	2305.86	3.01	71.11	1162.21	119.85	1751.12	561.33
19	0.90	2311.73	2.76	73.81	1207.06	113.54	1742.88	554.34
20	0.95	2317.33	2.53	76.38	1252.16	107.50	1735.02	547.42
21	1.00	2322.66	2.31	78.81	1297.52	101.74	1727.55	540.58
22	1.05	2327.72	2.10	81.09	1343.15	96.24	1720.49	533.82
23	1.10	2332.50	1.91	83.23	1389.07	91.00	1713.84	527.15
24	1.15	2337.00	1.74	85.21	1435.29	86.01	1707.61	520.55

25	1.20	2341.21	1.58	87.03	1481.81	81.26	1701.80	514.04
26	1.25	2345.15	1.43	88.68	1528.65	76.74	1696.42	507.62
27	1.30	2348.81	1.29	90.18	1575.80	72.45	1691.47	501.29
28	1.35	2352.20	1.16	91.50	1623.28	68.38	1686.95	495.06
29	1.40	2355.30	1.05	92.66	1671.08	64.53	1682.87	488.92
30	1.45	2358.13	0.94	93.64	1719.21	60.87	1679.21	482.87
31	1.50	2360.70	0.85	94.46	1767.68	57.42	1675.98	476.92
32	1.55	2363.00	0.76	95.11	1816.47	54.15	1673.17	471.07
33	1.60	2365.04	0.68	95.59	1865.58	51.06	1670.78	465.33
34	1.65	2366.82	0.61	95.91	1915.02	48.14	1668.80	459.68
35	1.70	2368.36	0.55	96.06	1964.77	45.39	1667.22	454.14
36	1.75	2369.66	0.49	96.06	2014.83	42.79	1666.03	448.71
37	1.80	2370.72	0.44	95.91	2065.19	40.35	1665.22	443.38
38	1.85	2371.55	0.39	95.60	2115.85	38.04	1664.78	438.16
39	1.90	2372.17	0.35	95.15	2166.79	35.88	1664.69	433.05
40	1.95	2372.58	0.31	94.56	2218.00	33.84	1664.95	428.04
41	2.00	2372.79	0.28	93.85	2269.47	31.92	1665.53	423.14
42	2.05	2372.82	0.25	93.00	2321.19	30.12	1666.42	418.35
43	2.10	2372.66	0.22	92.04	2373.14	28.42	1667.60	413.67
44	2.15	2372.33	0.20	90.96	2425.32	26.83	1669.07	409.10
45	2.20	2371.83	0.18	89.78	2477.70	25.34	1670.79	404.63
46	2.25	2371.19	0.16	88.51	2530.27	23.94	1672.76	400.27
47	2.30	2370.41	0.14	87.14	2583.02	22.62	1674.95	396.01
48	2.35	2369.50	0.13	85.69	2635.93	21.39	1677.36	391.86
49	2.40	2368.46	0.11	84.17	2688.99	20.23	1679.96	387.82
50	2.45	2367.31	0.10	82.58	2742.18	19.14	1682.73	383.88
51	2.50	2366.07	0.09	80.93	2795.49	18.12	1685.66	380.03
52	2.55	2364.73	0.08	79.23	2848.89	17.16	1688.74	376.29
53	2.60	2363.30	0.07	77.49	2902.39	16.27	1691.93	372.65
54	2.65	2361.80	0.07	75.71	2955.96	15.42	1695.24	369.10
55	2.70	2360.24	0.06	73.89	3009.59	14.63	1698.65	365.65
56	2.75	2358.62	0.05	72.06	3063.27	13.89	1702.13	362.29

57	2.80	2356.94	0.05	70.21	3116.98	13.19	1705.68	359.03
58	2.85	2355.23	0.04	68.34	3170.71	12.54	1709.28	355.85
59	2.90	2353.47	0.04	66.47	3224.46	11.92	1712.93	352.76
60	2.95	2351.69	0.04	64.60	3278.20	11.34	1716.60	349.76
61	3.00	2349.88	0.03	62.74	3331.94	10.80	1720.29	346.84
62	3.05	2348.06	0.03	60.88	3385.65	10.29	1723.99	344.00
63	3.10	2346.22	0.03	59.03	3439.34	9.81	1727.69	341.25
64	3.15	2344.38	2.35E-02	57.21	3493.00	9.35	1731.37	338.57
65	3.20	2342.53	2.13E-02	55.40	3546.61	8.93	1735.04	335.96
66	3.25	2340.68	1.94E-02	53.62	3600.17	8.53	1738.68	333.43
67	3.30	2338.84	1.76E-02	51.87	3653.68	8.15	1742.29	330.97
68	3.35	2337.00	1.60E-02	50.15	3707.13	7.79	1745.87	328.58
69	3.40	2335.17	1.45E-02	48.46	3760.51	7.46	1749.40	326.26
70	3.45	2333.36	1.33E-02	46.80	3813.83	7.14	1752.88	324.00
71	3.50	2331.56	1.21E-02	45.18	3867.07	6.84	1756.31	323.03
72	3.55	2329.78	1.10E-02	43.60	3920.24	6.56	1759.68	322.49
73	3.60	2328.02	1.01E-02	42.05	3973.33	6.29	1763.00	321.96
74	3.65	2326.27	9.23E-03	40.55	4026.34	6.04	1766.26	321.42
75	3.70	2324.55	8.45E-03	39.08	4079.27	5.80	1769.46	320.88
76	3.75	2322.85	7.74E-03	37.66	4132.12	5.57	1772.59	320.34
77	3.80	2321.17	7.10E-03	36.27	4184.89	5.36	1775.66	319.80
78	3.85	2319.51	6.52E-03	34.93	4237.57	5.15	1778.67	319.25
79	3.90	2317.87	6.00E-03	33.63	4290.18	4.96	1781.61	318.71
80	3.95	2316.26	5.52E-03	32.37	4342.70	4.78	1784.49	318.17
81	4.00	2314.67	5.08E-03	31.15	4395.13	4.60	1787.31	317.62
82	4.05	2313.11	4.69E-03	29.97	4447.49	4.44	1790.06	317.08
83	4.10	2311.56	4.32E-03	28.83	4499.77	4.28	1792.75	316.54
84	4.15	2310.04	3.99E-03	27.73	4551.97	4.13	1795.37	315.99
85	4.20	2308.54	3.69E-03	26.67	4604.09	3.99	1797.94	315.44
86	4.25	2307.06	3.42E-03	25.65	4656.14	3.86	1800.45	314.90
87	4.30	2305.59	3.16E-03	24.66	4708.11	3.73	1802.90	314.35
88	4.35	2304.15	2.93E-03	23.71	4760.01	3.61	1805.30	313.81

89	4.40	2302.75	2.74E-03	22.83	4811.78	3.50	1807.59	313.26
90	4.45	2301.35	2.55E-03	21.97	4863.49	3.39	1809.85	312.71
91	4.50	2299.93	2.35E-03	21.07	4915.30	3.27	1812.17	312.17
92	4.55	2298.56	2.18E-03	20.25	4966.93	3.17	1814.37	311.62
93	4.60	2297.20	2.03E-03	19.47	5018.50	3.07	1816.51	311.08
94	4.65	2295.85	1.89E-03	18.72	5070.00	2.98	1818.62	310.53
95	4.70	2294.52	1.76E-03	18.00	5121.45	2.89	1820.67	309.99
96	4.75	2293.20	1.64E-03	17.30	5172.84	2.81	1822.69	309.45
97	4.80	2291.89	1.54E-03	16.63	5224.17	2.73	1824.67	308.90
98	4.85	2290.60	1.44E-03	16.02	5275.40	2.65	1826.58	308.36
99	4.90	2289.30	1.35E-03	15.41	5326.63	2.58	1828.49	307.82
100	4.95	2288.01	1.25E-03	14.79	5377.86	2.50	1830.40	307.28
101	5.00	2286.74	1.18E-03	14.25	5428.94	2.44	1832.21	306.74

COMBUSTIÓN HÚMEDA ADIABÁTICA  
SENSITIVITY BLOCK: H2O

-----  
VARIACIÓN DEL FLUJO MOLAR CORRIENTE WATER

SAMPLED VARIABLES:


FCH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FCO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FCO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FH2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FH2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
FCOAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
TEMP : TEMPERATURE IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED

VARIED VARIABLES:

VARY 1: TOTAL MOLEFLOW IN STREAM WATER SUBSTREAM MIXED  
LOWER LIMIT = 0.0 KMOL/HR  
UPPER LIMIT = 5000.0000 KMOL/HR  
INCREMENT = 50.0000

-----CASO BASE-----  
VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
FCH4	2322.66	KMOL/HR
FCO	2.30896	KMOL/HR
FCO2	78.8064	KMOL/HR
FH2O	1297.52	KMOL/HR
FH2	101.740	KMOL/HR
FCOAL	1727.55	KMOL/HR
TEMP	813.734	K

 Caso base

## Combustión Isotérmica

**Tabla A.4. Combustión Seca Isotérmica variando el flujo de aire.**

Caso	Relación molar aire/hidrocarburo	Flujo Molar [kmol/hr]						Q [MW]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	0.0	2519.63	3.09E-08	1.21E-03	37.44	0.1757	1613.98	-14.47
2	0.5	2409.67	1.99E-07	0.05	246.35	0.1789	1723.90	-27.02
3	1.0	2302.66	3.65E-07	0.14	455.16	0.1817	1830.83	-39.62
4	1.5	2196.36	5.36E-07	0.28	663.88	0.1838	1936.99	-52.25
5	2.0	2090.54	7.15E-07	0.46	872.52	0.1854	2042.64	-64.89
6	2.5	1985.10	9.04E-07	0.69	1081.06	0.1863	2147.87	-77.55
7	3.0	1879.98	1.11E-06	0.97	1289.51	0.1867	2252.71	-90.22
8	3.5	1775.15	1.32E-06	1.30	1497.83	0.1866	2357.21	-102.89
9	4.0	1670.61	1.56E-06	1.71	1706.02	0.1858	2461.35	-115.57
10	4.5	1566.33	1.81E-06	2.20	1914.04	0.1845	2565.14	-128.26
11	5.0	1462.33	2.09E-06	2.79	2121.87	0.1827	2668.56	-140.95
12	5.5	1358.61	2.40E-06	3.50	2329.45	0.1802	2771.58	-153.64
13	6.0	1255.18	2.74E-06	4.36	2536.73	0.1770	2874.15	-166.33
14	6.5	1152.09	3.12E-06	5.41	2743.62	0.1733	2976.19	-179.02
15	7.0	1049.38	3.55E-06	6.71	2950.03	0.1688	3077.61	-191.71
16	7.5	947.12	4.04E-06	8.33	3155.78	0.1636	3178.25	-204.39
17	8.0	845.43	4.60E-06	10.39	3360.66	0.1576	3277.88	-217.08
18	8.5	744.47	5.26E-06	13.07	3564.30	0.1507	3376.16	-229.75
19	9.0	644.53	6.05E-06	16.63	3766.17	0.1428	3472.54	-242.41
20	9.5	546.05	7.01E-06	21.55	3965.35	0.1339	3566.11	-255.06
21	10.0	449.83	8.22E-06	28.60	4160.24	0.1238	3655.28	-267.67
22	10.5	357.32	9.82E-06	39.27	4347.91	0.1124	3737.12	-280.23
23	11.0	271.26	1.20E-05	56.32	4522.80	0.0999	3806.13	-292.71

24	11.5	196.46	1.50E-05	84.65	4675.13	0.0870	3852.60	-305.02
25	12.0	138.93	1.91E-05	130.44	4792.55	0.0751	3864.34	-317.09
26	12.5	100.81	2.40E-05	195.94	4870.56	0.0659	3836.96	-328.89
27	13.0	77.63	2.94E-05	276.68	4918.09	0.0598	3779.40	-340.48
28	13.5	63.44	3.48E-05	366.59	4947.25	0.0558	3703.68	-351.97
29	14.0	54.26	4.02E-05	461.65	4966.14	0.0533	3617.79	-363.40
30	14.5	47.97	4.55E-05	559.66	4979.11	0.0517	3526.08	-374.80
31	15.0	43.41	5.07E-05	659.46	4988.51	0.0506	3430.83	-386.20
32	15.5	39.97	5.58E-05	760.41	4995.62	0.0500	3333.33	-397.59
33	16.0	37.27	6.08E-05	862.12	5001.20	0.0496	3234.31	-408.99
34	16.5	35.10	6.57E-05	964.37	5005.69	0.0494	3134.24	-420.39
35	17.0	33.30	7.06E-05	1067.01	5009.41	0.0493	3033.40	-431.80
36	17.5	31.78	7.55E-05	1169.94	5012.55	0.0493	2931.98	-443.21
37	18.0	30.48	8.03E-05	1273.10	5015.24	0.0494	2830.13	-454.63
38	18.5	29.35	8.51E-05	1376.42	5017.59	0.0495	2727.94	-466.05
39	19.0	28.35	8.99E-05	1479.89	5019.66	0.0497	2625.47	-477.48
40	19.5	27.46	9.46E-05	1583.47	5021.51	0.0499	2522.79	-488.91
41	20.0	26.65	9.93E-05	1687.13	5023.17	0.0501	2419.92	-500.35
42	20.5	25.92	1.04E-04	1790.88	5024.68	0.0503	2316.91	-511.79
43	21.0	25.26	1.09E-04	1894.69	5026.06	0.0506	2213.77	-523.24
44	21.5	24.64	1.13E-04	1998.55	5027.33	0.0509	2110.52	-534.69
45	22.0	24.07	1.18E-04	2102.46	5028.51	0.0511	2007.18	-546.15
46	22.5	23.54	1.23E-04	2206.42	5029.61	0.0514	1903.75	-557.61
47	23.0	23.04	1.27E-04	2310.40	5030.63	0.0516	1800.26	-569.07
48	23.5	22.58	1.32E-04	2414.42	5031.60	0.0519	1696.71	-580.54
49	24.0	22.14	1.36E-04	2518.47	5032.50	0.0522	1593.10	-592.00
50	24.5	21.73	1.41E-04	2622.54	5033.36	0.0524	1489.44	-603.48
51	25.0	21.33	1.46E-04	2726.63	5034.17	0.0527	1385.74	-614.95
52	25.5	20.96	1.50E-04	2830.75	5034.94	0.0530	1282.00	-626.43
53	26.0	20.60	1.55E-04	2934.88	5035.68	0.0532	1178.23	-637.91
54	26.5	20.26	1.59E-04	3039.03	5036.38	0.0535	1074.42	-649.39
55	27.0	19.94	1.64E-04	3143.19	5037.05	0.0537	970.58	-660.87

56	27.5	19.62	1.68E-04	3247.37	5037.70	0.0540	866.71	-672.36
57	28.0	19.32	1.73E-04	3351.56	5038.31	0.0542	762.82	-683.85
58	28.5	19.03	1.77E-04	3455.77	5038.91	0.0544	658.91	-695.34
59	29.0	18.76	1.82E-04	3559.98	5039.48	0.0547	554.97	-706.83
60	29.5	18.49	1.86E-04	3664.20	5040.03	0.0549	451.02	-718.32
61	30.0	18.23	1.91E-04	3768.44	5040.56	0.0551	347.04	-729.81
62	30.5	17.98	1.95E-04	3872.68	5041.08	0.0553	243.05	-741.31
63	31.0	17.74	2.00E-04	3976.93	5041.58	0.0555	139.04	-752.81
64	31.5	17.50	2.04E-04	4081.19	5042.06	0.0557	35.01	-764.30
65	32.0	0	1.18E-27	4133.71	5091.73	0	0	-774.64
66	32.5	0	2.98E-28	4133.71	5091.73	8.03E-26	0	-774.56
67	33.0	0	2.17E-28	4133.71	5091.73	6.01E-26	0	-774.49
68	33.5	0	1.80E-28	4133.71	5091.73	5.03E-26	0	-774.42
69	34.0	0	1.58E-28	4133.71	5091.73	4.45E-26	0	-774.35
70	34.5	0	1.43E-28	4133.71	5091.73	4.06E-26	0	-774.28
71	35.0	0	1.32E-28	4133.71	5091.73	3.77E-26	0	-774.22
72	35.5	0	1.23E-28	4133.71	5091.73	3.56E-26	0	-774.16
73	36.0	0	1.17E-28	4133.71	5091.73	3.39E-26	0	-774.10
74	36.5	0	1.11E-28	4133.71	5091.73	3.25E-26	0	-774.04
75	37.0	0	1.06E-28	4133.71	5091.73	3.13E-26	0	-773.98
76	37.5	0	1.02E-28	4133.71	5091.73	3.04E-26	0	-773.93
77	38.0	0	9.90E-29	4133.71	5091.73	2.95E-26	0	-773.87
78	38.5	0	9.60E-29	4133.71	5091.73	2.88E-26	0	-773.82
79	39.0	0	9.33E-29	4133.71	5091.73	2.82E-26	0	-773.77
80	39.5	0	9.10E-29	4133.71	5091.73	2.76E-26	0	-773.72
81	40.0	0	8.89E-29	4133.71	5091.73	2.71E-26	0	-773.67
82	40.5	0	8.69E-29	4133.71	5091.73	2.67E-26	0	-773.63
83	41.0	0	8.52E-29	4133.71	5091.73	2.63E-26	0	-773.58
84	41.5	0	8.36E-29	4133.71	5091.73	2.60E-26	0	-773.53
85	42.0	0	8.22E-29	4133.71	5091.73	2.56E-26	0	-773.49
86	42.5	0	8.08E-29	4133.71	5091.73	2.53E-26	0	-773.45
87	43.0	0	7.96E-29	4133.71	5091.73	2.51E-26	0	-773.41



88	43.5	0	7.84E-29	4133.71	5091.73	2.48E-26	0	-773.37
89	44.0	0	7.74E-29	4133.71	5091.73	2.46E-26	0	-773.33
90	44.5	0	7.64E-29	4133.71	5091.73	2.44E-26	0	-773.29
91	45.0	0	7.55E-29	4133.71	5091.73	2.42E-26	0	-773.25
92	45.5	0	7.46E-29	4133.71	5091.73	2.40E-26	0	-773.21
93	46.0	0	7.38E-29	4133.71	5091.73	2.39E-26	0	-773.18
94	46.5	0	7.30E-29	4133.71	5091.73	2.37E-26	0	-773.14
95	47.0	0	7.23E-29	4133.71	5091.73	2.36E-26	0	-773.11
96	47.5	0	7.16E-29	4133.71	5091.73	2.35E-26	0	-773.07
97	48.0	0	7.09E-29	4133.71	5091.73	2.33E-26	0	-773.04
98	48.5	0	7.03E-29	4133.71	5091.73	2.32E-26	0	-773.01
99	49.0	0	6.97E-29	4133.71	5091.73	2.31E-26	0	-772.98
100	49.5	0	6.92E-29	4133.71	5091.73	2.30E-26	0	-772.94
101	50.0	0	6.86E-29	4133.71	5091.73	2.29E-26	0	-772.91

COMBUSTIÓN SECA ISOTÉRMICA  
SENSITIVITY BLOCK: AIR

-----

SAMPLED VARIABLES:

CH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
CO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
CO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
H2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
H2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
COAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
Q : SENTENCE=RESULTS VARIABLE=NET-DUTY IN UOS  
BLOCK R-100

VARIED VARIABLES:

VARY 1: TOTAL MOLEFLOW IN STREAM AIR SUBSTREAM MIXED  
LOWER LIMIT = 0.0 KMOL/HR  
UPPER LIMIT = 5.0000+04 KMOL/HR  
INCREMENT = 500.0000

-----CASO BASE-----  
VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
CH4	2302.66	KMOL/HR
CO	0.365319E-06	KMOL/HR
CO2	0.140324	KMOL/HR
H2O	455.159	KMOL/HR
H2	0.181673	KMOL/HR
COAL	1830.83	KMOL/HR
Q	-39.6234	MW



Caso base

Tabla A.5. Combustión Seca Isotérmica variando la temperatura del reactor.

Caso	Temperatura [°C]	Flujo Molar [kmol/hr]						Q [MW]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	10.0	2298.90	4.3592E-14	1.66E-04	455.4397	0.0004	1834.81	-47.53
2	20.0	2299.68	2.4019E-13	3.64E-04	455.4393	0.0008	1834.03	-46.96
3	30.0	2300.31	1.1755E-12	7.46E-04	455.4385	0.0014	1833.39	-46.38
4	40.0	2300.83	5.1677E-12	1.44E-03	455.4371	0.0025	1832.87	-45.81
5	50.0	2301.26	2.0611E-11	2.65E-03	455.4347	0.0042	1832.44	-45.23
6	60.0	2301.60	7.5238E-11	4.63E-03	455.4307	0.0068	1832.09	-44.65
7	70.0	2301.88	2.5331E-10	7.77E-03	455.4245	0.011	1831.80	-44.08
8	80.0	2302.11	7.9209E-10	1.25E-02	455.4150	0.017	1831.57	-43.50
9	90.0	2302.28	2.3146E-09	1.95E-02	455.4011	0.025	1831.38	-42.92
10	100.0	2302.42	6.3558E-09	2.93E-02	455.3814	0.037	1831.23	-42.35
11	110.0	2302.52	1.6483E-08	4.28E-02	455.3543	0.054	1831.11	-41.77
12	120.0	2302.59	4.0553E-08	6.09E-02	455.3182	0.076	1831.01	-41.19
13	130.0	2302.63	9.5036E-08	8.46E-02	455.2709	0.106	1830.93	-40.61
14	140.0	2302.65	2.1294E-07	0.11	455.2105	0.147	1830.87	-40.03
15	147.0	2302.66	3.6532E-07	0.14	455.1594	0.182	1830.83	-39.62
16	160.0	2302.64	9.4644E-07	0.20	455.0421	0.266	1830.77	-38.87
17	170.0	2302.60	1.8884E-06	0.26	454.9299	0.351	1830.74	-38.28
18	180.0	2302.55	3.6443E-06	0.32	454.7964	0.458	1830.70	-37.70
19	190.0	2302.48	6.8183E-06	0.40	454.6398	0.591	1830.67	-37.11
20	200.0	2302.40	1.2393E-05	0.49	454.4583	0.755	1830.64	-36.53
21	210.0	2302.30	2.1924E-05	0.59	454.2505	0.955	1830.61	-35.93
22	220.0	2302.18	3.7818E-05	0.71	454.0153	1.196	1830.59	-35.34
23	230.0	2302.05	6.3709E-05	0.84	453.7515	1.485	1830.56	-34.75
24	240.0	2301.88	1.0497E-04	0.99	453.4584	1.829	1830.55	-34.15

25	250.0	2301.70	1.6938E-04	1.15	453.1355	2.236	1830.54	-33.54
26	260.0	2301.48	2.6801E-04	1.33	452.7825	2.712	1830.54	-32.94
27	270.0	2301.24	4.1634E-04	1.52	452.3994	3.268	1830.56	-32.33
28	280.0	2300.95	6.3560E-04	1.73	451.9863	3.913	1830.60	-31.72
29	290.0	2300.63	9.5456E-04	1.95	451.5437	4.655	1830.66	-31.10
30	300.0	2300.25	1.4116E-03	2.18	451.0722	5.506	1830.75	-30.48
31	310.0	2299.83	2.0571E-03	2.43	450.5724	6.476	1830.87	-29.85
32	320.0	2299.35	2.9565E-03	2.70	450.0453	7.578	1831.04	-29.22
33	330.0	2298.80	4.1939E-03	2.97	449.4918	8.822	1831.25	-28.58
34	340.0	2298.19	5.8757E-03	3.26	448.9130	10.222	1831.52	-27.94
35	350.0	2297.49	8.1355E-03	3.56	448.3101	11.791	1831.85	-27.29
36	360.0	2296.71	1.1139E-02	3.87	447.6842	13.541	1832.25	-26.64
37	370.0	2295.84	1.5090E-02	4.19	447.0366	15.487	1832.73	-25.98
38	380.0	2294.87	2.0236E-02	4.53	446.3685	17.643	1833.29	-25.31
39	390.0	2293.80	2.6878E-02	4.87	445.6809	20.024	1833.95	-24.64
40	400.0	2292.61	3.5373E-02	5.21	444.9751	22.645	1834.71	-23.96
41	410.0	2291.29	4.6149E-02	5.57	444.2521	25.520	1835.57	-23.27
42	420.0	2289.85	5.9706E-02	5.93	443.5129	28.667	1836.56	-22.57
43	430.0	2288.26	7.6634E-02	6.30	442.7582	32.100	1837.68	-21.87
44	440.0	2286.53	9.7616E-02	6.68	441.9889	35.835	1838.92	-21.16
45	450.0	2284.65	1.2344E-01	7.06	441.2056	39.889	1840.32	-20.44
46	460.0	2282.60	1.5502E-01	7.44	440.4086	44.278	1841.86	-19.71
47	470.0	2280.38	1.9338E-01	7.82	439.5983	49.020	1843.56	-18.98
48	480.0	2277.97	2.3970E-01	8.21	438.7748	54.129	1845.43	-18.23
49	490.0	2275.39	2.9531E-01	8.60	437.9380	59.624	1847.48	-17.47
50	500.0	2272.60	3.6169E-01	9.00	437.0877	65.520	1849.70	-16.71
51	510.0	2269.61	4.4051E-01	9.39	436.2232	71.835	1852.11	-15.93
52	520.0	2266.41	5.3362E-01	9.78	435.3440	78.585	1854.72	-15.15
53	530.0	2262.99	6.4306E-01	10.17	434.4491	85.787	1857.53	-14.35
54	540.0	2259.34	7.7109E-01	10.57	433.5374	93.458	1860.55	-13.55
55	550.0	2255.46	9.2019E-01	10.96	432.6075	101.613	1863.78	-12.73
56	560.0	2251.34	1.0931	11.34	431.6577	110.270	1867.22	-11.90

57	570.0	2246.97	1.2926	11.73	430.6862	119.445	1870.89	-11.06
58	580.0	2242.35	1.5221	12.11	429.6909	129.152	1874.79	-10.20
59	590.0	2237.46	1.7849	12.49	428.6694	139.409	1878.92	-9.34
60	600.0	2232.31	2.0848	12.87	427.6191	150.231	1883.28	-8.46
61	610.0	2226.88	2.4256	13.24	426.5372	161.633	1887.87	-7.56
62	620.0	2221.18	2.8117	13.60	425.4206	173.630	1892.71	-6.66
63	630.0	2215.19	3.2474	13.96	424.2660	186.237	1897.78	-5.74
64	640.0	2208.91	3.7376	14.32	423.0699	199.468	1903.10	-4.81
65	650.0	2202.33	4.2873	14.66	421.8284	213.337	1908.66	-3.86
66	660.0	2195.46	4.9018	15.00	420.5375	227.858	1914.46	-2.89
67	670.0	2188.28	5.5864	15.33	419.1932	243.045	1920.50	-1.92
68	680.0	2180.80	6.3471	15.65	417.7910	258.909	1926.78	-0.92
69	690.0	2173.00	7.1896	15.96	416.3264	275.464	1933.31	0.09
70	700.0	2164.89	8.1203	16.26	414.7946	292.722	1940.07	1.11
71	710.0	2156.46	9.1454	16.55	413.1909	310.694	1947.06	2.15
72	720.0	2147.71	10.2713	16.83	411.5103	329.392	1954.29	3.21
73	730.0	2138.64	11.5047	17.09	409.7478	348.825	1961.75	4.29
74	740.0	2129.24	12.8523	17.34	407.8983	369.004	1969.43	5.38
75	750.0	2119.52	14.3207	17.58	405.9567	389.939	1977.34	6.49
76	760.0	2109.47	15.9168	17.80	403.9179	411.638	1985.46	7.62
77	770.0	2099.08	17.6472	18.01	401.7769	434.110	1993.80	8.77
78	780.0	2088.37	19.5184	18.20	399.5286	457.362	2002.35	9.93
79	790.0	2077.32	21.5371	18.37	397.1682	481.402	2011.10	11.12
80	800.0	2065.94	23.7094	18.52	394.6911	506.235	2020.05	12.32
81	810.0	2054.22	26.0415	18.65	392.0926	531.868	2029.20	13.54
82	820.0	2042.17	28.5389	18.76	389.3686	558.306	2038.54	14.79
83	830.0	2029.79	31.2071	18.86	386.5152	585.551	2048.07	16.05
84	840.0	2017.08	34.0509	18.93	383.5286	613.608	2057.77	17.33
85	850.0	2004.03	37.0748	18.98	380.4057	642.480	2067.65	18.63
86	860.0	1990.65	40.2825	19.00	377.1437	672.166	2077.71	19.95
87	870.0	1976.94	43.6773	19.01	373.7402	702.669	2087.93	21.29
88	880.0	1962.90	47.2618	18.99	370.1934	733.987	2098.32	22.66

89	890.0	1948.53	51.0376	18.95	366.5022	766.120	2108.88	24.04
90	900.0	1933.84	55.0058	18.88	362.6657	799.063	2119.59	25.44
91	910.0	1918.82	59.1665	18.79	358.6841	832.814	2130.46	26.86
92	920.0	1903.48	63.5190	18.68	354.5579	867.368	2141.49	28.30
93	930.0	1887.82	68.0615	18.54	350.2884	902.719	2152.67	29.77
94	940.0	1871.85	72.7916	18.38	345.8777	938.858	2164.01	31.25
95	950.0	1855.56	77.7055	18.20	341.3285	975.778	2175.51	32.75
96	960.0	1838.96	82.7989	17.99	336.6441	1013.469	2187.16	34.27
97	970.0	1822.06	88.0661	17.77	331.8289	1051.918	2198.96	35.81
98	980.0	1804.85	93.5007	17.52	326.8875	1091.112	2210.93	37.37
99	990.0	1787.34	99.0955	17.26	321.8257	1131.038	2223.05	38.94
100	1000.0	1769.54	104.8420	16.97	316.6495	1171.680	2235.34	40.54

COMBUSTIÓN SECA ISOTÉRMICA  
SENSITIVITY BLOCK: TEMP

-----

SAMPLED VARIABLES:

CH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
CO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
CO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
H2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
H2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
COAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
Q : SENTENCE=RESULTS VARIABLE=NET-DUTY IN UOS  
BLOCK R-100

VARIED VARIABLES:

VARY 1: SENTENCE=PARAM VARIABLE=TEMP IN UOS BLOCK  
R-100  
LOWER LIMIT = 283.1500 K  
UPPER LIMIT = 1273.1500 K  
INCREMENT = 10.0000

-----CASO BASE-----  
VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
CH4	2302.66	KMOL/HR
CO	0.365319E-06	KMOL/HR
CO2	0.140324	KMOL/HR
H2O	455.159	KMOL/HR
H2	0.181673	KMOL/HR
COAL	1830.83	KMOL/HR
Q	-39.6234	MW



Caso base

Tabla A.6. Combustión Húmeda Isotérmica variando el flujo de aire.								
Caso	Relación molar aire/hidrocarburo	Flujo Molar [kmol/hr]						Q [MW]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	0.0	2518.85	2.44E-07	0.13	1037.19	0.1238	1614.61	-9.19
2	0.5	2401.16	3.23E-07	0.19	1246.05	0.1297	1732.24	-21.94
3	1.0	2292.23	4.18E-07	0.29	1454.86	0.1355	1841.10	-34.67
4	1.5	2185.25	5.27E-07	0.41	1663.62	0.1405	1947.97	-47.40
5	2.0	2079.31	6.51E-07	0.56	1872.32	0.1447	2053.77	-60.13
6	2.5	1974.04	7.88E-07	0.75	2080.94	0.1482	2158.85	-72.85
7	3.0	1869.27	9.42E-07	0.98	2289.48	0.1509	2263.40	-85.57
8	3.5	1764.88	1.11E-06	1.26	2497.91	0.1529	2367.51	-98.29
9	4.0	1660.83	1.30E-06	1.61	2706.23	0.1541	2471.23	-111.02
10	4.5	1557.06	1.51E-06	2.02	2914.40	0.1547	2574.59	-123.73
11	5.0	1453.57	1.75E-06	2.52	3122.39	0.1546	2677.58	-136.45
12	5.5	1350.35	2.01E-06	3.14	3330.17	0.1538	2780.20	-149.17
13	6.0	1247.41	2.30E-06	3.88	3537.68	0.1524	2882.40	-161.88
14	6.5	1144.77	2.63E-06	4.80	3744.84	0.1502	2984.11	-174.60
15	7.0	1042.49	3.00E-06	5.94	3951.56	0.1472	3085.26	-187.30
16	7.5	940.61	3.43E-06	7.37	4157.70	0.1435	3185.71	-200.01
17	8.0	839.26	3.92E-06	9.20	4363.04	0.1390	3285.24	-212.70
18	8.5	738.57	4.50E-06	11.59	4567.26	0.1335	3383.54	-225.39
19	9.0	638.81	5.20E-06	14.79	4769.86	0.1271	3480.11	-238.07
20	9.5	540.40	6.06E-06	19.22	4969.99	0.1195	3574.08	-250.72
21	10.0	444.09	7.16E-06	25.65	5166.14	0.1108	3663.97	-263.34
22	10.5	351.29	8.60E-06	35.49	5355.46	0.1008	3746.93	-275.91
23	11.0	264.74	1.06E-05	51.54	5532.37	0.0896	3817.43	-288.38
24	11.5	189.51	1.34E-05	78.96	5686.52	0.0778	3865.24	-300.68

25	12.0	132.28	1.74E-05	124.65	5804.13	0.0670	3876.78	-312.69
26	12.5	95.41	2.22E-05	191.16	5880.12	0.0589	3847.14	-324.39
27	13.0	73.78	2.74E-05	273.30	5924.85	0.0537	3786.63	-335.87
28	13.5	60.91	3.28E-05	364.46	5951.53	0.0506	3708.34	-347.24
29	14.0	52.77	3.80E-05	460.50	5968.44	0.0488	3620.44	-358.55
30	14.5	47.27	4.32E-05	559.27	5979.89	0.0478	3527.16	-369.85
31	15.0	43.35	4.83E-05	659.68	5988.07	0.0473	3430.68	-381.15
32	15.5	40.42	5.33E-05	761.12	5994.20	0.0471	3332.17	-392.45
33	16.0	38.15	5.82E-05	863.24	5998.95	0.0472	3232.32	-403.76
34	16.5	36.33	6.32E-05	965.84	6002.76	0.0473	3131.54	-415.08
35	17.0	34.83	6.80E-05	1068.77	6005.89	0.0476	3030.10	-426.41
36	17.5	33.58	7.28E-05	1171.96	6008.52	0.0480	2928.17	-437.75
37	18.0	32.51	7.76E-05	1275.34	6010.77	0.0484	2825.86	-449.11
38	18.5	31.58	8.24E-05	1378.86	6012.72	0.0488	2723.27	-460.47
39	19.0	30.76	8.71E-05	1482.50	6014.44	0.0493	2620.46	-471.83
40	19.5	30.02	9.19E-05	1586.23	6015.98	0.0497	2517.46	-483.21
41	20.0	29.36	9.66E-05	1690.03	6017.37	0.0502	2414.32	-494.60
42	20.5	28.76	1.01E-04	1793.90	6018.64	0.0507	2311.05	-505.99
43	21.0	28.20	1.06E-04	1897.82	6019.80	0.0512	2207.69	-517.39
44	21.5	27.69	1.11E-04	2001.78	6020.87	0.0517	2104.24	-528.80
45	22.0	27.21	1.15E-04	2105.78	6021.87	0.0522	2000.71	-540.21
46	22.5	26.76	1.20E-04	2209.81	6022.81	0.0527	1897.13	-551.63
47	23.0	26.34	1.24E-04	2313.87	6023.69	0.0531	1793.49	-563.05
48	23.5	25.94	1.29E-04	2417.96	6024.53	0.0536	1689.81	-574.48
49	24.0	25.56	1.34E-04	2522.06	6025.32	0.0541	1586.08	-585.91
50	24.5	25.20	1.38E-04	2626.19	6026.07	0.0545	1482.32	-597.35
51	25.0	24.86	1.43E-04	2730.33	6026.79	0.0550	1378.53	-608.79
52	25.5	24.53	1.47E-04	2834.48	6027.48	0.0554	1274.70	-620.24
53	26.0	24.21	1.52E-04	2938.65	6028.14	0.0558	1170.85	-631.69
54	26.5	23.90	1.56E-04	3042.83	6028.78	0.0562	1066.97	-643.14
55	27.0	23.61	1.61E-04	3147.03	6029.39	0.0566	963.08	-654.60
56	27.5	23.32	1.66E-04	3251.23	6029.98	0.0570	859.16	-666.06

57	28.0	23.05	1.70E-04	3355.44	6030.56	0.0574	755.22	-677.52
58	28.5	22.78	1.75E-04	3459.66	6031.11	0.0578	651.26	-688.98
59	29.0	22.52	1.79E-04	3563.90	6031.65	0.0582	547.29	-700.45
60	29.5	22.27	1.84E-04	3668.13	6032.17	0.0586	443.31	-711.92
61	30.0	22.02	1.88E-04	3772.38	6032.68	0.0589	339.31	-723.39
62	30.5	21.78	1.93E-04	3876.63	6033.17	0.0593	235.29	-734.87
63	31.0	21.55	1.97E-04	3980.89	6033.66	0.0596	131.27	-746.34
64	31.5	21.33	2.02E-04	4085.16	6034.13	0.0599	27.23	-757.82
65	32.0	0	0	4133.71	6091.73	0	0	-768.19
66	32.5	0	2.65E-28	4133.71	6091.73	8.75E-26	0	-768.09
67	33.0	0	2.12E-28	4133.71	6091.73	6.42E-26	0	-767.99
68	33.5	0	1.76E-28	4133.71	6091.73	5.39E-26	0	-767.90
69	34.0	0	1.54E-28	4133.71	6091.73	4.77E-26	0	-767.81
70	34.5	0	1.40E-28	4133.71	6091.73	4.36E-26	0	-767.72
71	35.0	0	1.29E-28	4133.71	6091.73	4.06E-26	0	-767.63
72	35.5	0	1.21E-28	4133.71	6091.73	3.84E-26	0	-767.55
73	36.0	0	1.14E-28	4133.71	6091.73	3.66E-26	0	-767.47
74	36.5	0	1.09E-28	4133.71	6091.73	3.51E-26	0	-767.39
75	37.0	0	1.04E-28	4133.71	6091.73	3.39E-26	0	-767.31
76	37.5	0	1.01E-28	4133.71	6091.73	3.29E-26	0	-767.24
77	38.0	0	9.72E-29	4133.71	6091.73	3.21E-26	0	-767.17
78	38.5	0	9.43E-29	4133.71	6091.73	3.13E-26	0	-767.10
79	39.0	0	9.17E-29	4133.71	6091.73	3.07E-26	0	-767.03
80	39.5	0	8.94E-29	4133.71	6091.73	3.01E-26	0	-766.96
81	40.0	0	8.73E-29	4133.71	6091.73	2.96E-26	0	-766.90
82	40.5	0	8.55E-29	4133.71	6091.73	2.92E-26	0	-766.83
83	41.0	0	8.38E-29	4133.71	6091.73	2.88E-26	0	-766.77
84	41.5	0	8.22E-29	4133.71	6091.73	2.84E-26	0	-766.71
85	42.0	0	8.08E-29	4133.71	6091.73	2.81E-26	0	-766.65
86	42.5	0	7.95E-29	4133.71	6091.73	2.78E-26	0	-766.60
87	43.0	0	7.83E-29	4133.71	6091.73	2.76E-26	0	-766.54
88	43.5	0	7.72E-29	4133.71	6091.73	2.73E-26	0	-766.49



89	44.0	0	7.62E-29	4133.71	6091.73	2.71E-26	0	-766.43
90	44.5	0	7.52E-29	4133.71	6091.73	2.69E-26	0	-766.38
91	45.0	0	7.43E-29	4133.71	6091.73	2.67E-26	0	-766.33
92	45.5	0	7.35E-29	4133.71	6091.73	2.65E-26	0	-766.28
93	46.0	0	7.27E-29	4133.71	6091.73	2.64E-26	0	-766.23
94	46.5	0	7.20E-29	4133.71	6091.73	2.63E-26	0	-766.19
95	47.0	0	7.13E-29	4133.71	6091.73	2.61E-26	0	-766.14
96	47.5	0	7.06E-29	4133.71	6091.73	2.60E-26	0	-766.09
97	48.0	0	7.00E-29	4133.71	6091.73	2.59E-26	0	-766.05
98	48.5	0	6.94E-29	4133.71	6091.73	2.58E-26	0	-766.01
99	49.0	0	6.88E-29	4133.71	6091.73	2.57E-26	0	-765.96
100	49.5	0	6.83E-29	4133.71	6091.73	2.56E-26	0	-765.92
101	50.0	0	6.78E-29	4133.71	6091.73	2.55E-26	0	-765.88

COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA  
 SENSITIVITY BLOCK: AIR

-----

SAMPLED VARIABLES:

CH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 CO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 CO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 H2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 H2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 COAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 Q : SENTENCE=RESULTS VARIABLE=NET-DUTY IN UOS  
 BLOCK R-100

VARIED VARIABLES:

VARY 1: TOTAL MOLEFLOW IN STREAM AIR SUBSTREAM MIXED  
 LOWER LIMIT = 0.0 KMOL/HR  
 UPPER LIMIT = 5.0000+04 KMOL/HR  
 INCREMENT = 500.0000

-----CASO BASE-----  
 VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
 RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
CH4	2292.23	KMOL/HR
CO	0.418082E-06	KMOL/HR
CO2	0.287570	KMOL/HR
H2O	1454.86	KMOL/HR
H2	0.135476	KMOL/HR
COAL	1841.10	KMOL/HR
Q	-34.6732	MW



Caso base

Tabla A.7. Combustión Húmeda Isotérmica variando el flujo de agua.								
Caso	Relación molar agua/hidrocarburo	Flujo Molar [kmol/hr]						Q [MW]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	0.0	2302.66	3.65E-07	0.1403	455.16	0.1817	1830.83	-39.62
2	0.1	2301.98	4.04E-07	0.1779	555.08	0.1767	1831.47	-39.03
3	0.2	2301.24	4.32E-07	0.2111	655.02	0.1718	1832.18	-38.46
4	0.3	2300.43	4.51E-07	0.2389	754.96	0.1670	1832.96	-37.91
5	0.4	2299.54	4.61E-07	0.2610	854.92	0.1622	1833.82	-37.39
6	0.5	2298.57	4.65E-07	0.2773	954.89	0.1575	1834.78	-36.88
7	0.6	2297.50	4.63E-07	0.2881	1054.86	0.1529	1835.83	-36.40
8	0.7	2296.35	4.57E-07	0.2939	1154.85	0.1484	1836.98	-35.94
9	0.8	2295.09	4.46E-07	0.2954	1254.85	0.1440	1838.23	-35.50
10	0.9	2293.72	4.33E-07	0.2930	1354.85	0.1397	1839.60	-35.08
11	1.0	2292.23	4.18E-07	0.2876	1454.86	0.1355	1841.10	-34.67
12	1.1	2290.62	4.01E-07	0.2796	1554.88	0.1314	1842.71	-34.29
13	1.2	2288.88	3.83E-07	0.2697	1654.90	0.1274	1844.46	-33.92
14	1.3	2286.99	3.65E-07	0.2583	1754.92	0.1236	1846.36	-33.58
15	1.4	2284.96	3.46E-07	0.2459	1854.95	0.1199	1848.40	-33.25
16	1.5	2282.78	3.27E-07	0.2329	1954.97	0.1163	1850.59	-32.93
17	1.6	2280.42	3.08E-07	0.2197	2055.00	0.1129	1852.96	-32.63
18	1.7	2277.90	2.90E-07	0.2063	2155.03	0.1096	1855.49	-32.35
19	1.8	2275.20	2.72E-07	0.1932	2255.05	0.1064	1858.21	-32.08
20	1.9	2272.30	2.55E-07	0.1804	2355.08	0.1033	1861.11	-31.83
21	2.0	2269.21	2.39E-07	0.1680	2455.10	0.1003	1864.22	-31.59
22	2.1	2265.90	2.23E-07	0.1562	2555.13	0.0975	1867.53	-31.36
23	2.2	2262.39	2.09E-07	0.1449	2655.15	0.0947	1871.06	-31.15
24	2.3	2258.65	1.95E-07	0.1343	2755.17	0.0921	1874.81	-30.94

25	2.4	2254.67	1.82E-07	0.1243	2855.19	0.0896	1878.79	-30.75
26	2.5	2250.46	1.70E-07	0.1149	2955.21	0.0872	1883.01	-30.57
27	2.6	2245.99	1.58E-07	0.1062	3055.23	0.0849	1887.49	-30.41
28	2.7	2241.27	1.47E-07	0.0981	3155.24	0.0827	1892.21	-30.25
29	2.8	2236.28	1.37E-07	0.0905	3255.26	0.0805	1897.21	-30.10
30	2.9	2231.02	1.28E-07	0.0835	3355.27	0.0785	1902.47	-29.97
31	3.0	2225.48	1.19E-07	0.0771	3455.29	0.0765	1908.02	-29.84
32	3.1	2219.65	1.11E-07	0.0711	3555.30	0.0746	1913.85	-29.72
33	3.2	2213.53	1.04E-07	0.0656	3655.31	0.0728	1919.98	-29.62
34	3.3	2207.10	9.65E-08	0.0605	3755.32	0.0710	1926.41	-29.52
35	3.4	2222.35	1.25E-07	0.0876	3855.26	0.0757	1911.14	-29.23
36	3.5	2258.27	1.23E-07	0.1383	3955.16	0.0812	1875.17	-28.75
37	3.6	2293.21	9.35E-07	1.9142	4051.61	0.1268	1838.49	-28.26
38	3.7	2314.66	4.17E-06	14.0439	4127.35	0.1727	1804.91	-12.22
39	3.8	2315.75	4.34E-06	15.0420	4225.36	0.1739	1802.83	-11.35
40	3.9	2316.80	4.51E-06	16.0271	4323.39	0.1748	1800.79	-10.50
41	4.0	2317.83	4.66E-06	17.0046	4421.43	0.1756	1798.79	-9.66
42	4.1	2318.84	4.81E-06	17.9783	4519.48	0.1762	1796.80	-8.83
43	4.2	2319.84	4.95E-06	18.9507	4617.54	0.1767	1794.83	-8.01
44	4.3	2320.84	5.09E-06	19.9240	4715.59	0.1771	1792.86	-7.19
45	4.4	2321.83	5.23E-06	20.8995	4813.64	0.1774	1790.90	-6.38
46	4.5	2322.81	5.35E-06	21.8784	4911.68	0.1776	1788.93	-5.58
47	4.6	2323.80	5.48E-06	22.8616	5009.72	0.1778	1786.96	-4.77
48	4.7	2324.78	5.60E-06	23.8498	5107.74	0.1779	1784.99	-3.98
49	4.8	2326.43	5.83E-06	25.3742	5204.69	0.1798	1781.82	-3.05
50	4.9	2328.33	6.10E-06	27.1271	5301.19	0.1822	1778.16	-2.09
51	5.0	2330.28	6.37E-06	28.9269	5397.59	0.1845	1774.42	-1.13
52	5.1	2332.26	6.64E-06	30.7736	5493.89	0.1868	1770.59	-0.17
53	5.2	2334.28	6.92E-06	32.6667	5590.11	0.1891	1766.68	0.78
54	5.3	2336.33	7.19E-06	34.6061	5686.23	0.1913	1762.69	1.73
55	5.4	2338.43	7.47E-06	36.5914	5782.26	0.1935	1758.61	2.68
56	5.5	2340.57	7.75E-06	38.6224	5878.20	0.1956	1754.44	3.62

57	5.6	2342.74	8.02E-06	40.6987	5974.04	0.1977	1750.19	4.57
58	5.7	2344.95	8.31E-06	42.8201	6069.80	0.1998	1745.85	5.51
59	5.8	2347.21	8.59E-06	44.9861	6165.47	0.2018	1741.43	6.45
60	5.9	2349.50	8.87E-06	47.1964	6261.05	0.2038	1736.93	7.39
61	6.0	2351.84	9.16E-06	49.4506	6356.54	0.2058	1732.34	8.32
62	6.1	2354.21	9.44E-06	51.7485	6451.94	0.2077	1727.67	9.26
63	6.2	2356.62	9.73E-06	54.0895	6547.26	0.2097	1722.92	10.19
64	6.3	2359.08	1.00E-05	56.4735	6642.49	0.2116	1718.08	11.12
65	6.4	2361.57	1.03E-05	58.8999	6737.64	0.2135	1713.16	12.06
66	6.5	2364.10	1.06E-05	61.3683	6832.70	0.2153	1708.16	12.99
67	6.6	2366.67	1.09E-05	63.8785	6927.68	0.2172	1703.08	13.92
68	6.7	2369.28	1.12E-05	66.4300	7022.58	0.2190	1697.92	14.84
69	6.8	2371.93	1.15E-05	69.0225	7117.40	0.2208	1692.68	15.77
70	6.9	2374.62	1.18E-05	71.6554	7212.13	0.2226	1687.36	16.70
71	7.0	2377.34	1.21E-05	74.3286	7306.78	0.2243	1681.97	17.63
72	7.1	2380.10	1.24E-05	77.0415	7401.36	0.2261	1676.49	18.55
73	7.2	2382.90	1.27E-05	79.7937	7495.85	0.2278	1670.94	19.48
74	7.3	2385.74	1.30E-05	82.5850	7590.27	0.2296	1665.31	20.40
75	7.4	2388.61	1.33E-05	85.4149	7684.61	0.2313	1659.61	21.32
76	7.5	2391.52	1.36E-05	88.2829	7778.87	0.2330	1653.83	22.25
77	7.6	2394.47	1.39E-05	91.1888	7873.06	0.2347	1647.98	23.17
78	7.7	2397.45	1.42E-05	94.1321	7967.18	0.2363	1642.05	24.09
79	7.8	2400.47	1.45E-05	97.1124	8061.22	0.2380	1636.05	25.02
80	7.9	2403.53	1.48E-05	100.1295	8155.18	0.2396	1629.98	25.94
81	8.0	2406.61	1.51E-05	103.1827	8249.07	0.2413	1623.84	26.86
82	8.1	2409.74	1.55E-05	106.2719	8342.90	0.2429	1617.63	27.78
83	8.2	2412.90	1.58E-05	109.3966	8436.65	0.2446	1611.35	28.70
84	8.3	2416.09	1.61E-05	112.5565	8530.33	0.2462	1604.99	29.62
85	8.4	2419.31	1.64E-05	115.7511	8623.94	0.2478	1598.57	30.54
86	8.5	2422.57	1.67E-05	118.9801	8717.48	0.2494	1592.09	31.46
87	8.6	2425.87	1.70E-05	122.2431	8810.95	0.2510	1585.53	32.38
88	8.7	2429.19	1.74E-05	125.5398	8904.36	0.2525	1578.91	33.30

89	8.8	2432.55	1.77E-05	128.8697	8997.70	0.2541	1572.22	34.22
90	8.9	2435.94	1.80E-05	132.2326	9090.97	0.2557	1565.47	35.14
91	9.0	2439.36	1.83E-05	135.6281	9184.18	0.2572	1558.65	36.06
92	9.1	2442.81	1.86E-05	139.0557	9277.33	0.2588	1551.77	36.98
93	9.2	2446.29	1.90E-05	142.5152	9370.41	0.2604	1544.83	37.90
94	9.3	2449.81	1.93E-05	146.0062	9463.43	0.2619	1537.83	38.81
95	9.4	2453.35	1.96E-05	149.5284	9556.38	0.2634	1530.76	39.73
96	9.5	2456.93	1.99E-05	153.0814	9649.28	0.2650	1523.63	40.65
97	9.6	2460.53	2.03E-05	156.6648	9742.11	0.2665	1516.44	41.57
98	9.7	2464.17	2.06E-05	160.2784	9834.88	0.2680	1509.19	42.48
99	9.8	2467.83	2.09E-05	163.9217	9927.60	0.2695	1501.89	43.40
100	9.9	2471.52	2.12E-05	167.5945	10020.25	0.2710	1494.52	44.32
101	10.0	2475.25	2.16E-05	171.2964	10112.85	0.2725	1487.10	45.24

COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA  
 SENSITIVITY BLOCK: H2O

-----

SAMPLED VARIABLES:

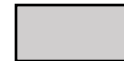
CH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 CO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 CO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 H2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 H2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 COAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
 Q : SENTENCE=RESULTS VARIABLE=NET-DUTY IN UOS  
 BLOCK R-100

VARIED VARIABLES:

VARY 1: TOTAL MOLEFLOW IN STREAM WATER SUBSTREAM  
 MIXED  
 LOWER LIMIT = 0.0 KMOL/HR  
 UPPER LIMIT = 1.0000+04 KMOL/HR  
 INCREMENT = 100.0000

-----CASO BASE-----  
 VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
 RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
CH4	2292.23	KMOL/HR
CO	0.418082E-06	KMOL/HR
CO2	0.287570	KMOL/HR
H2O	1454.86	KMOL/HR
H2	0.135476	KMOL/HR
COAL	1841.10	KMOL/HR
Q	-34.6732	MW



Caso base

Tabla A.8. Combustión Húmeda Isotérmica variando la temperatura del reactor.								
Caso	Temperatura [°C]	Flujo Molar [kmol/hr]						Q [MW]
		CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	COAL (COQUE)	
1	10.0	2308.17	2.06E-12	1.30E-01	1455.18	0.0006	1825.41	-38.87
2	20.0	2307.76	8.23E-12	1.64E-01	1455.11	0.0011	1825.78	-38.56
3	30.0	2307.24	2.91E-11	1.96E-01	1455.05	0.0019	1826.26	-38.29
4	40.0	2247.61	1.51E-12	4.03E-04	1455.44	0.0013	1886.08	-44.05
5	50.0	2257.78	7.25E-12	9.73E-04	1455.44	0.0023	1875.92	-43.16
6	60.0	2265.53	3.13E-11	2.18E-03	1455.44	0.0039	1868.16	-42.28
7	70.0	2271.56	1.23E-10	4.57E-03	1455.43	0.0064	1862.12	-41.40
8	80.0	2276.35	4.42E-10	9.05E-03	1455.42	0.0102	1857.32	-40.53
9	90.0	2280.19	1.47E-09	1.70E-02	1455.41	0.0159	1853.46	-39.65
10	100.0	2283.31	4.56E-09	3.06E-02	1455.38	0.0242	1850.32	-38.78
11	110.0	2285.88	1.32E-08	5.27E-02	1455.33	0.04	1847.73	-37.90
12	120.0	2288.00	3.62E-08	8.73E-02	1455.27	0.05	1845.55	-37.03
13	130.0	2289.79	9.36E-08	1.40E-01	1455.16	0.08	1843.71	-36.15
14	140.0	2291.30	2.30E-07	2.16E-01	1455.01	0.11	1842.11	-35.28
15	147.0	2292.23	4.18E-07	0.288	1454.86	0.14	1841.10	-34.67
16	150.0	2292.60	5.37E-07	0.324	1454.79	0.15	1840.68	-34.41
17	160.0	2293.74	1.20E-06	0.472	1454.50	0.20	1839.38	-33.55
18	170.0	2294.76	2.57E-06	0.671	1454.10	0.28	1838.15	-32.68
19	180.0	2295.69	5.31E-06	0.931	1453.58	0.37	1836.93	-31.82
20	190.0	2296.57	1.06E-05	1.264	1452.91	0.48	1835.70	-30.96
21	200.0	2297.42	2.03E-05	1.680	1452.08	0.63	1834.42	-30.10
22	210.0	2298.26	3.79E-05	2.191	1451.06	0.81	1833.04	-29.25
23	220.0	2299.12	6.86E-05	2.808	1449.82	1.03	1831.54	-28.40
24	230.0	2300.01	1.21E-04	3.540	1448.36	1.30	1829.89	-27.55

25	240.0	2300.94	2.07E-04	4.397	1446.65	1.62	1828.07	-26.70
26	250.0	2301.93	3.47E-04	5.386	1444.67	2.01	1826.07	-25.85
27	260.0	2302.97	5.68E-04	6.512	1442.41	2.47	1823.86	-25.01
28	270.0	2304.08	9.11E-04	7.781	1439.88	3.02	1821.44	-24.16
29	280.0	2305.26	1.43E-03	9.194	1437.05	3.65	1818.82	-23.31
30	290.0	2306.50	2.21E-03	10.753	1433.93	4.39	1815.97	-22.47
31	300.0	2307.80	3.34E-03	12.456	1430.52	5.24	1812.92	-21.62
32	310.0	2309.16	4.98E-03	14.301	1426.83	6.22	1809.67	-20.77
33	320.0	2310.56	7.31E-03	16.284	1422.87	7.35	1806.24	-19.92
34	330.0	2312.00	1.06E-02	18.399	1418.63	8.63	1802.63	-19.06
35	340.0	2313.46	1.51E-02	20.639	1414.15	10.07	1798.86	-18.21
36	350.0	2314.94	2.12E-02	22.998	1409.42	11.71	1794.97	-17.35
37	360.0	2316.41	2.94E-02	25.467	1404.48	13.54	1790.96	-16.49
38	370.0	2317.86	4.04E-02	28.036	1399.33	15.59	1786.87	-15.62
39	380.0	2319.27	5.48E-02	30.697	1393.99	17.87	1782.71	-14.75
40	390.0	2320.63	7.35E-02	33.440	1388.49	20.40	1778.52	-13.88
41	400.0	2321.93	9.77E-02	36.254	1382.83	23.21	1774.32	-13.00
42	410.0	2323.13	0.13	39.132	1377.05	26.29	1770.14	-12.11
43	420.0	2324.23	0.17	42.062	1371.15	29.69	1765.99	-11.22
44	430.0	2325.21	0.22	45.036	1365.15	33.40	1761.91	-10.33
45	440.0	2326.05	0.28	48.046	1359.07	37.46	1757.92	-9.42
46	450.0	2326.73	0.35	51.082	1352.92	41.89	1754.03	-8.51
47	460.0	2327.25	0.45	54.137	1346.72	46.69	1750.28	-7.60
48	470.0	2327.58	0.56	57.203	1340.47	51.90	1746.69	-6.67
49	480.0	2327.71	0.70	60.273	1334.20	57.52	1743.26	-5.74
50	490.0	2327.62	0.86	63.341	1327.90	63.59	1740.02	-4.80
51	500.0	2327.31	1.06	66.400	1321.58	70.12	1736.98	-3.85
52	510.0	2326.76	1.29	69.445	1315.26	77.13	1734.15	-2.89
53	520.0	2325.95	1.57	72.470	1308.93	84.64	1731.55	-1.92
54	530.0	2324.88	1.90	75.471	1302.60	92.68	1729.19	-0.94
55	540.0	2323.53	2.28	78.443	1296.27	101.25	1727.08	0.06
56	550.0	2321.90	2.73	81.381	1289.95	110.39	1725.22	1.06

57	560.0	2319.98	3.25	84.283	1283.63	120.11	1723.62	2.08
58	570.0	2317.75	3.84	87.143	1277.31	130.43	1722.28	3.11
59	580.0	2315.21	4.53	89.958	1270.99	141.37	1721.20	4.15
60	590.0	2312.35	5.32	92.725	1264.67	152.94	1720.40	5.21
61	600.0	2309.16	6.22	95.441	1258.34	165.18	1719.85	6.28
62	610.0	2305.64	7.24	98.102	1251.99	178.09	1719.57	7.37
63	620.0	2301.79	8.40	100.705	1245.63	191.70	1719.55	8.47
64	630.0	2297.59	9.71	103.247	1239.24	206.02	1719.78	9.59
65	640.0	2293.04	11.18	105.724	1232.81	221.07	1720.27	10.72
66	650.0	2288.15	12.83	108.134	1226.34	236.87	1720.99	11.88
67	660.0	2282.89	14.67	110.474	1219.82	253.43	1721.95	13.05
68	670.0	2277.28	16.72	112.739	1213.24	270.78	1723.12	14.24
69	680.0	2271.30	19.00	114.926	1206.59	288.92	1724.52	15.45
70	690.0	2264.96	21.52	117.033	1199.85	307.88	1726.11	16.69
71	700.0	2258.26	24.31	119.055	1193.02	327.67	1727.89	17.94
72	710.0	2251.19	27.38	120.988	1186.08	348.31	1729.84	19.22
73	720.0	2243.75	30.75	122.830	1179.02	369.81	1731.95	20.51
74	730.0	2235.94	34.44	124.576	1171.84	392.18	1734.21	21.83
75	740.0	2227.75	38.48	126.221	1164.51	415.44	1736.60	23.18
76	750.0	2219.20	42.88	127.763	1157.03	439.60	1739.10	24.55
77	760.0	2210.28	47.65	129.197	1149.39	464.67	1741.70	25.94
78	770.0	2200.99	52.84	130.519	1141.56	490.67	1744.38	27.37
79	780.0	2191.33	58.44	131.725	1133.54	517.61	1747.12	28.81
80	790.0	2181.30	64.49	132.811	1125.32	545.50	1749.91	30.29
81	800.0	2170.91	71.01	133.772	1116.88	574.35	1752.72	31.79
82	810.0	2160.14	78.00	134.606	1108.22	604.17	1755.56	33.32
83	820.0	2149.01	85.50	135.308	1099.32	634.97	1758.39	34.88
84	830.0	2137.52	93.52	135.874	1090.17	666.75	1761.20	36.47
85	840.0	2125.67	102.07	136.302	1080.76	699.53	1763.98	38.09
86	850.0	2113.45	111.17	136.588	1071.08	733.31	1766.71	39.74
87	860.0	2100.87	120.84	136.729	1061.13	768.10	1769.39	41.42
88	870.0	2087.94	131.09	136.724	1050.89	803.90	1771.99	43.13



89	880.0	2074.65	141.92	136.569	1040.37	840.71	1774.51	44.88
90	890.0	2061.00	153.36	136.264	1029.54	878.54	1776.95	46.65
91	900.0	2047.01	165.39	135.807	1018.42	917.39	1779.29	48.45
92	910.0	2032.66	178.03	135.198	1007.00	957.25	1781.52	50.29
93	920.0	2017.96	191.28	134.437	995.27	998.13	1783.66	52.16
94	930.0	2002.91	205.14	133.525	983.23	1040.03	1785.68	54.06
95	940.0	1987.52	219.61	132.463	970.89	1082.93	1787.60	55.99
96	950.0	1971.79	234.67	131.252	958.25	1126.83	1789.41	57.95
97	960.0	1955.71	250.32	129.897	945.31	1171.73	1791.12	59.94
98	970.0	1939.30	266.55	128.399	932.07	1217.61	1792.74	61.96
99	980.0	1922.55	283.34	126.763	918.55	1264.46	1794.27	64.01
100	990.0	1905.47	300.68	124.995	904.76	1312.27	1795.73	66.09
101	1000.0	1888.05	318.53	123.099	890.69	1361.03	1797.13	68.20

COMBUSTIÓN HÚMEDA ISOTÉRMICA  
SENSITIVITY BLOCK: TEMP

-----

SAMPLED VARIABLES:

CH4 : CH4 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
CO : CO MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
CO2 : CO2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
H2O : H2O MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
H2 : H2 MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
COAL : CARBON MOLEFLOW IN STREAM F1 SUBSTREAM MIXED  
Q : SENTENCE=RESULTS VARIABLE=NET-DUTY IN UOS  
BLOCK R-100

VARIED VARIABLES:

VARY 1: SENTENCE=PARAM VARIABLE=TEMP IN UOS BLOCK  
R-100  
LOWER LIMIT = 283.1500 K  
UPPER LIMIT = 1273.1500 K  
INCREMENT = 10.0000

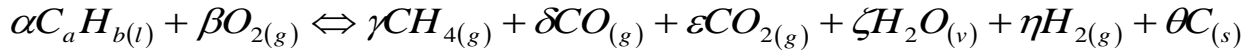
-----CASO BASE-----  
VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST  
RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE	UNITS
-----	-----	-----
CH4	2292.23	KMOL/HR
CO	0.418082E-06	KMOL/HR
CO2	0.287570	KMOL/HR
H2O	1454.86	KMOL/HR
H2	0.135476	KMOL/HR
COAL	1841.10	KMOL/HR
Q	-34.6732	MW

 Caso base

## ANEXO IX. MEMORIA DE CÁLCULO PARA LA OBTENCIÓN DE COEFICIENTES ESTEQUIOMÉTRICOS

El planteamiento de las ecuaciones correspondientes a las reacciones de combustión in situ parten de la siguiente expresión:



Donde las letras griegas  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\varepsilon$ ,  $\zeta$ ,  $\eta$  y  $\theta$  representan los números estequiométricos que ajustan a la ecuación de acuerdo a las regiones que se estén evaluando. Dichos valores se encuentran a partir de la resolución del balance de materia en base molar por componente; se considerarán dos ejemplos que explican el método de cálculo.

El primer paso es plantear el balance de materia del hidrocarburo de tal forma que relacione el coeficiente estequiométrico, es necesario hacer hincapié que el término de generación tendrá valores positivos si los elementos están presentes como productos de reacción o valores negativos si los elementos se encuentran como reactivos.

$$\{Ent\} + \{Gen\} = \{Sal\}$$

Posteriormente se procede a calcular el valor del avance de reacción ( $\xi$ ), para esto se asume que la combustión del hidrocarburo es total y con esto el coeficiente estequiométrico del mismo tiene un valor de -1, puesto que actúa como reactivo y éste se consume en su totalidad.

$$1000 \frac{kmol}{hr} - \alpha \xi = 0$$

$$1000 \frac{kmol}{hr} - \xi = 0$$

$$\xi = 1000 \frac{kmol}{hr}$$

Una vez que se obtuvo el avance de reacción, se procede a plantear nuevamente los balances de materia para el resto de los componentes, por ejemplo, se sabe que al reactor ingresa  $CH_4$  a razón de 520.30 kmol/hr y que en el efluente se disponen de 2189.53 kmol/hr, entonces el balance de materia se resuelve de la siguiente forma:

$$CH_4 : \{Ent\} + \{Gen\} = \{Sal\}$$

$$[CH_4]: 520.30 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} + \gamma(1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}) = 2189.53 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}$$

$$\gamma = \frac{2189.53 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} - 520.30 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}}{1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}}$$

$$\gamma = 1.67$$

A manera de resumen, en la tabla A.9 se presentan los resultados del resto de los coeficientes estequiométricos para el caso base descrito en el capítulo 2 ajustado a dos cifras significativas para el resto de las especies químicas.

Tabla A.9. Coeficientes estequiométricos de las reacciones de combustión seca adiabática.				
Componente	Flujo molar [kmol/hr]		Coeficiente estequiométrico	
	Entrada	Salida		
<b>C<sub>a</sub>H<sub>b</sub></b>	1000.00	0	$\alpha$	-1.00
<b>O<sub>2</sub></b>	210.00	5.70E-21	$\beta$	-0.21
<b>CH<sub>4</sub></b>	520.30	2189.53	$\gamma$	1.67
<b>CO</b>	0.00	7.15	$\delta$	0.01
<b>CO<sub>2</sub></b>	18.72	15.89	$\epsilon$	0.00
<b>H<sub>2</sub>O</b>	0.00	416.51	$\zeta$	0.42
<b>H<sub>2</sub></b>	0.00	278.08	$\eta$	0.28
<b>C</b>	0.00	1916.85	$\theta$	1.92

Por lo que el resultado final corresponde a la siguiente reacción química al equilibrio:



En el segundo caso (combustión húmeda), el procedimiento es similar, únicamente hay que considerar que en este proceso hay tres corrientes de entrada al reactor: la que contiene el hidrocarburo, el aire y el agua.

El planteamiento de los balances de materia siguen el mismo procedimiento, pero para este ejemplo se resolverán para el metano y el agua. El dato que se conoce es el avance de reacción, obtenido en la resolución de los balances de la combustión seca.

Por lo tanto, el planteamiento que se realiza para el metano y agua es el siguiente:

$$[CH_4]: 520.30 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} + \gamma(1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}) = 2322.66 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}$$

$$\gamma = \frac{2322.66 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} - 520.30 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}}{1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}} = 1.80$$

$$[H_2O]: 1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} + \zeta(1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}) = 1297.52 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}$$

$$\zeta = \frac{1297.52 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}} - 1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}}{1000 \frac{\text{kmol}}{\text{hr}}} = 0.30$$

De la misma manera fueron calculados el resto de los coeficientes estequiométricos y sus valores numéricos se presentan en la tabla A.10. Es evidente que tanto el O<sub>2</sub> y el agua juegan un papel importante en la determinación de los valores de los coeficientes estequiométricos. Sin embargo, la temperatura participa con otro rol importante, pues como se mostró en el apartado 3.4.2 los coeficientes pueden obtenerse con el simple hecho de conocer la temperatura de operación del reactor.

Tabla A.10. Coeficientes estequiométricos de las reacciones de combustión húmeda adiabática.				
Componente	Flujo molar [kmol/hr]		Coeficiente estequiométrico	
	Entrada	Salida		
<b>C<sub>a</sub>H<sub>b</sub></b>	1000.00	0.00	$\alpha$	-1.00
<b>O<sub>2</sub></b>	210.00	2.96E-24	$\beta$	-0.21
<b>CH<sub>4</sub></b>	520.30	2322.66	$\gamma$	1.80
<b>CO</b>	0.00	2.31	$\delta$	0.00
<b>CO<sub>2</sub></b>	18.72	78.81	$\epsilon$	0.06
<b>H<sub>2</sub>O</b>	1000.00	1297.52	$\zeta$	0.30
<b>H<sub>2</sub></b>	0.00	101.74	$\eta$	0.10
<b>C</b>	0.00	1727.55	$\theta$	1.73

El resultado final para el ejemplo desarrollado en la combustión húmeda, es el siguiente:



---

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [1] Alvarado, D. A., & Banzér, C. (2002). *Recuperación Térmica de Petróleo*. Maracaibo: Universidad del Zulia.
  
- [2] Hernández Díaz, D. (2011). *Análisis y Metodología del Proceso de Combustión in Situ (tesis de licenciatura)*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.
  
- [3] Reyes Romero, A. (2013). *Estudio Experimental y Teórico de Frentes de Calor Generados por Combustión in situ que se propagan en medios porosos (tesis de doctorado)*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.
  
- [4] Martínez Olvera, Y. (12 de Mayo de 2017). *Instituto Mexicano del Petróleo*. Obtenido de Proyecto del IMP permite incrementar la recuperación de petróleo por combustión in situ en yacimientos:  
<http://www.imp.mx/comunicacion/gaceta/?imp=nota&nota=130529dfr>
  
- [5] Sarathi, P. S. (1999). *In Situ Combustion - Principles and Practices*. Oklahoma: U.S. Department of Energy.
  
- [6] Schlumberger. (17 de Mayo de 2017). *Oilfield Glossary*. Obtenido de [http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/s/sweep\\_efficiency.aspx](http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/s/sweep_efficiency.aspx)
  
- [7] Schlumberger. (20 de Junio de 2017). *Oilfield Glossary*. Obtenido de <http://www.glossary.oilfield.slb.com/es/Terms/b/bitumen.aspx>
  
- [8] Manrique, E., & Romero, J. (2010). *Estatus de la Recuperación Mejorada de Petróleo*. Denver: TIORCO LLC.

- [9] N. Fletcher, C. (2016). *Geology for Ground Engineering Projects*. Boca Raton: CRC Press.
- [10] Smith, J. M. (1991). *Ingeniería de la Cinética Química*. Ciudad de México: Compañía Editorial Continental.
- [11] Ramírez Manzanares, G. (1999). *Cálculo de Equilibrio Químico Empleando una Técnica de Minimización de Energía de Gibbs (tesis de maestría)*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- [12] Himmelblau, D. M. (2002). *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química*. México: Pearson Educación.
- [13] Smith, J. M., Van Ness, H. C., & Abbott, M. M. (2007). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. México: McGraw-Hill Interamericana.
- [14] Danesh, A. (1998). *PVT and Phase Behaviour of Petroleum Reservoir Fluids*. Edimburgo: Elsevier.
- [15] Bazúa Rueda, E. (1999). *Notas del curso de Equilibrio Físico*. México: Facultad de Química-U.N.A.M.
- [16] Winterbone, D. E. (1997). *Advanced Thermodynamics for Engineers*. New York: John Wiley & Sons.
- [17] Galicia Narciso, C. (2014). *Ajuste del Modelo Termofísico para Reproducir Datos Experimentales PVT: Expansión a Composición Constante y Separación Multietapa (tesis de licenciatura)*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

---

*Si es del interés del lector conocer los resultados adicionales de pruebas de combustión in situ realizadas con el simulador Aspen Plus® a diferentes condiciones de operación del Reactor de Gibbs, puede contactar al autor al correo electrónico:*

*eac.3352@gmail.com*