

Métodos de simulación numérica aplicados a la inyección y almacenamiento de CO₂ en formaciones salinas

J. Arjona García-Borreguero⁽¹⁾, R. Rodríguez Pons-Esparver⁽²⁾ y A. Iglesias López⁽³⁾

(1) Universidad Politécnica de Madrid, c/ Ríos Rosas 21, 28003 Madrid
javier.arjona.garcia-borreguero@alumnos.upm.es

(2) Universidad Politécnica de Madrid, c/ Ríos Rosas 21, 28003 Madrid
ramón.rodripons@upm.es

(3) Instituto Geológico y Minero de España, c/ Ríos Rosas 23, 28003 Madrid
Universidad Politécnica de Madrid, c/ Ríos Rosas 21, 28003 Madrid
a.iglesias@igme.es

RESUMEN

Una de las medidas de mitigación del Cambio Climático propuestas al amparo de la ONU por el IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) en su "Informe de Síntesis 2007" consiste en la puesta en marcha de aplicaciones para la captación y almacenamiento de dióxido de carbono, existiendo tres tipos de formaciones geológicas idóneas para el almacenamiento geológico de este gas: yacimientos agotados de petróleo y gas, capas de carbón no explotables y formaciones salinas profundas.

En el caso de las formaciones salinas profundas, el problema fundamental para llevar a cabo un estudio de almacenamiento de CO₂, reside en la dificultad de obtención de datos geológicos del subsuelo en una cierta estructura seleccionada cuyas características pueden ser a priori idóneas para la inyección y almacenamiento del gas.

Por este motivo, la solución para poder analizar la viabilidad de un proyecto de almacenamiento en una estructura geológica pasa por la simulación numérica a partir de la modelización 3D del terreno. Los métodos numéricos permiten simular la inyección de dióxido de carbono en una formación salina a partir de un pozo desde el que se inyecta el gas con un caudal determinado.

En este trabajo se presenta una metodología para abordar la modelización y simulación de procesos de inyección de CO₂ en acuíferos salinos profundos.

Palabras clave: Almacenamiento, dióxido de carbono, inyección, métodos numéricos, simulación.

Numerical simulation methods applied to injection and storage of CO₂ in saline aquifers

ABSTRACT

One of the Climate Change mitigation proposals suggested by the IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) in its "Synthesis Report 2007" involves the launch of applications for capturing and storing carbon dioxide, existing three different geological structures suitable for gas storage: oil and gas depleted reservoirs, useless coal layers and deep saline structures.

In case of deep saline structures, the main problem to prepare a study of CO₂ storage is the difficulty of obtaining geological data for some selected structure with characteristics that could be suitable for injection and gas storage.

According to this situation, the solution to analyze the feasibility of a storage project in a geological structure will need numerical simulation from a 3D terrain model. Numerical methods allow the simulation of the carbon dioxide filling in saline structures from a well, used to inject gas with a particular flow.

This paper presents a methodology to address the modeling and simulation process of CO₂ injection into deep saline aquifers.

Keywords: Carbon dioxide, injection, numerical methods, simulation, storage.

ABRIDGED ENGLISH VERSION

Introduction

In 2005 the Spanish Ministry of Environment published a report entitled "Preliminary Assessment of the Impacts in Spain due to the Effects of Climate Change" who had commanded develop to a group of 50 experts in that specific field.

The objective of this report was first qualitatively analyze the vulnerability of Spain to the increasing effects of climate change, in relation to the declining water resources, shoreline retreat, loss of biological diversity and natural ecosystems, increases in soil erosion process and human and material losses arising from the intensification of extreme weather events such as floods, forest fires and heat waves.

Second, and more important, the paper sought to become a staple of reference to undertake the development and implementation of adaptation policies oriented to corrective actions by the government and the private sector.

One of the main causes of climate change is the greenhouse effect, which is helping to increase the average temperature at the Earth's surface as a result of the emission into the atmosphere of a number of gases in large quantities that are breaking the balance between the solar radiation received and reflected by the planet. This heating process has meant spending an average temperature on Earth of 13.99 degrees Celsius in the period 1969-1971 to 14.43 degrees Celsius in 1996-1998.

Considering the gases that cause the greenhouse effect, it is noteworthy above all the carbon dioxide (CO_2), that being the cleaner, is the one that causes a greater impact on the volume of emissions. CO_2 emissions have increased between 1970 and 2004 by approximately 80%, from 21 to 38 gigatonnes (Gt) in 2004 and accounted for 77% of total emissions of anthropogenic greenhouse.

To control the impact of CO_2 in the atmosphere there are only two possibilities. On one hand limit the emissions from international agreements such as the Kyoto Protocol, agreed with no consensus within the UN Framework Convention on Climate Change (UNFCCC), and the other looking for an alternative storage solution avoiding the gases emitted to reach the atmosphere.

One of the projects linked to this second option, developed in this article, is the simulation of geological storage of carbon dioxide, based on numerical methods. As the onsite study in a geological structure has the complexity of obtaining real data, the finite differences method open the way to simulate the data evolution in each cell of a 3D deep saline aquifer.

Methodology

Numerical simulation of physical and chemical parameters evolution on a 3D modeled geological structure after the CO_2 injection from a well, is the result of solving the balance equations for mass and heat multiphase multicomponent systems.

Basically, Darcy's law extended to multiphase flow, considers the advective flow and the effect of diffusive transport in all phases. Also the heat flow is considered by conduction and convection, describing the thermodynamic conditions in the assumption that all the phases are in equilibrium. The parameters of the fluid and the aquifer are nonlinear functions, dependent on four primary thermodynamic variables defined by the equations of state (EOS).

When two or more immiscible fluids (existing different phases) coexist in a porous medium, is known a phase is called wetting for having a high affinity in the surface of the rock, and the other is called non-wetting. For multiphase flow, Darcy's law is modified by introducing the concept of effective or relative permeability (the property of a porous medium to allow movement of a fluid that is partially saturating the medium, along with other fluids in motion).

From Darcy's law extended equation the mass and energy balance must be set considering the following assumptions: the dependent variables are volumetric averages for an elementary volume, no chemical reactions can occur (only fractionation of components between phases), and the phases are in chemical and thermal equilibrium.

The balance equations of mass and energy are solved from a discretization in space using the finite difference method. In addition, the time has to be discretized on a first order finite difference, considering the flow, sources and sinks at a later time ($t^{k+1}=t^k+\Delta t$) to obtain stability in the calculation of multiphase flow. Finally, a system of first order differential equations is obtained.

For the numerical resolution of the equations system so defined, there are some mathematic models as TOUGH2 which is a program originally designed by the Division of Earth Sciences of the Lawrence Berkeley National Laboratory under the direction of Karsten Pruess.

In TOUGH2, the thermophysical properties of a fluid mixture needed to assemble the balance equa-

tions of mass and energy, are given through the modules called equations of state. Each one uses a different set of primary parameters (pressure, temperature and mass fraction) to define every possible phase condition. In the case of CO₂ injection in deep saline aquifers, the EOS module to use in the ECO2N (H₂O, NaCl, CO₂).

This ECO2N module is specifically designed to model non-isothermal multiphase flows of the system H₂O + CO₂ + NaCl. The thermodynamic properties in this module include a range of temperatures from the atmospheric temperature to 100 degrees Celsius, pressures up to 600 bar and salinities in the range from 0 to the saturation point.

In the module are defined the geological storage fluids from their liquid phases (aqueous phase with H₂O as the main component) and gas (CO₂ rich phase). Furthermore it is considered the NaCl as solid precipitate.

The chemical reactions under the ECO2N module include phase equilibrium in the separation of H₂O and CO₂ from the liquid and gaseous phases, and precipitation and dissolution of solid NaCl. The H₂O and CO₂ separation between liquid and gas phases is modeled as a function of temperature, pressure and salinity, using the Spycher - Pruess correlation curves. In the modeling are included changes in the porosity and permeability due to precipitation of NaCl. In addition, each of the phases (gas, liquid and solid) can appear or disappear in any cell of the mesh during the simulation.

Results and discussion

Once the geological structure has been modeled and the equations system prepared (mass and energy balance) to be solved by the iterative finite difference method, it's time to define the mathematical resolution parameters, such as time simulation, number of steps, number of iterations per step and control of time step. Also should be parameterized the convergence criteria from the definition of absolute and relative errors. In TOUGH2 are also controls for specifying output options model results for each increment of specified time step.

The numerical resolution of the model allows to study the evolution in time and space (corresponding to the 3D geological structure), of different physical and chemical parameters such as pressure or aqueous fraction of CO₂ that would otherwise be impossible to determine.

By studying the evolution of parameters such as pressure, depending on the geological characteristics of the ground, it is possible to characterize not only the possible volume of gas storage, but also the conditions in which the gas injection process should be performed. A proper study of the results of the numerical simulation may allow to analyze the flow of gas to be injected, the more favorable point or points to define the injection wells, the maximum pressure to meet, the need of drainage wells and the time required to store the CO₂.

Introducción

La simulación numérica de la evolución de los parámetros físicos y químicos de una cierta estructura geológica modelizada en 3D, tras la inyección de CO₂ en un pozo ubicado en el terreno, es el resultado de la resolución de las ecuaciones de balance de masa y calor para sistemas multifase y multicomponente (García, 2003).

De manera básica la ley de Darcy, extendida al flujo multifase, considera el flujo advectivo al que se suma el efecto del transporte por difusión en todas las fases. A su vez, el flujo de calor se considera por conducción y por convección, describiéndose las condiciones termodinámicas en la asunción de que todas las fases están en equilibrio. Los parámetros del fluido y del acuífero son funciones no lineales, dependientes de 4 variables termodinámicas primarias definidas por las denominadas ecuaciones de estado (EOS).

La ley de Darcy para el flujo de una sola fase es de la forma:

$$u = - \frac{k}{\mu} \left(\frac{\Delta p}{\Delta x} - \rho g \right) = - \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g) \quad (1)$$

(el signo menos se debe a que el caudal o flujo es una magnitud vectorial, cuya dirección es hacia los Δp decrecientes; es decir, que Δp es negativo y, por tanto, el caudal será positivo)

- u : velocidad de Darcy (m/s), que representa el caudal Q (m³/s) que atraviesa un medio poroso de una determinada sección A (m²)
- k : permeabilidad intrínseca (m²), que sólo depende de las características internas del medio permeable. No depende por tanto del fluido que transmite, ya que si no sería la permeabilidad efectiva o de Darcy (m/s), también llamada conductividad hidráulica.

- μ : viscosidad dinámica del fluido (kg/ms)
- Δp : incremento de presión ($N/m^2 = kg/ms^2$) que se produce cuando el fluido ha recorrido un Δx
- ρ : densidad del fluido (kg/m^3)
- g : aceleración de la gravedad (m/s^2)

Cuando dos o más fluidos no miscibles (es decir existiendo distintas fases) coexisten en un medio poroso, una fase se denomina mojante por tener una gran afinidad por la superficie de la roca, y la otra se denomina no mojante. Para el flujo multifase, la ley de Darcy se modifica introduciendo el concepto de permeabilidad relativa (la propiedad de un medio poroso de permitir el movimiento de un fluido que le satura parcialmente, junto a otros fluidos que se encuentran en movimiento):

$$u_{\beta} = - \frac{k_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla p_{\beta} - \rho_{\beta} g) \quad (2)$$

- u_{β} : velocidad de Darcy de la fase β (m/s)
- k_{β} : permeabilidad relativa de la fase β (cuyo valor oscila entre 0 y 1). La permeabilidad relativa se define como $k_{\beta} = k_{\beta} / k$ (permeabilidad de la fase β entre la permeabilidad intrínseca)
- μ_{β} : viscosidad dinámica de la fase β (kg/ms)
- ∇p_{β} : gradiente de presión (kg/m^2s^2) de la fase β
- ρ_{β} : se define como $p + p_{c\beta}$ (siendo p la presión de una fase de referencia – normalmente la fase gaseosa – y $p_{c\beta}$ la presión capilar o diferencia de presión de dos fluidos inmiscibles - fases líquida y gaseosa -, normalmente entre la presión de la fase no mojante y la de la fase mojante)
- ρ_{β} : densidad de la fase β (kg/m^3)
- g : aceleración de la gravedad (m/s^2)

Para la resolución numérica, en lugar de utilizarse la velocidad de Darcy (u_{β}) se emplea el flujo másico (F_{β}), cuya relación se establece a partir de la densidad:

$$F_{\beta} = \rho_{\beta} \cdot u_{\beta}$$

Por tanto:

$$F_{\beta} = - \frac{k_{\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla p_{\beta} - \rho_{\beta} g) \quad (3)$$

A partir de la ecuación de la ley de Darcy extendida (2) se debe establecer el balance de masa y energía considerando las siguientes premisas:

- Las variables dependientes son medias volumétricas para un volumen elemental
 - No se producen reacciones químicas (sólo fraccionamiento de componentes entre fases)
 - Las fases están en equilibrio químico y térmico
- De esta manera las ecuaciones básicas que deter-

minan el mencionado balance de masa y energía (en simulaciones no isotermas), son de la forma:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_n} M^K dV_n = \int_{\Gamma_n} F^K n d\Gamma_n + \int_{V_n} q^K dV_n \quad (4)$$

El término de la izquierda representa la acumulación de masa para cada componente K , mientras los de la derecha son los denominados términos de flujo.

La ecuación se define sobre un dominio V_n limitado por una superficie cerrada Γ_n siendo M^K la masa (o energía) por volumen para el componente K . La F es el flujo de masa (o calor) y q^K son manantiales o sumideros por componente. Por último n es un vector normal al elemento de superficie $d\Gamma_n$ cuyo sentido apunta hacia el dominio V_n . En la simulación se considerará $K=1$ para el componente H_2O , $K=2$ para el componente $NaCl$, $K=3$ para el componente CO_2 y $K=4$ para el componente extra de calor en caso de simulación no isoterma.

El balance significa que la variación de flujo másico en el dominio V_n es igual al flujo efectivo que atraviesa la superficie Γ_n más el flujo provocado por las posibles fuentes o sumideros.

En el término de acumulación de masa para cada componente K , siendo M^K la masa (o energía) por volumen para el componente K , se establece que:

$$M^K = \Phi \sum_{\beta} \rho_{\beta} S_{\beta} X_{\beta}^K \quad (5)$$

Dicha expresión corresponde al sumatorio de las tres fases fluidas ($\beta = 1,2,3$) del gas CO_2 , líquido (H_2O) y sal sólida ($NaCl$) respectivamente. El parámetro Φ es el valor de la porosidad, ρ_{β} es la densidad de la fase β , S_{β} la saturación de la fase β (fracción de volumen poroso ocupado por la fase β) y X_{β}^K la fracción de masa del componente K en fase β .

La acumulación de calor ($K = 4$) incluye las contribuciones de las fases sólida y fluidas:

$$M^{(4)} = \Phi \sum_{\beta} \rho_{\beta} S_{\beta} u_{\beta} + (1 - \Phi) \rho_R C_R T \quad (6)$$

En este caso u_{β} es la energía interna específica de la fase β , ρ_R es la densidad de grano de la roca, C_R el calor específico de los granos de roca y T la temperatura.

De forma similar a lo realizado con el término de acumulación de masa, a continuación se desarrollan los términos de flujo de la ecuación de balance de

masa y energía para los componentes H₂O, NaCl y CO₂ (K = 1,2,3). Para ello se considera que el flujo de masa total F^K incluye el flujo de masa advectivo F_a^K, y el flujo difusivo-dispersivo F_d^K.

El flujo de masa advectivo se desarrolla según la siguiente expresión:

$$F_a^K = \sum_{\beta} X_{\beta}^K F_{\beta} \quad (7)$$

En este caso F_β corresponde a los flujos individuales de masa de la ley de Darcy para el flujo multifase:

$$F_{\beta} = \rho_{\beta} u_{\beta} = - \frac{k_{\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla p_{\beta} - \rho_{\beta} g) = - \frac{\bar{k} k_{\gamma\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla p_{\beta} - \rho_{\beta} g) \quad (8)$$

(siendo el parámetro \bar{k} el tensor de permeabilidad intrínseca)

El flujo difusivo-dispersivo por su parte es de la forma:

$$F_d^K = - \sum_{\beta} \rho_{\beta} \bar{D}_{\beta}^K \nabla X_{\beta}^K \quad (9)$$

(siendo el parámetro \bar{D}_{β}^K el tensor de dispersión hidrodinámica)

Desarrollando la ecuación anterior:

$$\bar{D}_{\beta}^K = D_{\beta T}^K \bar{I} + \frac{D_{\beta L}^K - D_{\beta T}^K}{u_{\beta}^2} u_{\beta} u_{\beta} \quad (10)$$

A su vez \bar{I} es el tensor unitario y D_{βL}^K, D_{βT}^K los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal, que se pueden expresar según:

$$D_{\beta L}^K = \Phi \tau_{0\beta} d_{\beta}^K + \alpha_{\beta L} u_{\beta} \quad (11)$$

$$D_{\beta T}^K = \Phi \tau_{0\beta} d_{\beta}^K + \alpha_{\beta T} u_{\beta} \quad (12)$$

El término d_β^K es el coeficiente de difusión molecular del componente K en fase β, τ_{0β} la tortuosidad (dependiente del medio poroso y de la saturación de fase) y α_{βL} y α_{βT} las dispersividades longitudinal y transversal.

El flujo de calor (K = 4) incluye componentes de conducción y de convección:

$$F^{(4)} = -K \nabla T - \sum_{\beta} h_{\beta} F_{\beta} \quad (13)$$

En la ecuación anterior K es la conductividad térmica del medio poroso y h_β la entalpia específica de la fase β.

Los términos de acumulación de masa y de flujo para el componente NaCl (K = 2), considerando que la fase sólida de la sal no es móvil y que la solubilidad del NaCl en el gas se ha dejado estar, se pueden definir de la siguiente forma:

$$M^{(2)} = \Phi \rho_S S_S + \Phi \rho_L S_L X_L^{(2)} \quad (14)$$

$$F^{(2)} = - k \frac{k_{\gamma L} \rho_L}{\mu_L} X_L^{(2)} (\nabla p_L - \rho_L g) \quad (15)$$

En la ecuación de M⁽²⁾ el parámetro S_s es la saturación sólida, definida como la fracción de volumen poroso ocupada por la sal sólida.

Metodología

Las ecuaciones de balance de masa y energía se resuelven a partir de una discretización en el espacio utilizando el método de diferencias finitas (Pan et al., 2008) con las siguientes ecuaciones de partida:

$$\int_{V_n} M dV = V_n M_n \quad (16)$$

$$\int_{\Gamma_n} F^K \cdot n d\Gamma_n = \sum_m A_{nm} F_{nm} \quad (17)$$

- M_n: valor medio de M en V_n
- A_{nm}: segmentos de superficie en que se divide superficie Γ_n
- F_{nm}: valor medio de la componente normal de F sobre el segmento de superficie (interfaz) A_{nm} que separa los volúmenes V_n y V_m

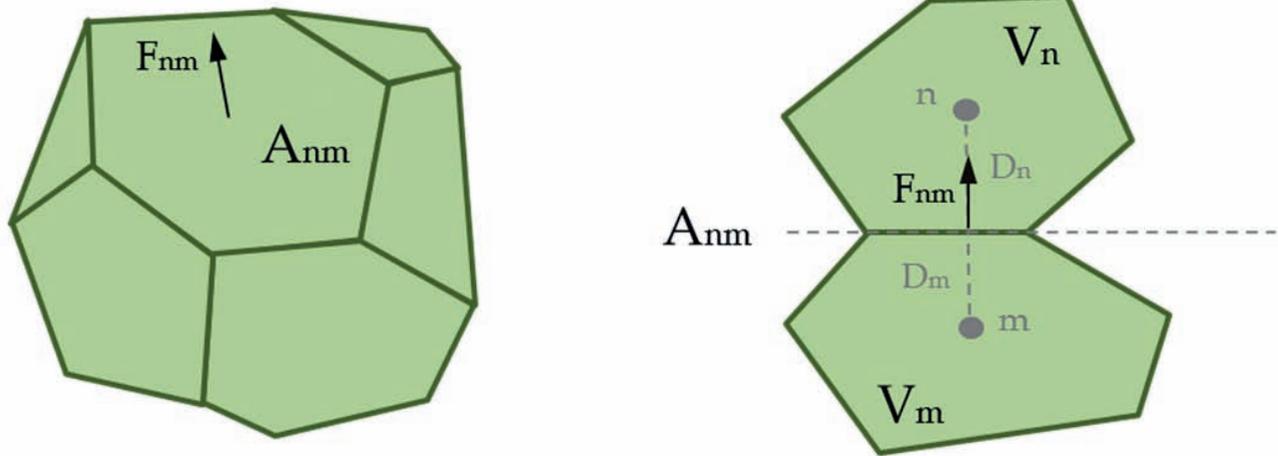


Figura 1. Discretización espacial (método de diferencias finitas).
Figure 1. Spatial discretization (finite differences method).

El valor del flujo $F_{\beta nm}$ según la ecuación de Darcy tiene la expresión:

$$\begin{aligned}
 F_{\beta nm} &= -k_{nm} \frac{k_{\gamma\beta nm} \rho_{\beta nm}}{\mu_{\beta nm}} \left(\frac{\Delta p_{\beta nm}}{\Delta x_{\beta nm}} - \rho_{\beta nm} g_{nm} \right) = \\
 &= -k_{nm} \frac{k_{\gamma\beta nm} \cdot \rho_{\beta nm}}{\mu_{\beta nm}} \left(\frac{p_{\beta n} - p_{\beta m}}{D_n + D_m} - \rho_{\beta n} g_{nm} \right)
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

Este flujo discretizado se expresa en términos de medias de parámetros para los volúmenes V_n y V_m . Los subíndices nm indican que los parámetros que se enuncian a continuación se evalúan en la interfaz entre los elementos m y n siguiendo métodos numéricos como la interpolación.

g_{nm} : componente de la aceleración de la gravedad en la dirección de m a n

k_{nm} : permeabilidad

$k_{\gamma\beta nm} / \mu_{\beta nm}$: movilidad

$\rho_{\beta nm}$: densidad

Adicionalmente se discretiza el tiempo en diferencias finitas de primer orden, considerando el flujo, fuentes y sumideros (derecha de la ecuación) en un tiempo posterior ($t^{K+1} = t^K + \Delta t$) para obtener estabilidad en el cálculo de flujo multifase. Finalmente se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden:

$$\frac{dM_n^K}{dt} = \frac{1}{V_n} \sum_m A_{nm} F_{nm}^K + q_n^K
 \tag{19}$$

Para cada celda V_n existirán por tanto cuatro ecuaciones ($K = 1, 2, 3, 4$), representando la suma a todas las celdas m que están conectadas a n . F_{nm} es el flujo del componente K entre las celdas n y m (es la suma de flujos de todas las fases móviles):

$$F_{nm}^K = \sum_{\beta} F_{\beta nm}^K
 \tag{20}$$

Para la resolución numérica del sistema de ecuaciones definido, existen modelos matemáticos como TOUGH2 (Yamamoto, 2008) que es un programa diseñado originalmente por la División de Ciencias de la Tierra del Laboratorio Nacional Lawrence de Berkeley bajo la dirección de Karsten Pruess.

En TOUGH2, las propiedades termofísicas de una mezcla de fluidos necesarias para ensamblar las ecuaciones de balance de masa y energía, vienen dadas a través de los denominados módulos de ecuaciones de estado. Cada uno de ellos utiliza un conjunto diferente de parámetros primarios (presión, temperatura y fracciones de masa) para definir cada posible condición de fase. Para el caso de inyección de CO_2 en acuíferos salinos profundos, el módulo a utilizar en TOUGH2 es el ECO2N (H_2O , NaCl, CO_2).

Este módulo ECO2N (Talman and Adams, 2004) está diseñado específicamente para modelizar flujos multifase no isotermos del sistema formado por H_2O , NaCl y CO_2 . Las propiedades termodinámicas en este módulo incluyen un rango de temperaturas que va desde la temperatura atmosférica hasta los 100 grados Centígrados, presiones de hasta 600 bares y sali-

nidades en el rango desde cero hasta el punto de saturación.

En el módulo se definen los fluidos del almacenamiento geológico a partir de sus fases líquida (fase acuosa con el H₂O como componente principal) y gaseosa (fase rica en CO₂). Además se considera como precipitado sólido el NaCl.

Las reacciones químicas previstas en el módulo ECO2N incluyen el equilibrio de fases en la separación del H₂O y el CO₂ entre las fases líquida y gaseosa, y la precipitación y disolución del NaCl sólido. La separación del H₂O y CO₂ entre las fases líquida y gaseosa se modeliza en función de la temperatura, la presión y la salinidad, utilizando las curvas de correlación de Spycher-Pruess (Spicher and Prues, 2009). En la modelización se incluyen los cambios en la porosidad y permeabilidad debidos a la precipitación del NaCl. Además, cada una de las fases (gas, líquido y sólido) puede aparecer o desaparecer en cualquier celda del mallado durante la simulación.

En un sistema de dos componentes H₂O-CO₂ pueden estar presentes 3 fases fluidas (a), (l) y (g), que dan lugar a 7 posibles combinaciones, según se observa en la figura 2.

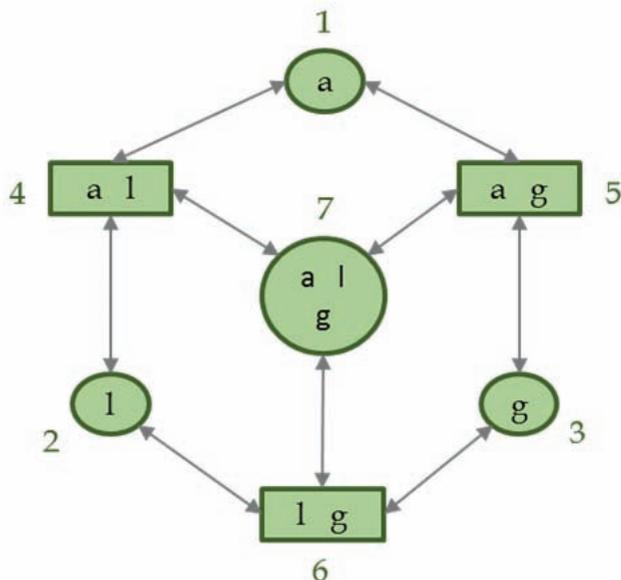


Figura 2. Combinaciones del sistema H₂O-CO₂
Figure 2. H₂O-CO₂ system combinations.

- (a) Fase acuosa = H₂O ± CO₂ disuelto
- (l) Fase líquida = CO₂ ± agua
- (g) Fase gaseosa = CO₂ ± agua

Si se añade el NaCl como tercer componente, entonces el número de posibles combinaciones de fases se duplica (± NaCl).

Hay que considerar que el CO₂ en estado líquido y gaseoso puede coexistir en el diagrama de fases del CO₂ para presiones y temperaturas menores que las del punto crítico. La presión crítica es de 73.82 bares y la temperatura crítica es de 31.04 grados centígrados. Para presiones y temperaturas superiores a las críticas, existe únicamente una única fase (en estado supercrítico) de CO₂.

El módulo ECO2N tiene como restricción el no poder representar las condiciones en una mezcla bifásica de CO₂ líquido y gaseoso (Combinación 6) y de tres fases (Combinación 7). Por tanto toda cantidad de CO₂ tanto en estado subcrítico como supercrítico se considera como una sola fase no mojante, a la que se llama gas. Así ECO2N se puede utilizar para condiciones de *P* y *T* tanto subcríticas como supercríticas, pero las aplicaciones que implican condiciones subcríticas están limitadas a sistemas en los que no hay intercambio entre las fases líquida y gaseosa del CO₂ y en los que estas dos fases del CO₂ no se mezclan.

Resultados y discusión

Una vez expuestos deductivamente, los principios y ecuaciones que gobiernan el flujo multifase y de varios componentes, y sobre todo, el modo en el que se ha organizado un modelo discreto que resuelve los sistemas de ecuaciones y que permite llevar a cabo el proceso de simulación, cabe plantear y discutir, como resultados principales, la manera operativa en que debe elaborarse y validarse el modelo y los resultados reales que a la investigación de los yacimientos salinos puede propiciar su uso.

Ello se hará en cuatro puntos bien diferenciados:

- 1- Campo de aplicación y reflexiones generales.
- 2- Configuración del sistema en cuanto a discretización espacial y temporal, acordes al problema planteado y a la geometría del medio físico a ensayar.
- 3- La calibración o ajuste del modelo o, en su defecto, su proceso de validación.
- 4- La simulación en sí, o la explotación del modelo para resolver u orientar sobre las incertidumbres planteadas en la investigación.

El campo de aplicación de la metodología definida es la simulación, en formaciones geológicas permeables, de la evolución de varios fluidos componentes (H₂O, CO₂ y NaCl), que pueden encontrarse en varias fases, líquido, sólido, gas o estado supercrítico. Estos modelos, como otros de simulación de fenómenos de flujo en el medio físico, pueden tener dos grupos de objetivos: la gestión y la investigación.

En los modelos destinados a la gestión se requie-

re un fundamento de datos muy sólido en calidad y en su distribución espacial y frecuencia temporal. Hay que entender que con las simulaciones se buscan objetivos de cuantificar operaciones y obtener resultados concretos que permitan incluso inversiones importantes, como por ejemplo en la recuperación secundaria de hidrocarburos en yacimientos.

Muy distinta es la filosofía y uso del modelo cuando se investiga. En este caso solo se pretende poder valorar la viabilidad de las hipótesis formuladas, ayudar al investigador a comprobar sus hipótesis y argumentar un funcionamiento coherente de los fluidos en la formación subterránea permeable. Esta investigación es prospectiva y, en consecuencia, la modelización ayudará a la formulación de diversos escenarios en el almacenamiento de CO₂, que solo el tiempo y la experimentación podrán ir afinando.

En lo que respecta a la configuración del sistema, la metodología a seguir implica hacer un mallado acorde con la precisión en la solución del problema que se quiere plantear y fijar adecuadamente los intervalos temporales: de simulación total, inyección, no inyección y momentos del tiempo en los que se desea obtener información. Adicionalmente, es preciso definir las hipótesis de borde y asignar los parámetros a cada entorno discreto.

El mallado puede ser poligonal o rectangular. El poligonal tiene la ventaja de permitir mallados más finos en las zonas de mayor estrés como en las proximidades del pozo de inyección permitiendo, en general, mallas con menor número de elementos y propiciando modelos más manejables. Es necesario ajustar con cuidado el borde del mallado a la geometría del medio físico a simular para lograr el resultado más preciso posible.

A continuación, es necesario definir los tiempos de la simulación, número de pasos, número de iteraciones por paso y el control de los tiempos de paso. El tiempo de simulación debe incluir tanto el periodo de inyección como el posterior en el que se desee obtener información del movimiento del CO₂ una vez suspendida dicha inyección. Solo así se podrá tener una "visión final" de la disposición en que se almacena el gas en la formación, según el escenario definido.

La asignación de parámetros (permeabilidad, porosidad, permeabilidades relativas y presiones capilares) es otro punto de cierta incertidumbre y complejidad. En España, según estudios y plano 1/1000000 del Instituto Geológico existen unas 90 estructuras favorables para el almacenamiento de CO₂. La información de estas estructuras proviene de estudios, geofísica, sondeos y logs de las campañas de exploración de hidrocarburos. La exploración fue

negativa en estas estructuras y no se continuó la investigación. Por ello se dispone para cada estructura solo de una sísmica de exploración regional, y uno o dos sondeos y logs. De esta información el IGME (IGME. 2014) ha obtenido (Proyecto Algeco2) valores de parámetros procedentes de estudios petrofísicos, mientras que las curvas de permeabilidades relativas y presión capilar, al no existir ningún dato, se obtienen de ajustes desarrollados por diversos autores y utilizados en el mundo del petróleo como Corey (1954) y Van Genuchten (1980). Los datos existentes no son en consecuencia de alta fiabilidad ni tienen muchas incidencias; han sido obtenidos de un único punto (sondeo, logs, etc) y los procedimientos de evaluación no son los de mayor fiabilidad. Este planteamiento es de carácter prácticamente general para todas las estructuras favorables definidas en España y de igual modo puede extenderse a formaciones salinas en cualquier ámbito que no hayan tenido explotación petrolífera previa.

Es preciso, además, parametrizar los criterios de convergencia a partir de la definición de los errores tanto relativo como absoluto. En el caso de TOUGH2 existen también controles que permiten especificar las opciones de salida de resultados del modelo para cada incremento de tiempo de paso especificado.

El siguiente punto es la calibración o ajuste del modelo. Se trata de un proceso imprescindible, consistente en la variación de ciertos parámetros característicos del terreno (permeabilidad, porosidad, etc.), dentro de límites razonables, hasta conseguir, que los resultados arrojados por el modelo coincidan con los datos reales tomados en campo a lo largo de una serie histórica. Para ellos se requiere una serie histórica de observaciones, existente en el caso de la explotación de yacimientos de hidrocarburos e inviable para el caso de una formación salina que nunca ha sido explorada ni explotada, por no aportar ningún recurso útil (agua de calidad, petróleo, gas, etc.). El proceso de validación es en este caso diferente, pero igual de necesario para dar credibilidad a los resultados del modelo. En este caso la metodología consiste en hacer pasadas de sensibilidad, es decir: ante variaciones o incertidumbres en los parámetros de entrada, analizar la variación en los resultados. Subir y bajar porosidades y permeabilidades y ver cómo varían los resultados del modelo. En base a esto se pueden hacer "acotaciones", en esencia, ayudarse a fijar escenarios en la investigación y, con sentido y sensibilidad en el conocimiento de las ciencias de la Tierra, lograr que el modelo arroje resultados que permitan su utilización como herramienta de ayuda para el conocimiento del medio físico a estudiar.

Por último, hay que mencionar el proceso de

simulación en sí. La explotación del modelo es un paso decisivo en la ayuda a la comprensión y evaluación del comportamiento del medio físico y los fenómenos asociados al mismo.

La resolución numérica del modelo permite ver cómo evolucionan en el tiempo y en el espacio (correspondiente éste a la estructura geológica 3D) distintos parámetros físicos y químicos, como la presión, la saturación en gas, la fracción de CO_2 acuoso, la concentración de sal, etc. que de otra forma sería imposible determinar. En la figura 3 se muestra un ejemplo de cómo se puede visualizar la evolución de la fracción de CO_2 acuoso a lo largo del tiempo y espacio.

Estos resultados permiten conocer con una fiabilidad mucho mayor, que por simple cubicación y porosidad, el volumen de CO_2 almacenable; cómo se va a mover en el seno de la formación y cuál va a ser su evolución una vez se ha parado la inyección.

El modo operativo consiste en simular opciones diversas de inyección, en caudal y tiempo de duración, identificar el lugar o lugares donde situar los sondeos y analizar los efectos a lo largo del tiempo de simulación: subidas de presión sobre la inicial de reposo que no puede sobrepasar el gradiente de fractura (ver Figura 4 de Evolución de la presión en pozo

de observación), visualizar en el gráfico 3D correspondiente cómo se distribuye el CO_2 , validar si ocupa la estructura o la sobrepasa con lo que la inyección debería ser menor, etc...

En estructuras totalmente cerradas el almacenamiento se efectúa únicamente por compresibilidad elástica con un importante aumento de la presión y con frecuencia no es una hipótesis realista. Solo suele haber datos de la estructura en sí y se suele desconocer el tipo y condiciones de las formaciones ubicadas en los límites de dicha estructura, es decir de los bordes. Lo conveniente es simular con varias condiciones de contorno y, en cualquier caso, procurar minimizar la influencia de dichas condiciones en las zonas de inyección y almacenamiento.

Otra opción, no siempre válida por cuestiones medioambientales, consiste en simular pozos de drenaje. Éstos son sondeos abiertos en los lugares adecuados en la estructura en los que, por el aumento de presión debido a las inyecciones, el agua salada sobrepasa la cota del brocal y rebosa, consiguiendo así que la presión no aumente más y poder seguir inyectando mientras se asegura la condición de no sobrepasar el gradiente de fractura. Estos pozos de drenaje están condicionados a que se pueda verter el agua drenada al mar o a un cauce lo suficientemente

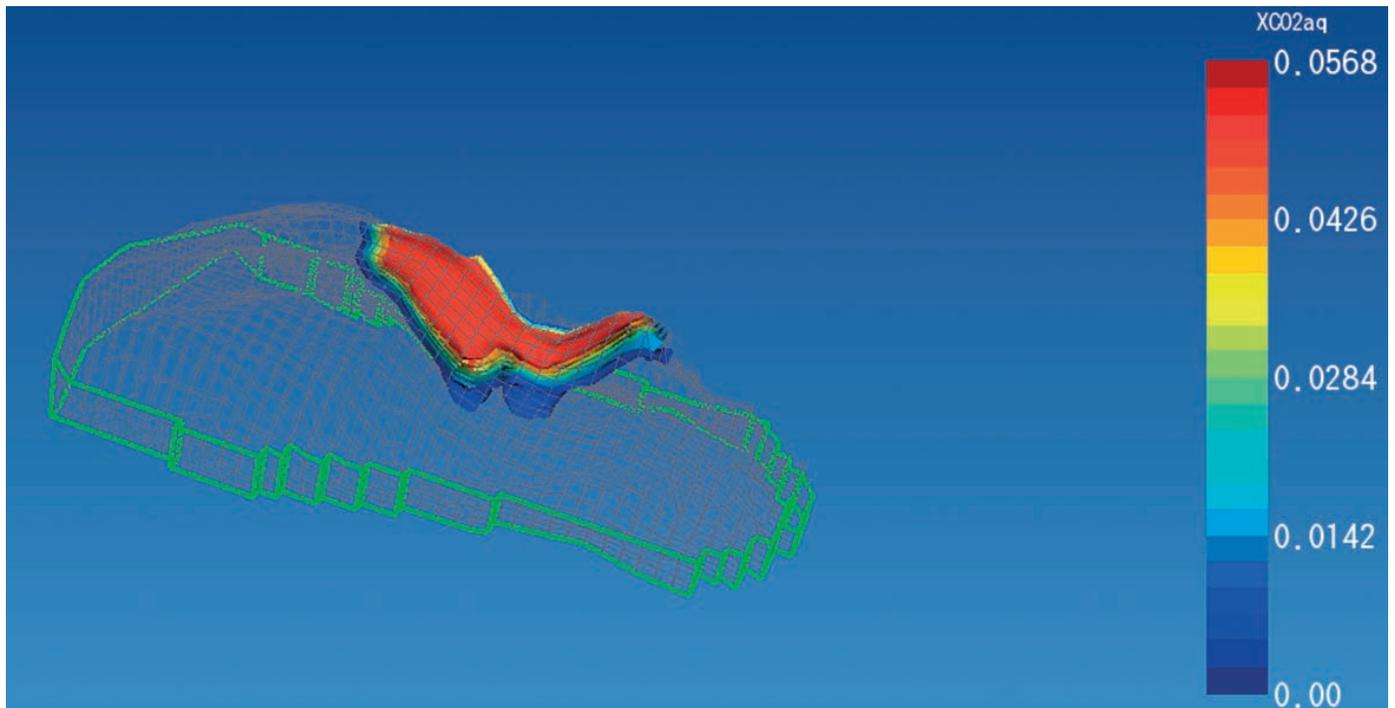


Figura 3. Evolución de la fracción de CO_2 acuoso.
Figure 3. Evolution of the aqueous fraction of CO_2

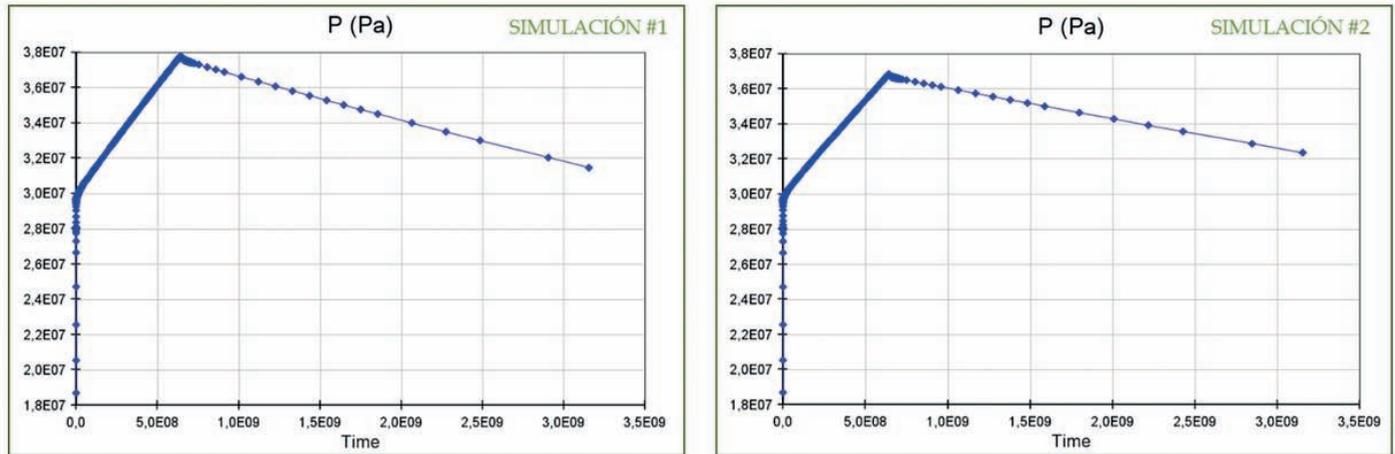


Figura 4. Evolución de la presión en pozo de observación.
Figure 4. Evolution of pressure in observation well.

caudaloso para que el impacto ambiental no sea significativo.

Como resultado principal de este modo de investigar el almacenamiento de CO₂ en formaciones salinas, a través de modelos de simulación multiflujo y multicomponente, que suelen denominarse modelado dinámico en la investigación de hidrocarburos, se pueden fijar los orientadores principales de dónde, cuándo y cuánto se debe inyectar, y de esta forma evaluar el volumen almacenable con una aproximación más realista y ajustada, sabiendo que no se superaran presiones que provoquen la fracturación. Además se puede incluso orientar sobre el número de pozos de inyección más conveniente y la conveniencia de instalación de pozos de drenaje y su ubicación más recomendable.

Referencias

- Battistelli, A., Marcolini, M. 2009. TMGAS A new TOUGH2 EOS module for the numerical simulation of gas mixtures injection in geological structures. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 3, 481-493.
- Birkholzer, J., Zhou, Q., Rutqvist, J. 2008. *Research project on CO₂ geological storage and groundwater resources*. University of California. Lawrence Berkeley National Laboratory. Paper LBNL-63544
- Carneiro, J.F. 2009. Numerical simulations on the influence of matrix diffusion to carbon sequestration in double porosity fissured aquifers. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 3, 431-443.
- Corey, A.T. 1954. The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities. *Producers Monthly*, 19, 38-41.
- Croucher, A., O'Sullivan, M. 2008. Application of the computer code TOUGH2 to the simulation of supercritical conditions in geothermal systems. *Geothermics*, 37, 622-634.
- Doughty, C., Pruess, K. 2004. Modeling Supercritical Carbon Dioxide Injection in Heterogeneous Porous Media. *Soil Science Society of America*, 3, 837-847.
- García J.E. 2003. *Fluid Dynamics of Carbon Dioxide Disposal into Saline Aquifers*. University of California. Lawrence Berkeley National Laboratory. Paper LBNL-54280
- García, J.E. Pruess, K. 2003. *Flow Instabilities During Injection of CO₂ into Saline Aquifers (Proceedings, TOUGH Symposium)*. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, 12-14
- Green, C., Ennis-King, J Pruess, K. 2009. Effect of Vertical Heterogeneity on Long-Term Migration of CO₂ in Saline Formations. *Energy Procedia*, 1, 1823-1830
- IGME. 2014. Atlas de estructuras del subsuelo susceptibles de almacenamiento geológico de CO₂ en España. ISBN: 978-84-7840-935-8; 211 p.
- IGME. 2014. *Mapa de almacenes geológicos potenciales de CO₂ en España* Escala 1:1.000.000. ISBN: 978-84-7840-928-0.
- Izgec, O., Demiral, B., Bertin, H. 2008. CO₂ injection into Saline Carbonate Aquifer Formations. *Transport in Porous Media*, 72, 1-24
- Jordan, P., Doughty, C. 2009. Sensitivity of CO₂ migration estimation on reservoir temperature and pressure uncertainty. *Energy Procedia*, 1, 2825-2832
- Kim, J., Finsterle, S. 2003. *Application of automatic differentiation in TOUGH2 (ECO2)*. University of California. Lawrence Berkeley National Laboratory. Paper LBNL-52503
- Kneafsey, T. Pruess, K. 2010. Laboratory Flow Experiments for Visualizing Carbon Dioxide-Induced, Density-Driven Brine Convection. *Transport in Porous Media*, 82, 123-139
- Leetaru, H. Frailey, S. Damico, J. 2008. Understanding CO₂

- Plume Behavior and Basin-Scale Pressure Changes during Sequestration Projects through the use of Reservoir Fluid Modeling. *Greenhouse Gas Control Technologies*, 1, 1799-1806.
- Pan, L., Oldenburg, C., Wu, Y.S., Pruess, K. 2008. Wellbore flow model for carbon dioxide and brine. *Greenhouse Gas Control Technologies*, 1, 71-78.
- Pau, G., Bell, J. Pruess, K. 2010. High-resolution simulation and characterization of density-driven flow in CO₂ storage in saline aquifers. *Advances in Water Resources*, 33, 443-455.
- Prévost, J., Fuller, R., Altevogt, A., Bruant, R., Scherer, G. 2005. *Numerical Modeling of Carbon Dioxide Injection and Transport in Deep Saline Aquifers*. Department of Civil and Environmental Engineering. Princeton University
- Pruess, K. 2008. On CO₂ fluid flow and heat transfer behavior in the subsurface, following leakage from a geologic storage reservoir. *Environmental Geology*, 54, 1677-1686
- Pruess, K., Garcia, J.E.. 2002. *Multiphase flow dynamics during CO₂ disposal into saline aquifers*. Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California.
- Pruess, K., Zhang, K. 2008. *Numerical Modeling Studies of The Dissolution-Diffusion-Convection Process During CO₂ Storage in Saline Aquifers*. Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California.
- Spycher, S., Prues, K. 2009. A Phase-Partitioning Model for CO₂-Brine Mixture at Elevated Temperatures and Pressures: Application to CO₂-Enhanced Geothermal Systems. *Transport in Porous Media*, 82, 173-196.
- Talman, S., Adams, R. 2004. Adapting TOUGH2 for general equations of state with applications to geological storage of CO₂. *Computers & Geosciences*, 30, 543-552.
- Van Genuchten, M. 1980. A closed-form for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44, 892-898.
- Yamamoto, H. 2008. PetraSim. A Graphical User Interface for the TOUGH2. *Ground Water*, 46, 525-528.
- Yamamoto, H., Zhang, K. 2009. Numerical investigation concerning the impact of CO₂ geologic storage on regional groundwater flow. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 3, 586-599.
- Zhang, K., Doughty, C. 2007. *Efficient parallel simulation of CO₂ geologic sequestration in saline aquifers*. University of California. Paper LBNL 63316.

Recibido: diciembre 2014

Revisado: febrero 2015

Aceptado: abril 2015

Publicado: diciembre 2015

