SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERÍA HIDRÁULICA

XXV CONGRESO CHILENO DE INGENIERÍA HIDRÁULICA

ESTUDIO NUMÉRICO SOBRE PROCESOS DE TRANSPORTE EN ALMACENAMIENTO DE CO_2 EN ACUÍFEROS SALINOS USANDO CELDA HELE-SHAW

JULIO LEYRER HENRÍQUEZ.[1]
JUVENAL LETELIER VILLALÓN .[2]

RESUMEN

Una solución de geoingeniería para mitigar el CO_2 en la atmosfera terrestre es el almacenamiento geológico de CO_2.. El CO_2 es inyectado bajo la superficie atrapándolo y evitando que sea liberado a la atmósfera por periodos que pueden superar los 1000 años de duración. Una vez inyectado el CO_2 supercrítico que es menos denso que el agua, provoca que se eleve y forme una capa límite de CO_2 por debajo del sello del acuífero, el cual por difusión se mezcla con la columna de agua aumentando su densidad, dando paso a la advección vertical por gravedad del fluido rico en CO_2. Este proceso puede acelerar la disolución de CO_2 y aumentar la seguridad de la captura de CO_2. Sin embargo, existe una gran dificultad de implementar experimentos en laboratorio que describan el fenómeno considerando las escalas de tiempo. Por lo anteriormente descrito, se propone un estudio del proceso de homogenización de mezcla de dos fluidos miscibles, basado en el modelo numérico análogo aplicado a los fenómenos de transporte para una celda Hele-Shaw, donde se considera la dispersión provocada por la longitud de la apertura de la celda mediante el factor de anisotropía.

[1] Programa Doctorado en Fluidodinámica, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile - email: jleyrer@ing.uchile.cl
[2] Profesor Asistente, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile – email: juvenal.letelier@uchile.cl

1. INTRODUCCIÓN

Actualmente, diversos episodios de sequias, lluvias torrenciales y olas polares a nivel mundial se han prolongado e incluso agravado debido al cambio climático y al aumento global de temperatura. Si bien, se pensó que la acción antropogénica no afectaba a gran escala el clima, estudios científicos ubican la acción humana como un responsable del cambio climático. En particular, el panel intergubernamental del cambio climático (IPCC) en su 5to reporte, (AR5) mostro que el incremento de la temperatura sigue una directa relación al aumento de emisiones de gases de efecto invernadero de origen antropogénico, los cuales han sido liberados de forma exponencial. Una tecnología prominente para la mitigación de los efectos del calentamiento global es el almacenamiento geológico de CO_2. Esta tecnología inyecta el CO_2 bajo la superficie atrapándolo y evitando que el CO_2 sea liberado a la atmosfera por periodos que pueden superar los 1000 años de duración. Existen varios mecanismos de captura de CO_2, de los cuales los más seguros son el almacenamiento de CO_2 por disolución en un acuífero saturado y la precipitación mineral.

El conocimiento del comportamiento de la disolución de CO_2 en acuíferos salinos y como estas interacciones se relacionan con las propiedades del acuífero es relevante, dado que la seguridad y duración del secuestro está ligado a la tasa de disolución y precipitación del CO_2 en el acuífero.
Para la implementación de la tecnología de almacenamiento de CO_2 es necesario comprender y modelar de manera precisa el fenómeno de convección en medios porosos en las fallas geológicas, dado las grandes escalas espaciales y temporales involucradas (Neufeld et al. 2010; Riaz et al. 2006). Una vez inyectado el CO_2 supercrítico, el cual es menos denso que el agua, se eleva y forma una capa de CO_2 por debajo del sello del acuífero, no obstante, el CO_2 por difusión se mezcla con la columna de agua aumentando su densidad, dando paso a la convección vertical del líquido rico en CO_2 (Slim and Ramakrishnan 2010). Los modelos de flujos Sub-Superficiales están gobernados por las ecuaciones de Darcy y Advección-Difusión, los cuales, están controlados por la permeabilidad de la formación geológica. La Convección en Medios Porosos ha sido estudiada ampliamente, sin embargo, normalmente se desprecia el mecanismo de transporte por dispersión, sobre estimando la eficiencia en el transporte de escalares (Hidalgo et al. 2012; Neufeld et al. 2010). Esto ocurre no solo en los análisis matemáticos y numéricos, sino también en los experimentales. Algunos análisis numéricos de convección en medios porosos han considerado la dispersión y se ha observado que provoca la reducción el tiempo de inicio y la eficiencia del transporte por convección (Letelier, Mujica, and Ortega 2019). Además, otros artículos experimentales proponen que la variación en el patrón de convección se debe a la dispersión mecánica (Hidalgo and Carrera 2009; Letelier et al. 2019).

2. ALMACENAMIENTO DE CARBONO EN FORMACIONES GEOLÓGICAS

El CO_2 generado por procesos industriales se captura inyectándolo bajo tierra en formaciones geológicas. Del mismo modo, se ha sugerido también que el CO_2 se almacene en las profundidades del océano, esto podría hacerse disolviéndolo a una profundidad media entre 1 a 3 km, donde el CO_2 es más denso que el agua de mar. Bajo la superficie de nuestro planeta hay grandes reservorios de carbono, donde en su mayoría el CO_2 se encuentra como carbón, petróleo, gas y rocas carbonatadas (Mathieu 2006). El almacenamiento geológico de CO_2 ha sido un proceso natural en la corteza superior de la tierra durante millones de años, donde el CO_2 que proviene de las

actividades biológicas, volcánica y reacciones químicas entre rocas y fluidos, se acumula en forma natural como minerales de carbonato, forma gaseosa o en estado supercrítico. La primera adaptación ingenieril de la inyección de CO_2 a formaciones geológicas fue en Texas, USA en la década de los 1970 como parte de un proyecto de recuperación de petróleo (Mathieu 2006). La alternativa de almacenamiento geológico como mitigación de los gases de efecto invernadero fue propuesto por primera vez en la década 1970, sin embargo, solo hasta comienzos de la década de 1990 distintos grupos de investigación potenciaron la idea, adquiriendo credibilidad en el mundo científico (Van Der Meer, Van Der Straaten, and Griffioen 1995). En las últimas décadas el almacenamiento geológico de CO_2 ha adquirido un notable interés para disminuir las emisiones antropogénicas de CO2. Incluso algunos autores citan que el potencial de almacenamiento de CO_2 corresponde a dos tercios de la producción por combustión del planeta (Holt, Jensen, and Lindeberg 1995). En particular, la capacidad de almacenamiento de CO_2 tiene un potencial de crecimiento de mitigación que puede alcanzar 10Gt(CO_2)/yr (Lawrence et al. 2018), lo que la convierte en una solución atractiva para el secuestro geológico a gran escala.

3. MARCO TEORICO SOBRE LA DISOLUCION DE CO_2

Debido al auge de la industria de fertilizantes en la primera mitad del siglo XX diversos investigadores abordaron la solubilidad de CO_2 a alta presión en agua (Weibe and Gaddy 1939), dando el inicio para el estudio en medios porosos. El desarrollo de esta tecnología está fuertemente ligado a la inyección de CO_2 para la recuperación de hidrocarburos, la cual diversos autores e inventores investigaron la forma de maximizar su extracción. La tecnología de transporte, compresión e inyección está ampliamente probada debido al uso de CO_2 para la recuperación de hidrocarburos.(Ennis-King y Paterson 2003). Al inyectar CO_2 en un depósito geológico grande (ancho >> alto) homogéneo, el mecanismo que domina el fenómeno es la gravedad y el gradiente natural de temperatura solo será compensado parcialmente por el gradiente de presión. No obstante, debido a la difusión de CO_2 a la columna de agua subterránea se provocará un aumento en el gradiente de densidad obligando a generar una corriente convectiva vertical (Van Der Meer et al. 1995). La densidad varia linealmente con la concentración de CO_2 en el fluido provocando la precipitación y el fenómeno de convección del CO_2 (Ennis-King y Paterson 2003). La disolución de CO_2 en formaciones de salmuera mejora considerablemente la seguridad del almacenamiento, ya que el CO_2 disuelto en la salmuera ya no flota y precipita moviéndose a las zonas más profundas del acuífero. Hay tres mecanismos principales que contribuyen al proceso de disolución del CO_2: (a) La difusión de CO_2 fuera de la fase de salmuera y de la mezcla, lo que permitirá una mayor disolución de CO_2 supercrítico, (b) Reacciones entre la salmuera rica en CO_2 y la mineralogía del acuífero o minerales precipitados de carbonato, que pueden cambiar las propiedades físico químicas de la salmuera, (c) Convección impulsada por la densidad debido a la mayor densidad de salmuera saturada de CO_2 (aproximadamente 10 kg / m^3 más densa) que la de la salmuera insaturada (Xu, Chen, and Zhang 2006). De lo anterior, las preguntas claves más importantes son el mecanismo y la tasa de disolución de CO_2 en la salmuera. Uno de los trabajos más completos sobre la disolución de CO_2 supercrítico fue realizado por Riaz et al. 2006, el cual propone un modelo para simular el tiempo de inicio de la inestabilidad utilizando las ecuaciones de Darcy acopladas a las ecuaciones de advección convección. Varias investigaciones dan una amplia gama de tiempos críticos, tasa de crecimiento o número de ondas para el inicio de la inestabilidad. Sin embargo, no incluyen el tensor de dispersión dentro de su formulación y tampoco combinan el transporte de masa con los gradientes térmicos que se suponen en ambientes geotérmicos (Tilton

et al. 2013). Esto es importante de destacar debido a que la precipitación mineral del CO_2 sigue una directa relación con las propiedades del acuífero, como son la temperatura y presión, y al no poseer herramientas precisas para conocer que ocurre con estas propiedades limitan el proceso de crecimiento de estas tecnologías.

4. METODOLOGIA

El confinamiento de CO_2 en acuíferos salinos ha sido modelado por experimentos análogos que permiten conocer la dinámica de los procesos de transporte generados por la inestabilidad natural en el proceso. La celda Hele-Shaw es utilizada en estos escenarios debido a que su geometría es una buena aproximación de un modelo homogéneo de medio poroso y sus resultados experimentales pueden ser comparados con los modelos numéricos obtenidos de las ecuaciones Darcy Boussinesq. Se consideran dos fluidos en la misma fase (líquida) con dos diferentes concentraciones, los cuales, debido a la inestabilidad Rayleigh-Bénard, se mezclan homogenizándose. El comportamiento de la dinámica de mezcla y como esta se relaciona con el factor de anisotropía se puede observar mediante el estudio de la disipación escalar media $\langle \varepsilon_\varphi \rangle$. La disipación escalar media permite evidenciar el efecto de los procesos de transporte sobre la homogenización de la mezcla y cualquier dependencia del número de Rayleigh se refleja en $\langle \varepsilon_\varphi \rangle$. Para nuestro estudio, se utilizará la estructura de adimensionalización de las ecuaciones de Navier-Stokes, incompresibilidad y Advección-Difusión propuestas por Letelier et al. 2019, las cuales consideran el factor de anisotropía de la celda (ϵ) y por ende la dispersión hidrodinámica, factor el cual es de interés en este trabajo. Posteriormente, se utilizan los resultados de las simulaciones numéricas para obtener el valor de $\varepsilon_\varphi(\epsilon)$, el cual se compara con la tasa de la concentración al cuadrado. También, se obtiene la relación entre el número de Rayleigh y el promedio temporal de la disipación escalar media. Estos resultados se presentan en la sección 5 del presente artículo.
Las condiciones de contorno para este modelo son no flujo en las paredes del dominio (sistema cerrado), en el límite superior e inferior las condiciones son $\frac{\partial Sw}{\partial z}, \frac{\partial u}{\partial z}, w = 0 \ y \ S_w = 1$. Así también, para los limites verticales las condiciones son $\frac{\partial Sw}{\partial y}, \frac{\partial w}{\partial y} \ y \ u = 0$. Donde S_w es la fracción de masa, $u \ y \ w$ Velocidad horizontal y vertical respectivamente y eje horizontal y z eje vertical.

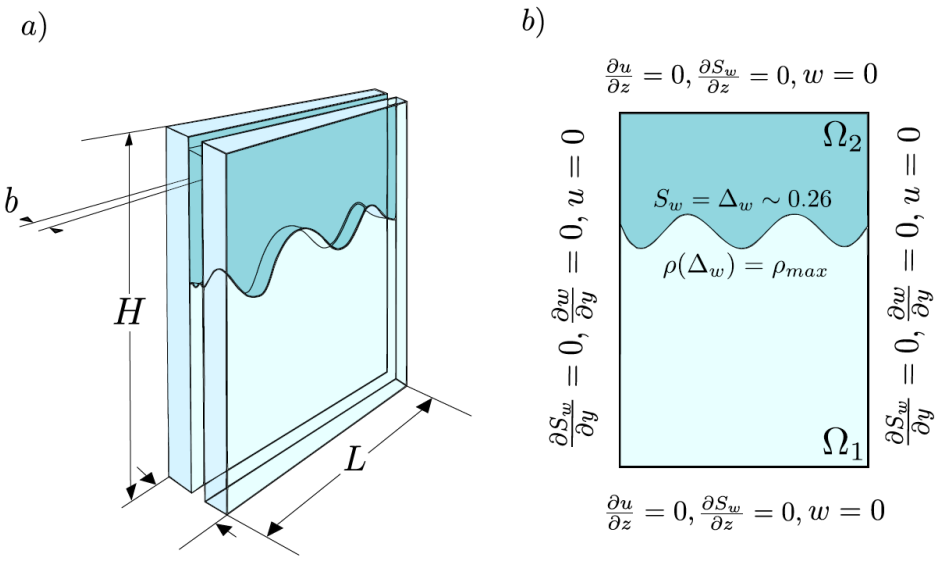

Figure 1. Esquema representativo del proceso de disolución de CO_2 en celdas Hele-Shaw. En (a) se presenta la geometría de la celda donde H es la altura, L el ancho y b es el espesor de la separación entre las placas. En (b) se muestran las condiciones de borde del modelo de advección producida por la mezclas dentro de la celda Hele-Shaw, con Ω_1 representando al agua desionizada, Ω_2 al PPG y Δ_ω concentración en fracción de masa. Además, la curva al centro del esquema representa la isopicnal de máxima densidad a una fracción de masa de $0{,}26\ wt\%$. Se consideran condiciones de no flujo para todo el dominio.

En la Figura 1 se muestra el esquema de las condiciones de borde consideradas en este problema. Este modelo análogo considera las propiedades de dos fluidos completamente miscibles con concentraciones distintas, donde se utiliza Propilene–Glycol (PPG) y agua desionizada (H_2O). La medida de la concentración será la fracción de masa del agua S_W en (wt%). La inestabilidad hidrodinámica se debe a que la densidad de la mezcla a una concentración de S_w~0,26, es máxima. Es decir, la densidad de la mezcla a esta concentración es mayor que cualquiera de los dos fluidos puros o mezclados en otra proporción. Por consiguiente, se genera la disolución del PPG en el agua por medio del descenso de plumas verticales advectadas por la influencia de la gravedad. Por lo tanto, para modelar este fenómeno se utiliza la siguiente ecuación constitutiva, la cual sigue un perfil parabólico que describe el comportamiento de la densidad según la concentración. En la Figura 2 se presenta el perfil parabólico de la densidad de la mezcla entre el PPG y el agua. La ecuación. (1) corresponde al perfil de densidad utilizado en este estudio.

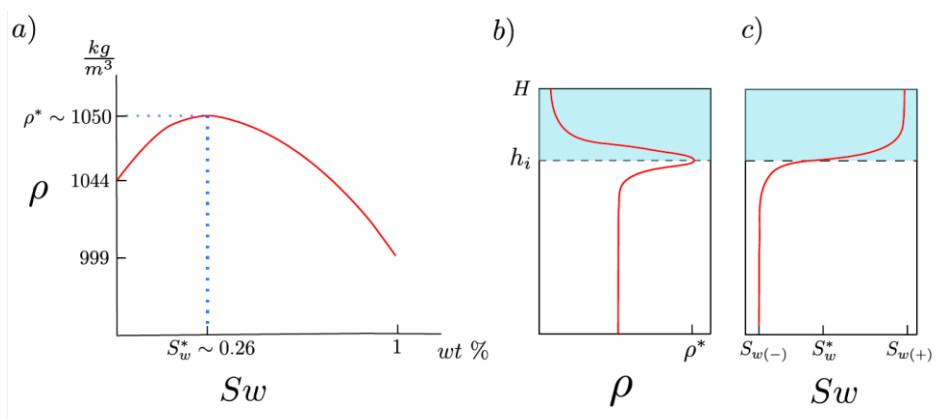

Figure 2. En (a) se presenta el perfil de la densidad ρ en función de la concentración S_w para dos fluidos micibles (PPG y agua). Se observa el valor máximo de la densidad cuando la concentración alcanza $\sim 0{,}26\ wt\%$. En (b) y (c) se presentan los perfiles

verticales de densidad y concentración respectivamente, donde la altura h_i corresponde la altura donde se presenta la isopicnal de máxima densidad.

$$\rho(S_w) = \rho_a + \frac{2\Delta\omega(\rho_a - \rho_{in})}{1 - 2\Delta\omega} \cdot S_w - \frac{(\rho_a - \rho_{in})}{1 - 2\Delta\omega} \cdot {S_w}^2 \qquad (1)$$

Donde S_w es la concentración de masa del fluido 2, ρ_a es la densidad constante del fluido 1, ρ_{in} es la densidad constante del fluido 2 y $\Delta\omega$ es la concentración para la máxima densidad. Para este modelo es necesario generar la inestabilidad para simular como responde el fenómeno dentro de la celda Hele-Shaw. Sin embargo, esto numéricamente puede generar problemas. Para generar analíticamente la condición inicial numérica, se debe difuminar levemente la condición inicial matemática. Al considerar la velocidad $(\vec{u} = 0)$ y resolviendo la ecuación de difusión para tiempos pequeños $(t \sim 10^{-5})$. De esta forma encontramos la expresión para la concentración de forma analítica, la cual utilizaremos como condición inicial (ecuación (2)). Donde L_z es la altura de la celda, hi a altura de la interface y t el tiempo.

$${S_w}^{(0)} = \left[1 - \frac{hi}{Lz}\right] - \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{n} \frac{1}{n} sen\left(\frac{n\pi hi}{Lz}\right) cos\left(\frac{n\pi z}{Lz}\right) e^{-n^2\pi^2 t} \qquad (2)$$

Ahora con la ecuación de la condición inicial y la ecuación constitutiva de las concentraciones del modelo es posible generar la estratificación inicial inestable.

5. MODELO MATEMÁTICO

Para modelos de flujos sub-superficiales las ecuaciones más utilizadas son las ecuaciones de Darcy y en particular para modelos de disolución de CO_2 supercrítico en salmuera se usan las ecuaciones de Darcy acopladas a las de advección-difusión para transporte escalar. El transporte escalar puede ser modelado por:

Darcy: $$\mu K^{-1}\vec{u} = -\nabla p + \rho(\varphi) g \hat{z} \qquad (3)$$

Advección-Difusión: $$\partial_t \varphi + \vec{u} \cdot \nabla\varphi = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}\nabla\varphi) \qquad (4)$$

Incompresibilidad: $$\nabla \cdot \vec{u} \qquad (5)$$

Donde $\vec{u}$ campo de velocidades, μ viscosidad dinámica, g es la aceleración de gravedad, p es la presión, K permeabilidad, φ un escalar, $\boldsymbol{D}$ es el tensor de dispersión hidrodinámica, la cual a su vez corresponde a $\boldsymbol{D} = (k_\varphi + \alpha_T|u|)\delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T)u_i u_j/|u|$ con k_φ difusividad, α_L dispersión longitudinal, α_T dispersión transversal y ρ es la densidad que se define como $\rho = \rho_a + \Delta\rho\varphi$ con ρ_a densidad de referencia y $\Delta\rho$ el contraste de densidad máximo. Para la representación del transporte de solutos generados dentro de la fractura geológica utilizaremos la aproximación de una celda Hele-Shaw, donde su geometría esta descrita por b x H x L, donde b es la apertura de la celda en dirección $\hat{x}$, H es la altura en dirección $\hat{z}$ y L es el ancho en dirección $\hat{y}$. Para este estudio se utilizara φ como la concentración de masa S_w que existirá en nuestro volumen de control, junto con considerar que $b \ll H$, con lo cual es posible describir el modelo con las siguientes ecuaciones:

$$\nabla^* \cdot \mathrm{u}^* = 0 \tag{6}$$

$$\rho_a \left[\frac{6}{5}\frac{\partial \mathrm{u}^*}{\partial t} + \frac{54}{35}(\mathrm{u}^* \cdot \nabla^*)\mathrm{u}^*\right] = -\nabla^* P - \frac{\mu}{K}\mathrm{u}^* - \rho^*(S_w) g\hat{z} + \frac{6}{5}\rho_a \mu \nabla^{*2}\mathrm{u}^* - \frac{2}{35}\frac{gK}{k_s}(\mathrm{u}^* \cdot \nabla^* S_w)\hat{z} \tag{7}$$

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \mathrm{u}^* \cdot \nabla^* S_w = k_s \nabla^{*2} S_w + \frac{2}{35}\frac{K}{k_s}\nabla^* \cdot [(\mathrm{u}^* \cdot \nabla^* S_w)\mathrm{u}^*] \tag{8}$$

Donde $\mathrm{u}^* = \mathrm{u}\hat{x} + w\hat{z}$ es el campo de velocidad, P La presión modificada, g es la aceleración de gravedad, k_s es la difusividad molecular, μ es la viscosidad y ρ densidad. las ecuaciones (9-11) son derivadas de las ecuaciones para fluidos incompresibles de Navier-Stokes acopladas con la ecuación de Advección-Difusión para transporte de masa (Letelier et al. 2019). Con el fin de construir las ecuaciones adimensionales adecuadamente se proponen los siguientes parámetros adimensionales; para la posición $x^* = x \cdot H$, para la velocidad $u^* = \vec{u} \cdot u_c$, presión $P = p \cdot p_c$, donde $p_c = p'_c \mu u_c H/K$, con $p'_c = \frac{6}{5}p_c$, para tiempo $t^* = t \cdot t_c$, densidad $\rho^* = \Delta\rho \cdot \rho$, donde $\Delta\rho = \rho_{max} - \rho_a$, $\epsilon = \sqrt{K}/H$, además la velocidad característica $u_c = \frac{\Delta\rho g K}{\mu}$. Los números adimensionales utilizados en este modelo son el número de Prandtl $Pr = \vartheta/k_s$, número de Rayleigh $Ra = \frac{u_c H}{k_s}$, con la viscosidad cinemática $\vartheta = \mu/\rho$. Por lo tanto, y considerando las expresiones anteriores, el modelo se describe por las siguientes ecuaciones adimensionales:

$$\nabla \cdot \vec{\mathrm{u}} = 0 \tag{12}$$

$$\epsilon^2 \frac{Ra}{Pr}\left[\frac{\partial \vec{\mathrm{u}}}{\partial t} + \frac{9}{7}(\vec{\mathrm{u}} \cdot \nabla)\vec{\mathrm{u}}\right] = -\nabla p - S_w \hat{z} - \frac{5}{6}\vec{\mathrm{u}} + \epsilon^2 \nabla^2 \vec{\mathrm{u}} - \frac{2}{35}\frac{gK}{k_s}(\vec{\mathrm{u}} \cdot \nabla S_w)\hat{z} \tag{13}$$

$$\frac{\partial S_w}{\partial t} + \vec{\mathrm{u}} \cdot \nabla S_w = \frac{1}{Ra}\nabla^2 S_w + \frac{2}{35}Ra\nabla \cdot [(\vec{\mathrm{u}} \cdot \nabla S_w)\vec{\mathrm{u}}] \tag{14}$$

6. TASA DE DISIPACIÓN ESCALAR

Un parámetro que ayuda a entender el fenómeno de inestabilidad de mezclas entre dos fluidos con concentraciones distintas y su relación con la dispersión provocada por el espacio de separación entre las placas de la celda Hele-Shaw, es la tasa de disipación escalar media $\langle \varepsilon_\varphi \rangle$ (Jha y Cueto-Felgueroso 2001), parámetro que entrega valiosa información sobre la evolución temporal de la mezcla advectiva en un dominio determinado (Hidalgo et al. 2012). Además, es posible observar que cualquier dependencia del proceso de homogenización de la mezcla y el número de Rayleigh se refleja en la $\langle \varepsilon_\varphi \rangle$. La tasa de homogenización de mezcla se puede cuantificar por medio de la varianza de concentración en el dominio, $\sigma^2 = \langle S_w^2 \rangle - \langle S_w \rangle^2$, donde $\langle S_w \rangle(t) = \int_\Omega c(x,z,t)d\Omega$ y $\langle S_w^2 \rangle(t) = \int_\Omega [c(x,z,t)]^2 d\Omega$ corresponden al promedio de la concentración y su cuadrado respectivamente. Por tanto, al derivar las ecuaciones que gobiernan el fenómeno y considerar el factor de anisotropía, es posible obtener una expresión que relaciona la evolución de la mezcla y la

disipación escalar media aplicada al modelo análogo Hele-Shaw. Para obtener la varianza de concentración, se comienza por integrar la ecuación de transporte encontrando la relación del promedio de la concentración (ecuación (15)). De igual forma, se multiplica la ecuación de transporte por la concentración, para luego integrar sobre todo el dominio y obtener la ecuación (16).

$$\frac{\partial\langle\varphi\rangle}{\partial t} = F \tag{15}$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial\langle\varphi^2\rangle}{\partial t} = F - \langle\varepsilon_\varphi\rangle \tag{16}$$

Donde F es el flujo, con $\varphi = S_w$ y ε_φ es la disipación escalar. Al ser un sistema cerrado el flujo permanece constante, por lo tanto, quien aporta información relevante es la disipación escalar media. Para obtener esta expresión matemática aplicada al modelo análogo Hele-Shaw considerando la dispersión hidrodinámica, se utilizan las ecuaciones adimensionales (ecuaciones 12-14). En particular, la ecuación de Advección-Difusión (Ecuación (14)) se multiplica a ambos lados por el campo escalar S_w.

$$\underbrace{S_w\left(\frac{\partial S_w}{\partial t} + \mathrm{u}\cdot\nabla S_w\right)}_{I} = \underbrace{S_w\frac{1}{Ra}\nabla^2 S_w}_{II} + \underbrace{S_w\frac{2}{35}Ra\nabla\cdot[(\mathrm{u}\cdot\nabla S_w)\mathrm{u}]}_{III} \tag{17}$$

Para el primer término I utilizamos la identidad $\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial f^2}{\partial t}$ para obtener:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial {S_w}^2}{\partial t} - uS_w\cdot\nabla S_w \tag{18}$$

Luego para el termino II utilizamos la primera identidad de Green $\nabla\cdot(f\nabla f) = \|\nabla f\|^2 + f\cdot\nabla^2 f$ y obtenemos la siguiente expresión:

$$\frac{1}{Ra}(\nabla\cdot(S_w\nabla S_w) - \|\nabla S_w\|^2) \tag{19}$$

Por último, el termino III desarrollamos su paréntesis con la identidad vectorial $\nabla\cdot fg = f\nabla\cdot g + g\cdot\nabla f$, junto a la identidad $f\nabla\cdot\left[\left(\nabla(S_w u)\right)u\right] = \nabla\cdot[\nabla\cdot(S_w u)S_w u] - [\nabla\cdot(S_w u)]^2$ y utilizamos la primera ecuación de incompresibilidad para obtener la siguiente expresión:

$$\frac{2}{35}\epsilon^2 Ra\, S_w\, \nabla\cdot[(\nabla\cdot u\, S_w)u] \tag{20}$$

Reordenamos para identificar los términos de la ecuación (17) y encontramos la disipación escalar:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial {S_w}^2}{\partial t} - uS_w\cdot\nabla S_w = \frac{1}{Ra}\nabla\cdot(S_w\nabla S_w) - \frac{1}{Ra}\|\nabla S_w\|^2 + \frac{2}{35}\epsilon^2 Ra\, S_w\, \nabla\cdot[(\nabla\cdot(u\, S_w))u] \tag{21}$$

$$\varepsilon_{\varphi} = \frac{1}{Ra}\|\nabla S_w\|^2 + \frac{2}{35}\epsilon^2 Ra(\nabla \cdot (S_w\, u))^2 \tag{22}$$

Finalmente, la expresión matemática para la relación entre la tasa de mezcla, el flujo de disolución y la tasa de disipación escalar media se encuentra al integrar sobre todo el dominio. El promedio espacial en el dominio para una función $f = f(x)$ se define como $\langle f \rangle_h(z) = 1/L \int_0^L f(x)dx$ con $\langle f \rangle = \int_0^1 \langle f \rangle_h(z)dz$, donde $L = l/H$ es la relación de aspecto. Es decir, la disipación escalar media se define como $\int_0^L \int_0^1 (\varepsilon)dxdz$. Los términos a la derecha del signo igual en la ecuación (21) (sin considerar (ε)) corresponden al flujo en el dominio. Dado que las condiciones de borde en todo el dominio son de no-flujo, la integral para el flujo es nula. Por lo tanto, la ecuación para la concentración media al cuadrado se reduce a:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial \langle {S_w}^2 \rangle}{\partial t} = -\left\{\frac{1}{Ra}\langle \|\nabla S_w\|^2 \rangle + \frac{2}{35}\epsilon^2 Ra \langle\, (\nabla \cdot S_w \mathrm{u})^2 \rangle\right\} \tag{23}$$

La ecuación (23) presenta una relación entre la evolución de la concentración y la tasa de disipación escalar media, la cual permite observar la dependencia entre el número de Rayleigh y el proceso de mezclado.

7. RESULTADOS

Bajo el contexto de este estudio se realizaron simulaciones numéricas para el modelo análogo de la celda Hele-Shaw usando el software Flow-Solve. El paso temporal es definido cumpliendo con la condición Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Para rangos de $4000 \leq Ra \leq 6300$ el valor del número CFL son $0{,}005 - 0{,}001$, mientras que para rangos de $Ra \geq 6300$ el valor CFL fue alrededor de $0{,}01$. Para la resolución espacial se considera una grilla de $256\, x\, 768$ y con una relación rectangular de aspecto de $L' = 3$ considerando la longitud mayor para el eje z. Para las simulaciones se consideraron cinco valores de número de Rayleigh diferentes Ra = 3981, 6309, 10000, 15848 y 20000 con factores de anisotropía $\epsilon = 5\, x\, 10^{-4}$, $\epsilon = 1\, x\, 10^{-3}$ y $\epsilon = 5\, x\, 10^{-3}$, manteniendo el número de Prandtl constante $Pr = 10$. A partir de estos valores de entrada se calculan los demás parámetros necesarios para la simulación numérica.

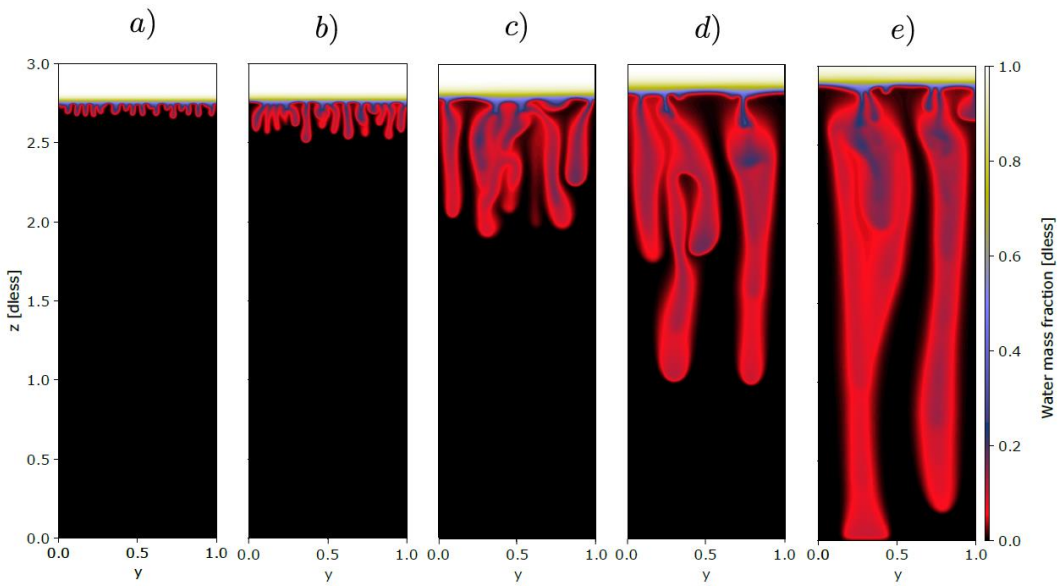

Figure 3.Mapa de concentración para simulaciones numéricas del proceso de homogenización de la mezcla del modelo análogo Hele-Shaw. Se considera los parámetros adimensionales siguientes: Ra=6309, Pr=10 y $\epsilon = 5\ x\ 10^{-4}$. Para las figuras (a, b, c, d y e) se consideraron pasos temporales de cómputo de 20, 40, 160, 300 y 450 respectivamente.

La Figura 3 presenta a modo de ejemplo la evolución para distintos pasos de simulación para el fenómeno producido por la mezcla. Simulación numérica con $\epsilon = 5$ x 10^{-4}; Ra=6309 y Pr=10. En la Figura 3.a se aprecia la formación inicial de plumas a lo largo de la interface, provocados por la inestabilidad de densidades de los fluidos miscibles. Estas presentan un gran número de plumas a lo largo de la interface y un tamaño longitudinal similar. En 3.b la concentración es advectada longitudinalmente por el flujo provocado por la presencia de un perfil de velocidades alargando las plumas. Posteriormente, en la Figura 3.c se aprecia con mayor detalle el estiramiento sufrido por las plumas. Este estiramiento provoca el aumento de los gradientes trasversales de concentración, lo cual fomenta la difusión transversal provocando que las plumas se junten horizontalmente mientras transportan la masa en dirección vertical. Cercano a la interface en zonas de alta densidad, las plumas se unen alimentando a las plumas advectadas más abajo (Neufeld et al. 2010; Riaz et al. 2006). En Figura 3.d se observa una disminución del número de plumas, las cuales se han unido logrando transportar la concentración al fondo del dominio. Finalmente, en la Figura 3.e se aprecia el contacto de las plumas con el fondo del dominio.

En la Figura 4 se presenta el promedio temporal de la tasa disipación escalar media como función del número de Rayleigh para distintos factores de anisotropía. Al observar las tres curvas presentadas en esta figura se aprecia que a mayor valor de ϵ, menor es el valor de $\overline{\langle\varepsilon\rangle}$. Fenómeno que crece al aumentar el Ra. El caso con $\epsilon = 5$ x 10^{-4} la curva evidencia una escasa dependencia al número de Rayleigh. Ocurre lo mismo para el caso de $\epsilon = 1$ x 10^{-3}. Resultados que permiten proyectar que a valores pequeños $\epsilon = 5$ x 10^{-4}, la relación entre $\overline{\langle\varepsilon\rangle}$ y Ra son independientes, cumpliendo así lo descrito en la literatura. Sin embargo, el efecto que tiene el factor de anisotropía se observa de forma evidente para el caso de $\epsilon = 5$ x 10^{-3}, donde el promedio de la disipación escalar media $\overline{\langle\varepsilon\rangle}$ presenta una proporcionalidad no lineal con Ra. A mayor valor de ϵ, la evolución de la disipación escalar media es más cercana a cero, es decir la homogenización de la mezcla a través del tiempo es más eficiente. Entendiendo como eficiencia que a igual tiempo advectivo,

mayor es la homogenización de la concentración en el dominio. Para modelos clásicos de Darcy-Boussinesq de advección de mezcla, la disolución y el subsecuente mezclado siguen una relación independiente al número de Rayleigh (Hidalgo et al. 2012; Jenny et al. 2014; Neufeld et al. 2010). Sin embargo, estos resultados muestran que al considerar el espacio entre las placas del modelo análogo Hele-Shaw, es decir al considerar $\epsilon \ll 0$, pero $\epsilon \neq 0$, se observa un escalamiento no lineal.

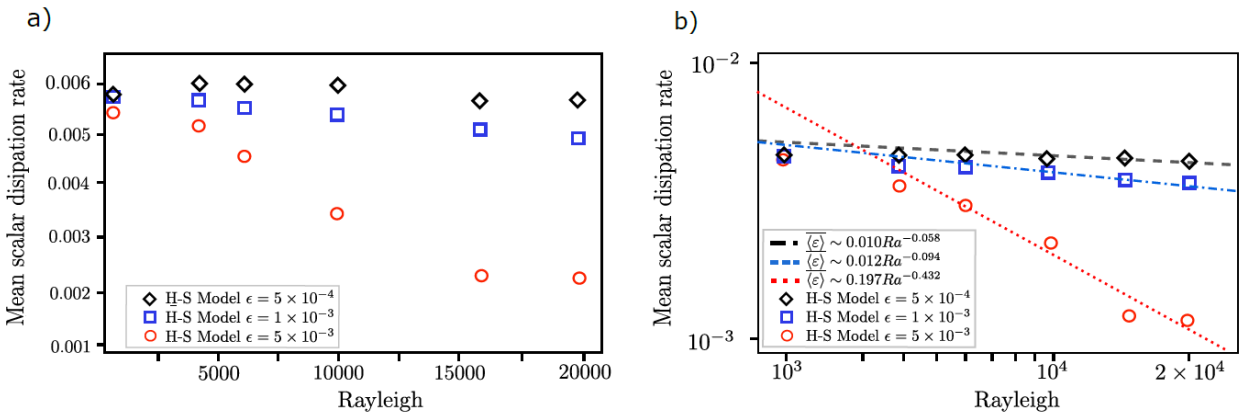

Figure 4. Curvas de ajuste exponencial Escala logarítmica para promedio temporal de la tasa de disipación escalar media en función del número de Rayleigh. Simulaciones numéricas para *Ra*=1000, 3981, 6309, 10000, 15848 y 20000 con $\epsilon = 5\ x\ 10^{-4}$, $\epsilon = 1\ x\ 10^{-3}$ y $\epsilon = 5\ x\ 10^{-3}$.

La Figura 4.a muestra los valores obtenidos mediante los análisis numéricos y el comportamiento del promedio temporal de la disipación escalar media en función del número de Rayleigh. Esto se resalta en la Figura 4.b donde se consideran las curvas de ajuste en escala logarítmica. Las curvas de ajuste propuestas siguen un modelo de regresión exponencial del tipo $\overline{\langle\varepsilon\rangle} = bRa^{n}$, el cual fue obtenido por medio del análisis numérico de mínimos cuadrados. Tanto para las curvas de $\epsilon = 5\ x\ 10^{-4}$ con $\overline{\langle\varepsilon\rangle}\sim 0{,}01 \pm 0{,}004\ Ra^{-0{,}058\pm 0{,}004}$ y $\epsilon = 1\ x\ 10^{-3}$ con $\overline{\langle\varepsilon\rangle}\sim 0{,}012 \pm 0{,}002\ Ra^{-0{,}094\pm 0{,}005}$ la tendencia es similar a los fenómenos de mezcla en medios poroso, es decir los efectos por dispersión son despreciables. Sin embargo, para $\epsilon = 5\ x\ 10^{-3}$ con $\overline{\langle\varepsilon\rangle}\sim 0{,}197 \pm 0{,}29 Ra^{-0{,}432\pm 0{,}142}$ los efectos provocados por la separación de las placas de la celda son dominantes, lo cual provoca un efecto sobre el proceso de mezclado. Esto también se observa en la ecuación (13), donde se aprecia la competencia entre el término de Darcy ($\mu K^{-1} u$) y el tensor de dispersión. Al aumentar el valor de ϵ mayor es K y a su vez menor es el término de Darcy. Así también, al disminuir el valor ϵ los valores del coeficiente de arrastre comienzan a dominar el fenómeno de homogenización de la mezcla. Al relacionar estos resultados con el comportamiento físico que ocurre dentro del volumen de control se hace evidente el efecto de la dispersión mecánica en el mezclado. Cuando se considera la longitud de separación en el modelo, aparece una nueva dimensión que provoca la dispersión hidrodinámica. Debido al gradiente generado por la diferencia de densidades, la concentración comienza a descender verticalmente por la influencia de la gravedad. Las plumas son estiradas provocando zonas de mayor velocidad que el promedio transversal presente en la mezcla. Este estiramiento genera el aumento de gradientes transversales de concentración fomentando la difusión en esa dirección y por consecuencia para tiempos mayores al tiempo difusivo característico transversal $l^2 D^{-1}$ se promueve la homogenización de la mezcla en esa dirección y con esto la aparición de la dispersión. Por lo tanto, para estudiar de forma detallada el fenómeno de transporte en la celda Hele-Shaw es necesario considerar la interacción de los tres fenómenos de transporte advección, difusión y dispersión.

8. CONCLUSIONES

La extensión del modelo de dos dimensiones propuesto en este estudio para describir el comportamiento de la advección de masa para una celda Hele-Shaw evidencia la importancia de considerar los efectos provocados por la apertura de la celda. El resultado generado de este estudio contribuye al conocimiento de la dinámica que ocurre bajo la superficie al inyectar CO_2 a acuíferos de salmuera, permitiendo a su vez, aportar a la solución de mitigación de gases de efecto invernadero a la atmosfera. La aplicación del modelo análogo Hele-Shaw descrito en el presente informe nos permite concluir lo siguiente: (i) Es posible considerar las ecuaciones propuestas en este estudio como una buena aproximación al fenómeno de advección de masa en las celdas Hele-Shaw, esto gracias a la relación observada entre las expresiones teóricas y las simulaciones numéricas. (ii) El comportamiento del promedio temporal de la disipación escalar media para valores $\epsilon < 1 \text{ x } 10^{-3}$ es independiente al número de Rayleigh y similar al descrito en literatura (Hidalgo et al. 2012; Jenny et al. 2014; Neufeld et al. 2010). (iii) En el marco de las simulaciones con distinto factor de anisotropía se observa que, a mayor valor de factor de anisotropía, mayor es la dependencia de $\overline{\langle\varepsilon\rangle}$ al número de Rayleigh. En particular, para valores de $\epsilon \sim 5 \text{ x } 10^{-3}$ se evidencia una dependencia no lineal al número de Ra. A su vez, a partir de estos resultados se propone la ley de escalamiento exponencial del tipo $\overline{\langle\varepsilon\rangle} = bRa^{n}$, la cual corresponde a $\overline{\langle\varepsilon\rangle} \sim 0{,}197Ra^{-0{,}432}$ para este caso. Estos resultados proveen evidencia importante del efecto de la dispersión mecánica en transporte de masa en medios porosos, en particular considerando el factor de anisotropía en las celdas Hele-Shaw.

REFERENCIAS

Birendra Jha, Luis Cueto-Felgueroso, and Ruben Juanes. 2001. “Fluid Mixing from Viscous Fingering.” Physical Review Letters 106.

Ennis-King, Jonathan, and Lincoln Paterson. 2003. “Role of Convective Mixing in the Long-Term Storage of Carbon Dioxide in Deep Saline Formations.” Proceedings - SPE Annual Technical Conference and Exhibition 2521–32. doi: 10.2523/84344-ms.

Hidalgo, Juan J., and Jesús Carrera. 2009. “Effect of Dispersion on the Onset of Convection during CO_2 Sequestration.” Journal of Fluid Mechanics 640:441–52. doi: 10.1017/S0022112009991480.

Hidalgo, Juan J., Jaime Fe, Luis Cueto-Felgueroso, and Ruben Juanes. 2012. “Scaling of Convective Mixing in Porous Media.” Physical Review Letters 109(26). doi: 10.1103/PhysRevLett.109.264503.

Jenny, Patrick, Joohwa S. Lee, Daniel W. Meyer, and Hamdi A. Tchelepi. 2014. “Scale Analysis of Miscible Density-Driven Convection in Porous Media.” Journal of Fluid Mechanics 749(4):519–41. doi: 10.1017/jfm.2014.229.

Lawrence, Mark G., Stefan Schäfer, Helene Muri, Vivian Scott, Andreas Oschlies, Naomi E. Vaughan, Olivier Boucher, Hauke Schmidt, Jim Haywood, and Jürgen Scheffran. 2018. “Evaluating Climate Geoengineering Proposals in the Context of the Paris Agreement Temperature Goals.” Nature Communications 9(1). doi: 10.1038/s41467-018-05938-3.

Letelier, Juvenal A., Nicolás Mujica, and Jaime H. Ortega. 2019. “Perturbative Corrections for the Scaling of Heat Transport in a Hele-Shaw Geometry and Its Application to Geological Vertical Fractures.” Journal of Fluid Mechanics 864:746–67. doi: 10.1017/jfm.2019.3.

Van Der Meer, L. G. H., R. Van Der Straaten, and J. Griffioen. 1995. “Storage of Carbon Dioxide in Aquifers in the Netherlands.” Studies in Environmental Science 65(PART B):1099–1104. doi: 10.1016/S0166-1116(06)80133-0.

Neufeld, Jerome A., Marc A. Hesse, Amir Riaz, Mark A. Hallworth, Hamdi A. Tchelepi, and Herbert E. Huppert. 2010. “Convective Dissolution of Carbon Dioxide in Saline Aquifers.” Geophysical Research Letters 37(22):2–6. doi: 10.1029/2010GL044728.

Pau, George S. H., John B. Bell, Karsten Pruess, Ann S. Almgren, Michael J. Lijewski, and Keni Zhang. 2010. “High-Resolution Simulation and Characterization of Density-Driven Flow in CO2 Storage in Saline Aquifers.” Advances in Water Resources 33(4):443–55. doi: 10.1016/j.advwatres.2010.01.009.

Riaz, A., M. Hesse, H. A. Tchelepi, and F. M. Orr. 2006. “Onset of Convection in a Gravitationally Unstable Diffusive Boundary Layer in Porous Media.” Journal of Fluid Mechanics 548:87–111. doi: 10.1017/S0022112005007494.

Slim, Anja C., and T. S. Ramakrishnan. 2010. “Onset and Cessation of Time-Dependent, Dissolution-Driven Convection in Porous Media.” Physics of Fluids 22(12). doi: 10.1063/1.3528009.

Tilton, Nils, Don Daniel, and Amir Riaz. 2013. “The Initial Transient Period of Gravitationally Unstable Diffusive Boundary Layers Developing in Porous Media.” Physics of Fluids 25(9). doi: 10.1063/1.4821225.

Weibe, R., and V. L. Gaddy. 1939. “The Solubility in Water of Carbon Dioxide at 50, 75 and 100°, at Pressures to 700 Atmspheres.” Journal of the American Chemical Society 61:315–19.

Xu, Xiaofeng, Shiyi Chen, and Dongxiao Zhang. 2006. “Convective Stability Analysis of the Long-Term Storage of Carbon Dioxide in Deep Saline Aquifers.” Advances in Water Resources 29(3):397–407. doi: 10.1016/j.advwatres.2005.05.008.