



Simulación de fenómenos de transporte en medios porosos destinados al almacenamiento de H₂ y/o captura de CO₂

Héctor José González Pérez

Tutores: Ricardo Torres y Joan Grau

8 de junio de 2022



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es



Contenido

- a. Introducción**
- b. Materiales y Métodos**
- c. Teoría**
- d. Resultados**
- e. Conclusiones**
- f. Referencias**

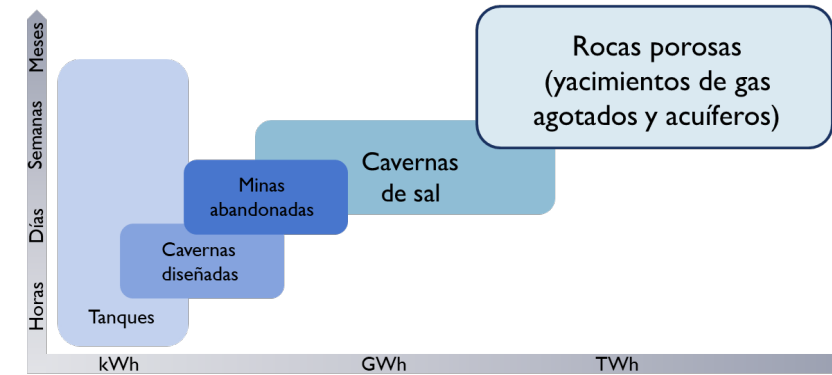
Introducción

El aumento de la demanda energética por el crecimiento poblacional se estima que se duplicará en los próximos 20 años, motivo por el cual la inminencia de la transición energética hacia fuentes renovables es mucho más vigente actualmente.

El hidrógeno como vector energético, así como la captura y almacenamiento del CO₂ van a ser clave en cualquier estrategia de transición/decarbonización para cumplir los retos planteados por la EU para el año 2050.

Pero hay un problema aun por resolver: la intermitencia estacional de las renovables requiere de un sistema de almacenamiento a gran escala temporal que las tecnologías de almacenamiento actuales no permiten.

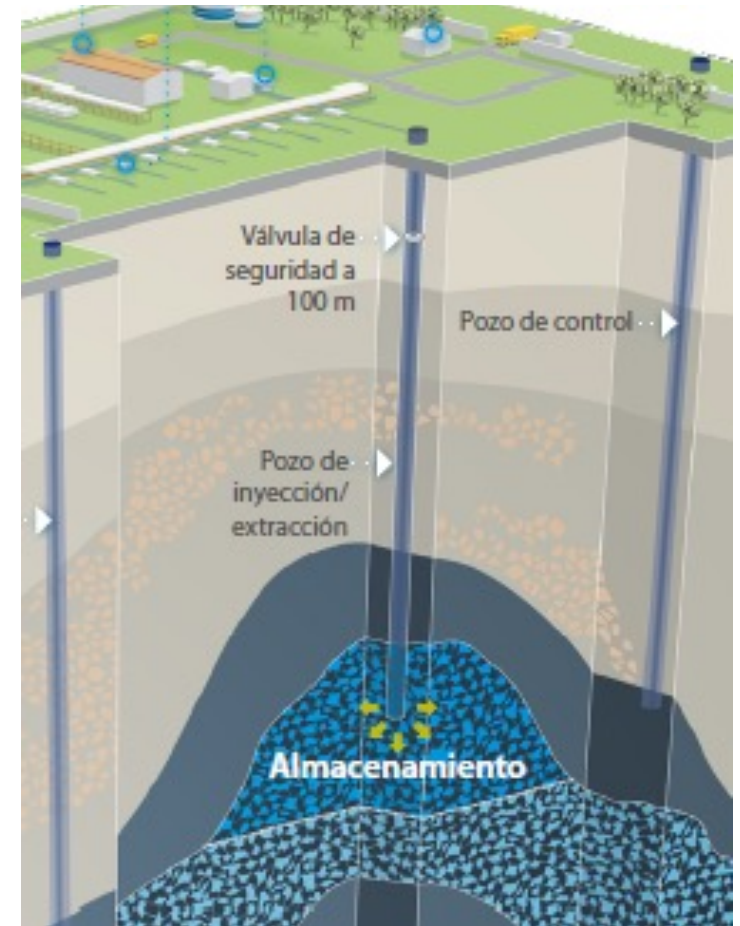
Un aspecto clave para la explotación de este recurso energético es la capacidad de su almacenamiento masivo que, además, permita cargas y descargas que se ajusten a la demanda de energía permitan la estabilidad de la red eléctrica.



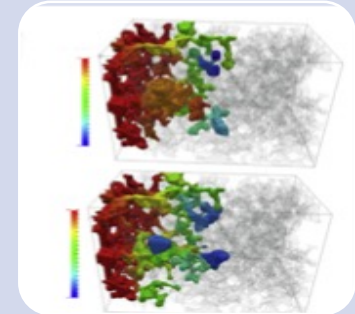
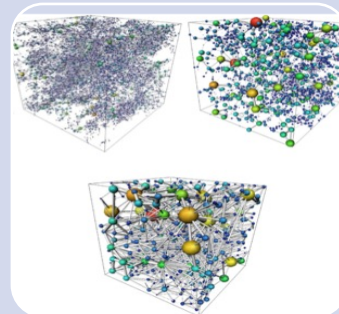
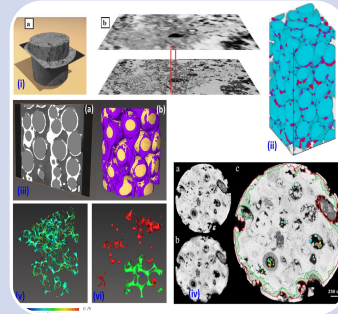
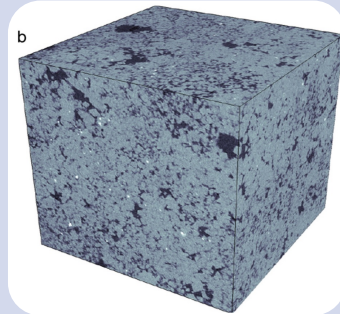
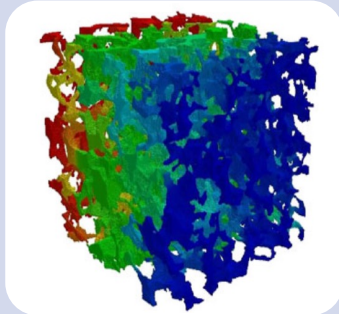
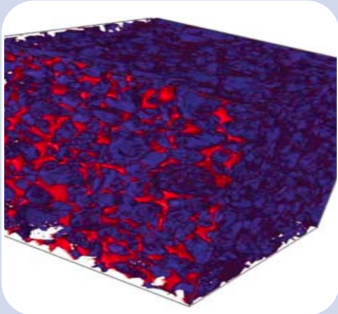
En el aspecto del almacenamiento, los yacimientos agotados y los acuíferos permitirán almacenar energía del orden de los TWh (Tera Watt-hora) durante largos periodos de tiempo, en la escala de los meses. De esta forma, es posible establecer estrategias de uso de energía a mediano y largo plazo haciendo viable el escalado de las tecnologías renovables.

Introducción

Pero, a diferencia de los hidrocarburos que se encuentran en el subsuelo en condiciones de estabilidad físico-química por millones de años, el hidrógeno o el CO₂ apenas comenzarán su reacción con el medio ambiente del subsuelo cuando sean inyectados. Esto deja muchas incógnitas por resolver. Muchas de las cuales tendrán respuesta desde el punto de vista de la escala del poro. Por tal motivo el objetivo de este trabajo es la evaluar la factibilidad de modelar los fenómenos de transporte en medios porosos del subsuelo para el hidrógeno y el dióxido de carbono haciendo uso del COMSOL Multiphysics.



Antecedentes



2008

- Modelling and simulation of Pore-Scale Multiphase fluid flow
- Pore-Network modelling / Lattice Boltzman / Monte Carlo / Molecular dynamics

2012

- Computations of Absolute Permeability on uCT images
- Mostaghimi / Blunt / Bijeljic

2012

- Digital Rock Physics Benchmarks Part I and II
- Andrá and others

2012

- X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems
- Wildenschild / Sheppard

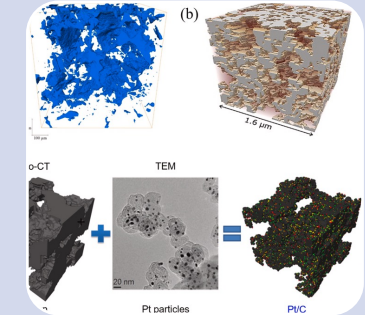
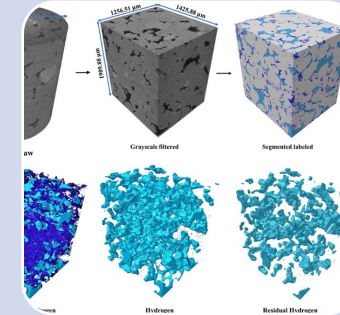
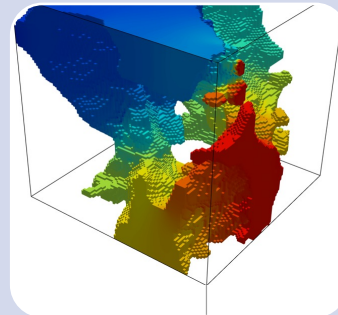
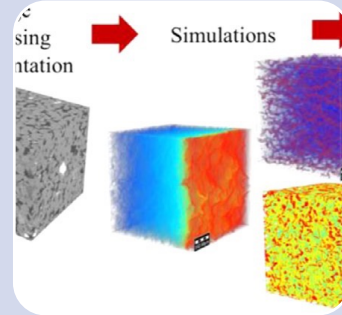
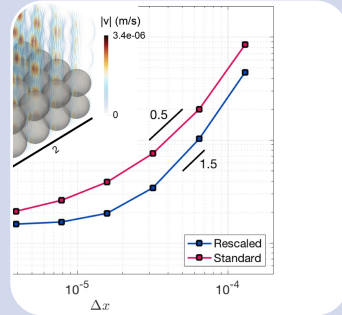
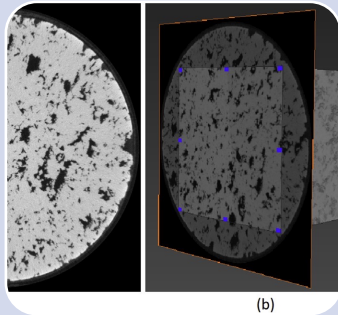
2013

- Pore-scale imaging and modelling
- Blunt / Bijeljic / Mostaghimi

2014

- Direct simulations of two-phase flow on micro-CT images of porous media and upscaling of pore-scale forces
- Raeini / Blunt / Bijeljic

Antecedentes



2018

- Structural characterization and numerical simulations of flow properties of standard and reservoir carbonate rocks using micro-tomography
- Islam / Sassi

2019

- Pore-scale permeability prediction for Newtonian and non-Newtonian fluids
- Eichheimer / Thielmann / Popov / Fujita / Kottwitz / Kaus

2019

- Rock properties from micro-CT images: Digital rock transforms for resolution, pore volume, and field of view
- Saxena / Hows / Hofmann / Alpak / Dietderich / Appel / Freeman / DJong

2021

- Estimating permeability of 3D micro-CT images by physics-informed CNNs based on DNS
- Gärttner / Alpak / Meier / Ray / Fran

2021

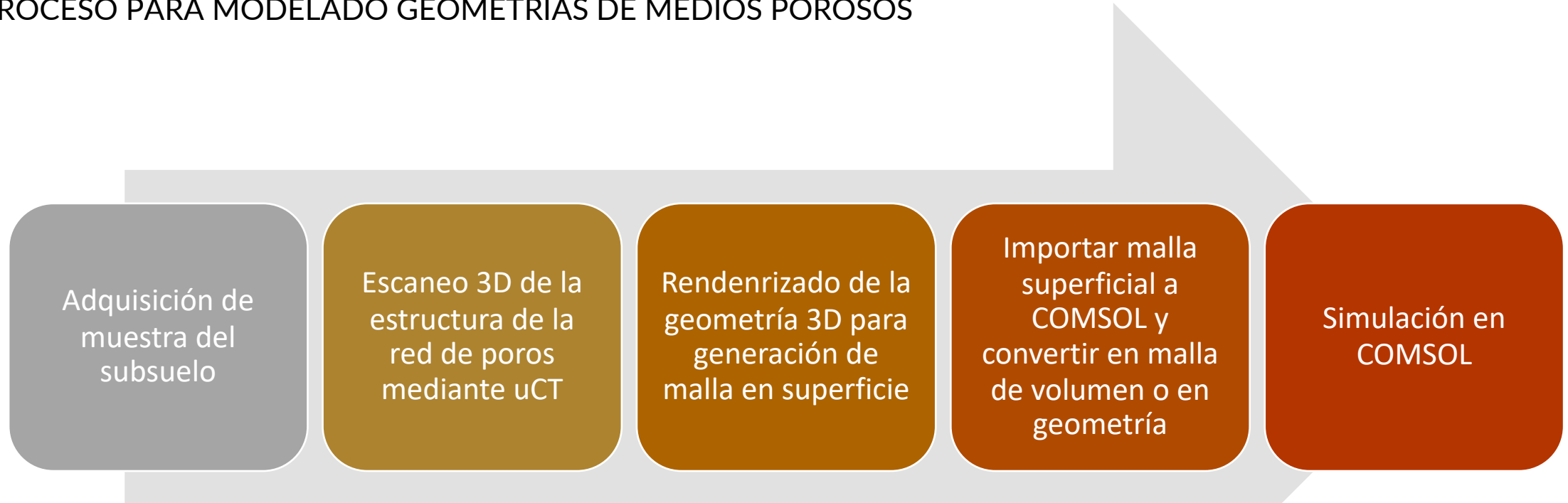
- Pore Scale Investigation of Hydrogen Injection in Sandstone via X-ray Micro-tomography
- Kumar / Al-Yaseri / Ghasemiziarani / Al-Bayati

2022

- Pore-scale modeling of complex transport phenomena in porous media
- Chen / He / Zhao / Kang / Li / Carmeliet / Shikazono / Tao

Materiales y métodos

PROCESO PARA MODELADO GEOMETRÍAS DE MEDIOS POROSOS



Materiales y métodos

MUESTRAS DEL SUBSUELO

- Dos muestras geológicas de areniscas
 - SS-121 → Arenisca de cantera de permeabilidad de 66 mD
 - AMPC2 → Arenisca de acuífero salino de permeabilidad de 775 mD
- Mini muestras en forma de cilindro (miniplug) para escaneo con uCT
 - SS-121 → Diámetro miniplug de 3 mm
 - AMPC2 → Diámetro miniplug de 5 mm

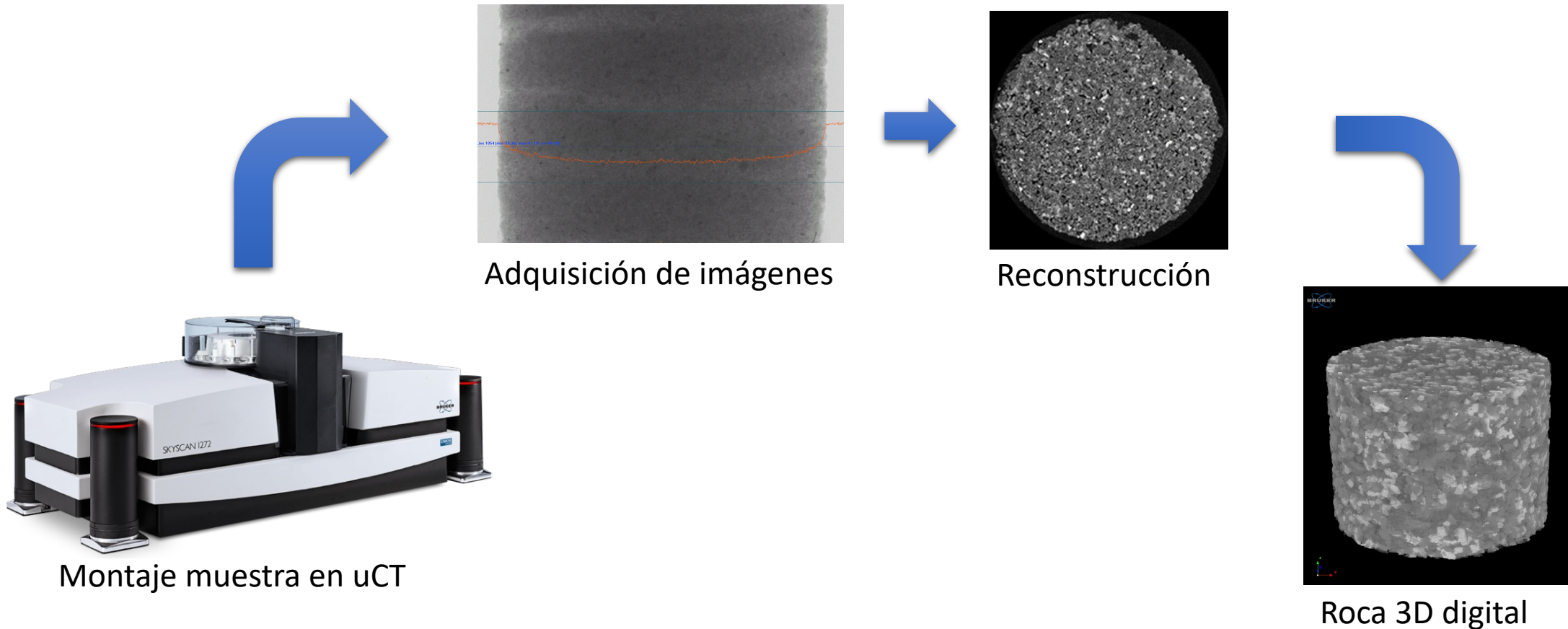
Sample ID	Porosity	Air permeability (mD)
SS-121	21%	66
AMPC2	23%	775



Mini muestras de arenisca geológicas para escaneo con micro-tomógrafo computarizado

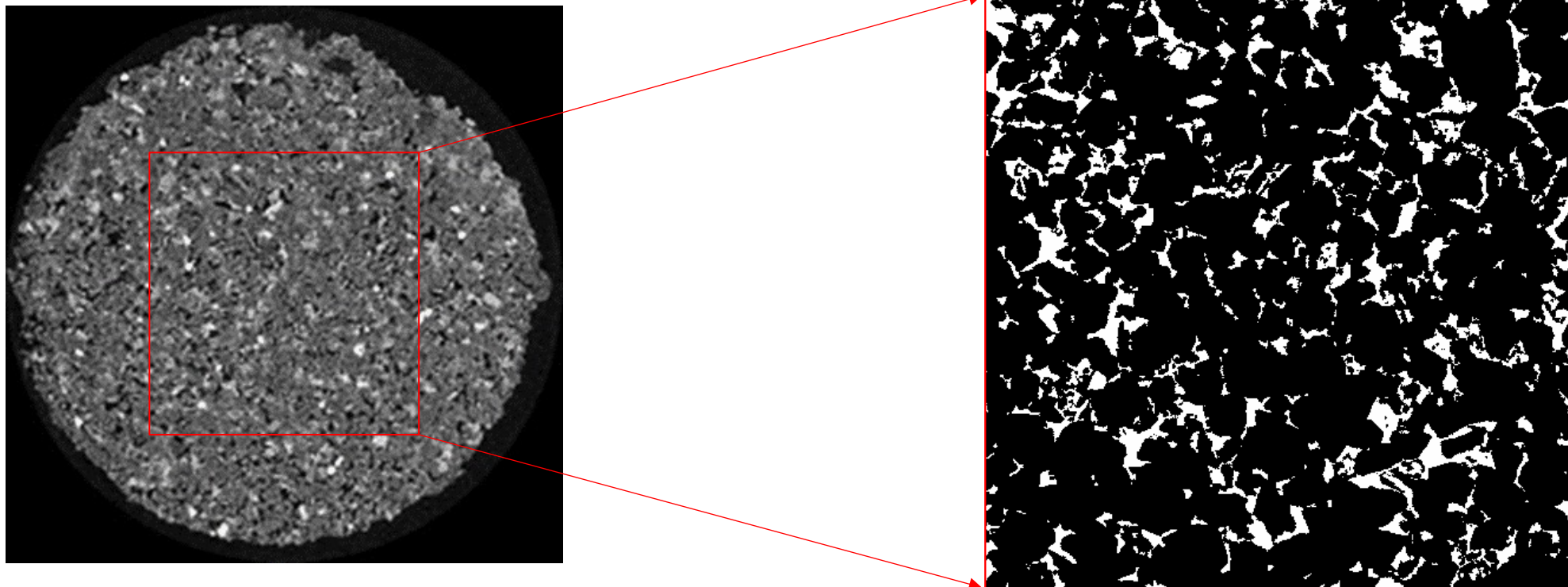
Materiales y métodos

ESCANEADO DE MUESTRA GEOLÓGICA CON μ CT



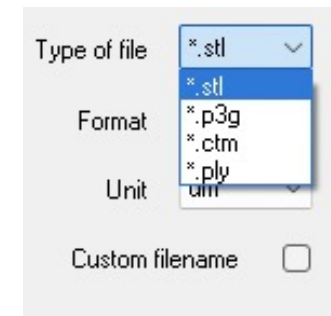
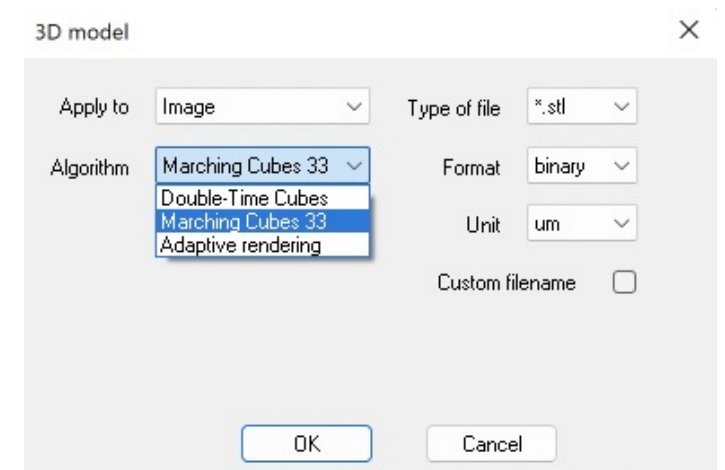
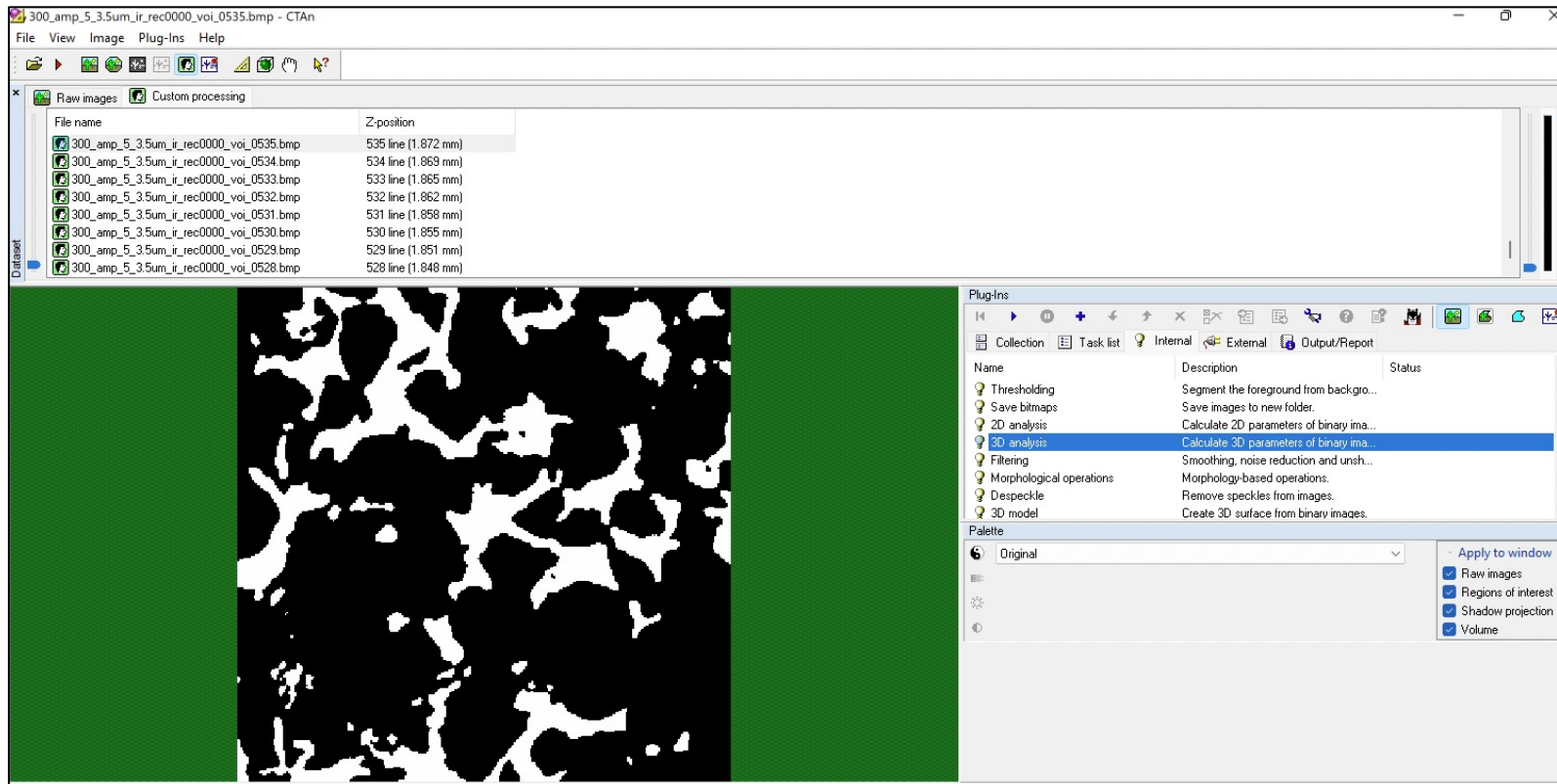
Materiales y métodos

Selección de REV y segmentación



Materiales y métodos

MÉTODOS DE RENDERIZADO DE IMAGEN 3D DE ROCA CON SOFTWARE DE uCT



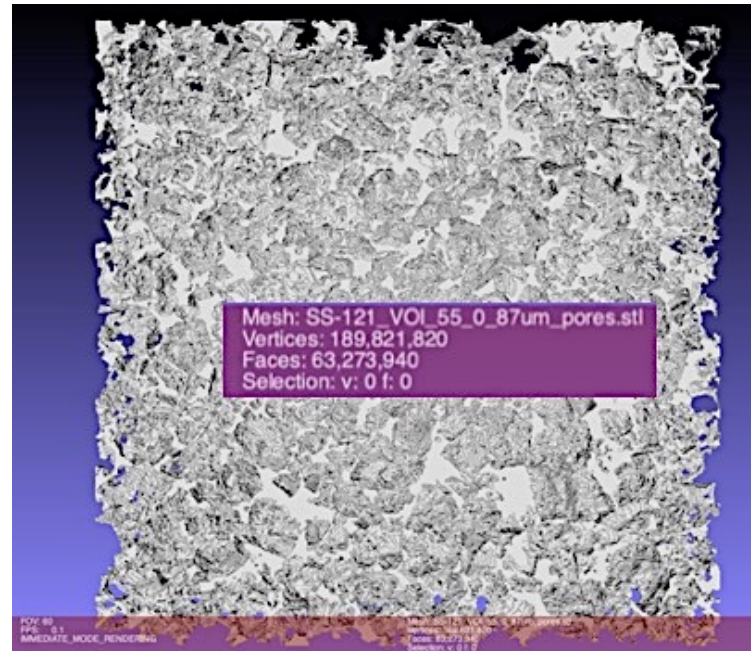
Materiales y métodos

PROBLEMAS DE RENDERIZADO DE GEOMETRÍAS COMPLEJAS

Name	Type	Size
SS-121_REV_2200px_0_87um_t1.stl	Stereolithography 3D mesh file	18,769,788 KB
File folder	File folder	
Type: Stereolithography 3D mesh file	File folder	
Size: 17.8 GB	File folder	

Archivo de tamaño gigante

- 18 GB en disco



Mallas superficiales con millones de elementos

- 189 millones de vértices
- 63 millones de caras

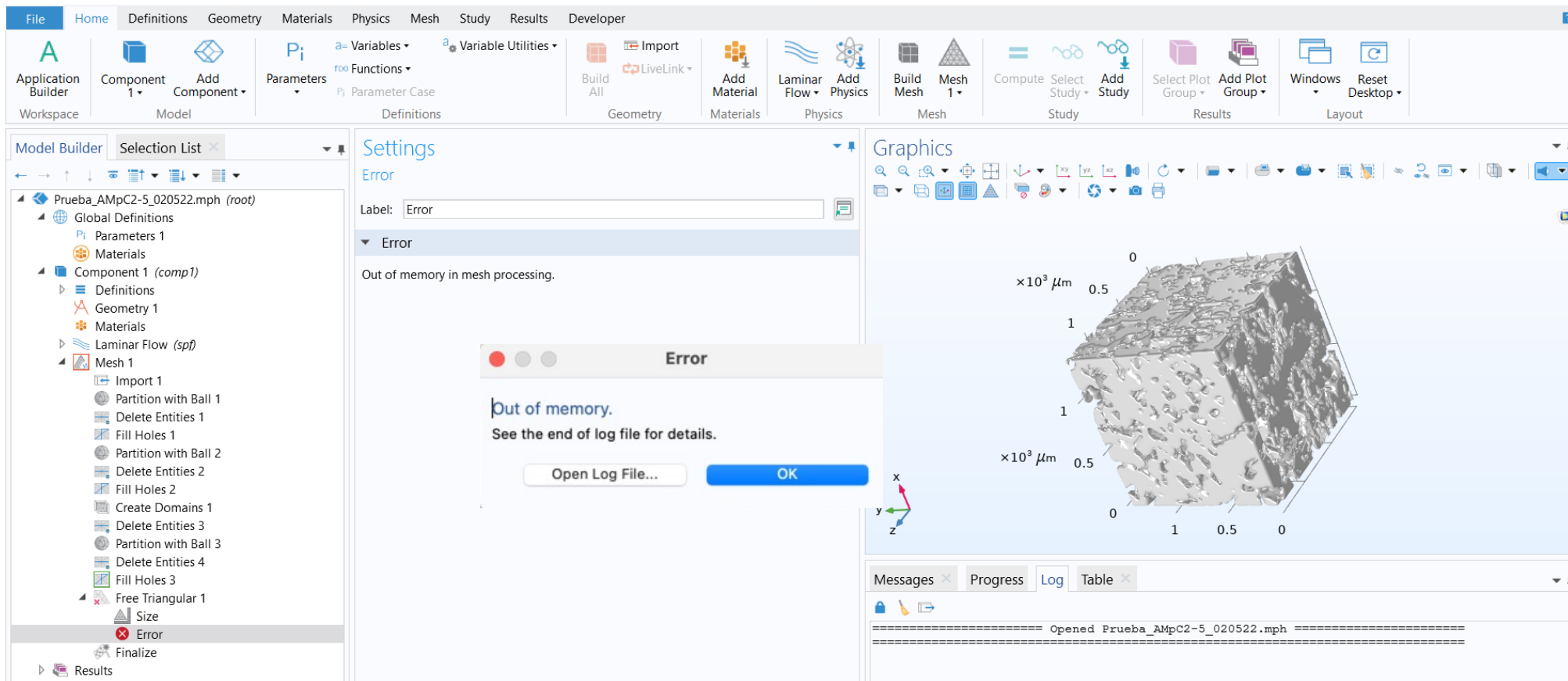
SE REQUIERE ALTA CAPACIDAD DE MEMORIA RAM (128 GB)



- 189 millones de vértices
- 63 millones de caras

Materiales y métodos

PROBLEMAS DE IMPORTACIÓN DE ARCHIVO MALLA EN COMSOL

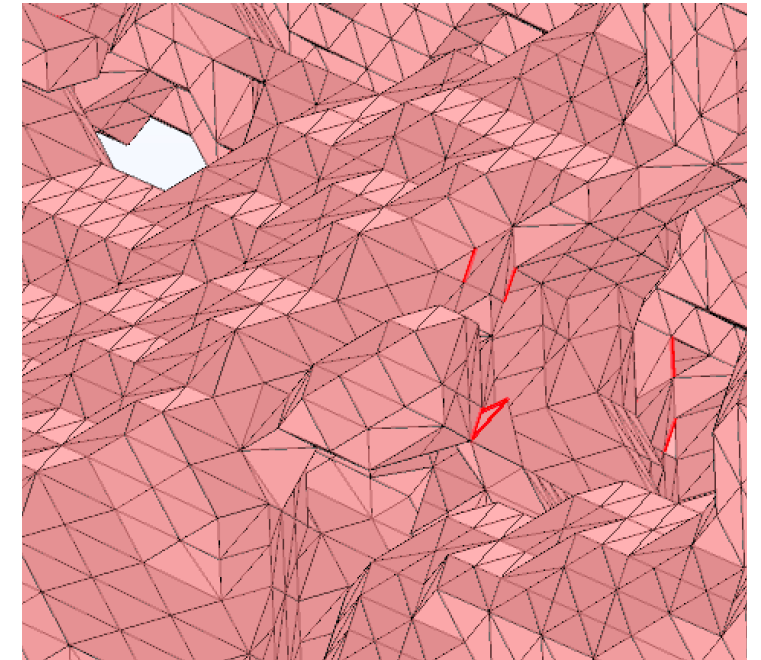
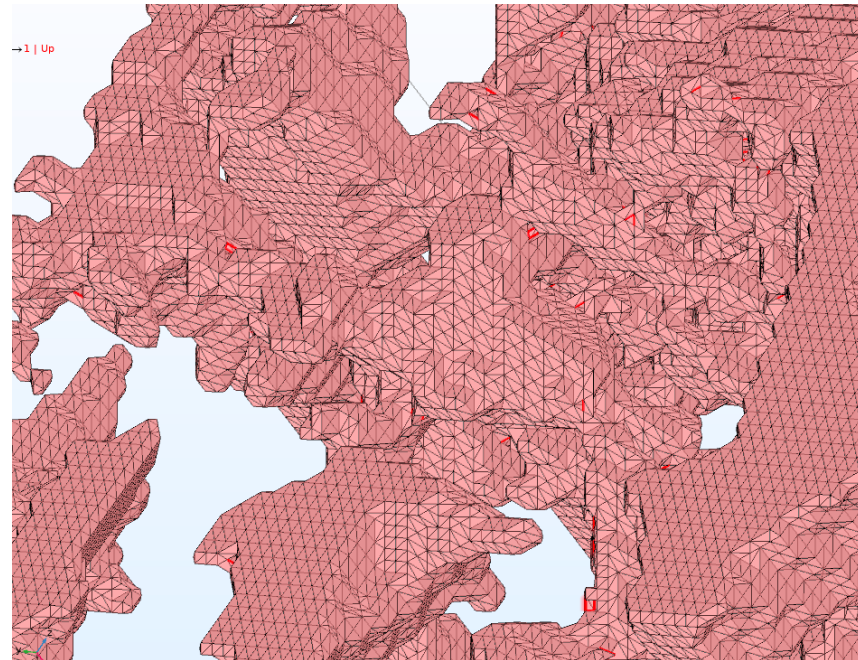
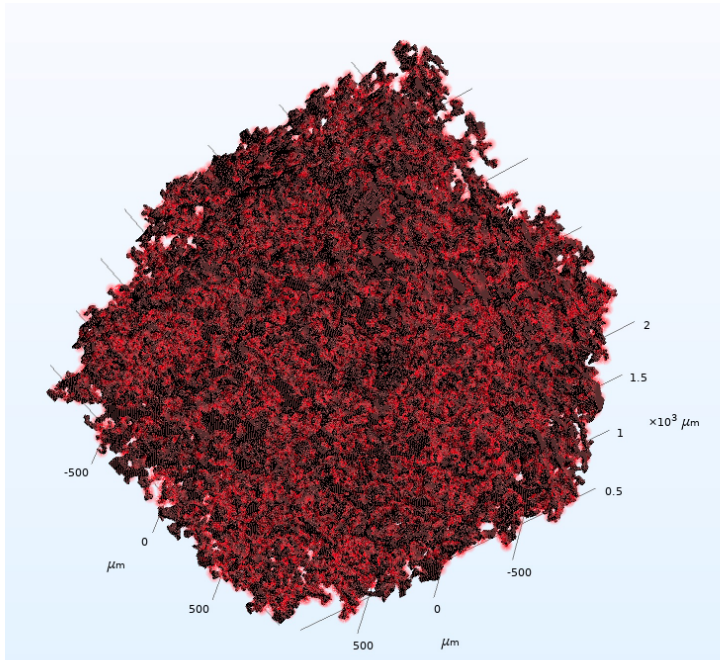


- 189 millones de vértices
- 63 millones de caras

Materiales y métodos

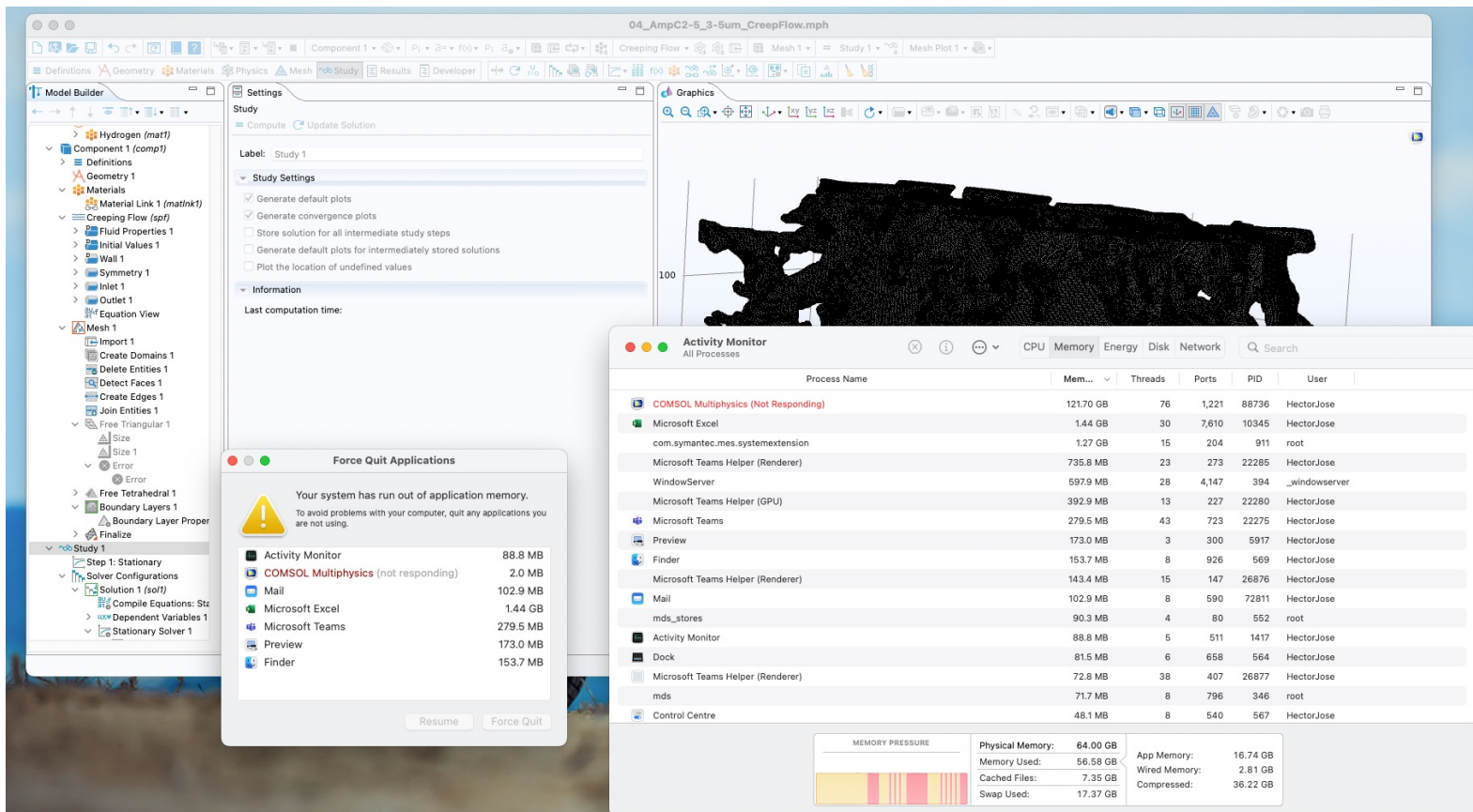
PROBLEMAS DE IMPORTACIÓN DE ARCHIVO MALLA EN COMSOL

- Elementos de baja calidad
- Intersección de caras



Materiales y métodos

PROBLEMAS DE IMPLEMENTACIÓN DE FÍSICA EN MODELO IMPORTADO



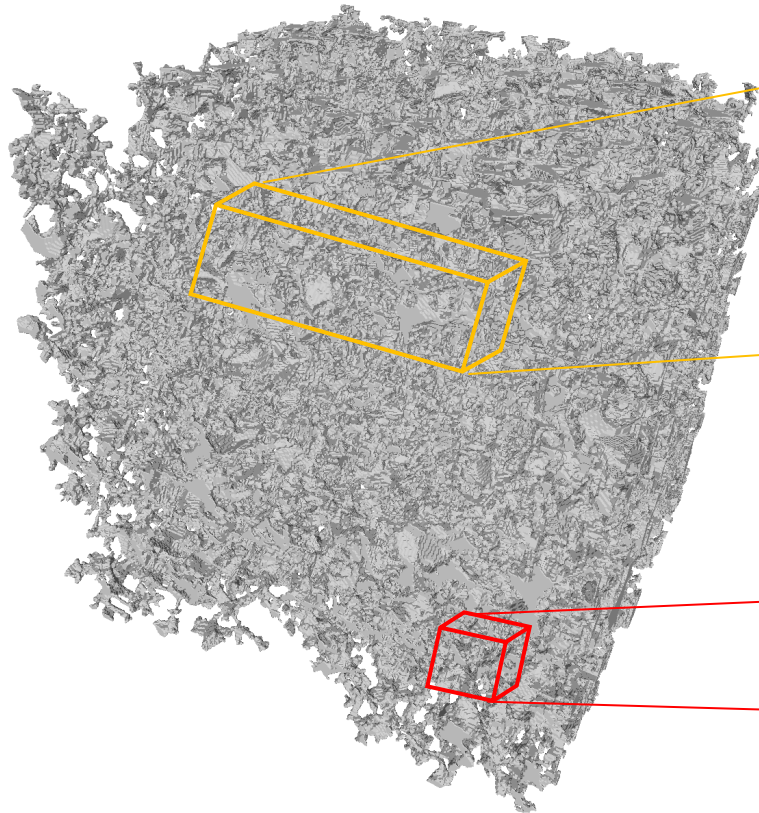
- Tiempos de cómputo mayores a a 60 horas.
- Colapso total del ordenador

- 189 millones de vértices
- 63 millones de caras

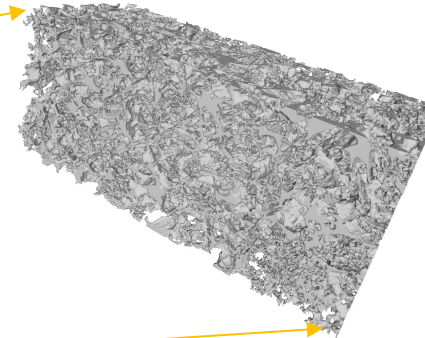
Materiales y métodos

SOLUCIÓN AL PROBLEMA DEL TAMAÑO

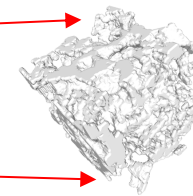
REV original 2000x2000x2000



Volumen de interés (VOI) paralelepípedo 252x126x126

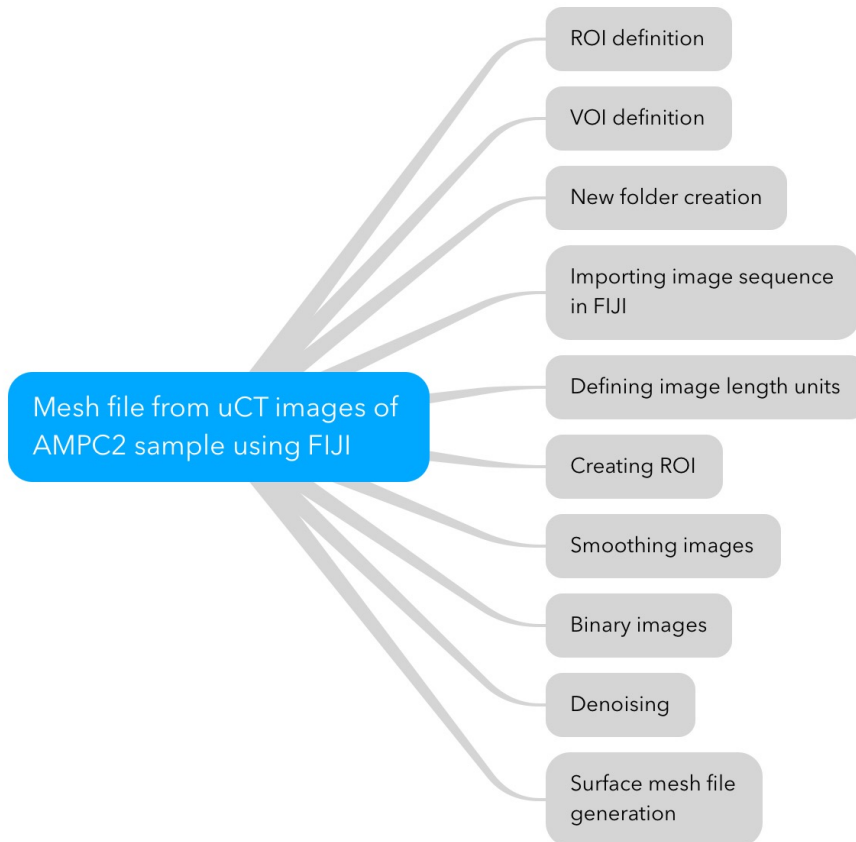
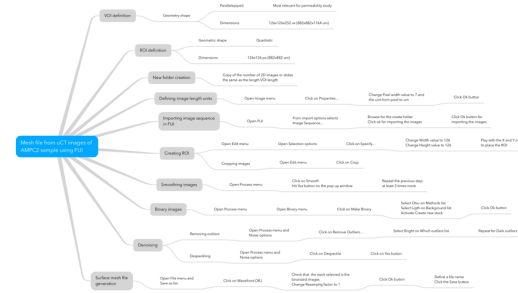


Volumen de interés (VOI) cúbico 25x25x25



Materiales y métodos

SOLUCIÓN PARA RENDERIZADO DE GEOMETRÍA 3D CON SOFTWARE LIBRE (FIJI y MeshLab)

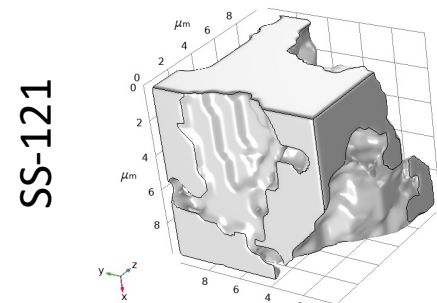
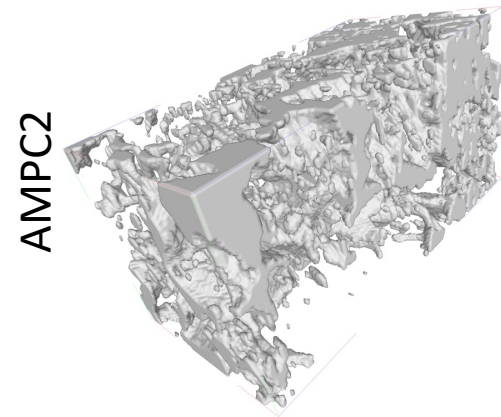


Mesh file from uCT images of AMPC2 sample image using FIJI			
ROI definition	Geometric shape	Quadratic	
	Dimensions	126x126 px (882x882 um)	
VOI definition	Geometry shape	Parallelepiped	Most relevant for permeability study
	Dimensions	126x126x252 vx (882x882x1764 um)	
New folder creation	Copy of the number of 2D images or slides the same as the length VOI length		
Importing image sequence in FIJI	Open FIJI	From import options selects Image Sequence...	Browse for the create folder Click ok for importing the images <ul style="list-style-type: none"> Click Ok button for importing the images
Defining image length units	Open Image menu	Click on Properties...	Change Pixel width value to 7 and the unit from pixel to um <ul style="list-style-type: none"> Click Ok button
Creating ROI	Open Edit menu	Open Selection options	Click on Specify... <ul style="list-style-type: none"> Change Width value to 126 Change Height value to 126 Play with the X and Y coordinates to place the ROI
	Cropping images	Open Edit menu	Click on Crop
Smoothing images	Open Process menu	Click on Smooth Hit Yes button on the pop-up window	Repeat the previous step at least 3 times more
Binary images	Open Process menu	Open Binary menu	Click on Make Binary <ul style="list-style-type: none"> Select Otsu on Methods list Select Light on Background list Activate Create new stack Click Ok button
Denoising	Removing outliers	Open Process menu and Noise options	Click on Remove Outliers... <ul style="list-style-type: none"> Select Bright on Which outliers list Repeat for Dark outliers
	De-speckling	Open Process menu and Noise options	Click on De-speckle <ul style="list-style-type: none"> Click on Yes button
Surface mesh file generation	Open File menu and Save as list	Click on Wavefront.OBJ	Check that the stack selected is the binarized images Change Resampling factor to 1 <ul style="list-style-type: none"> Click Ok button Define a file name Click the Save button

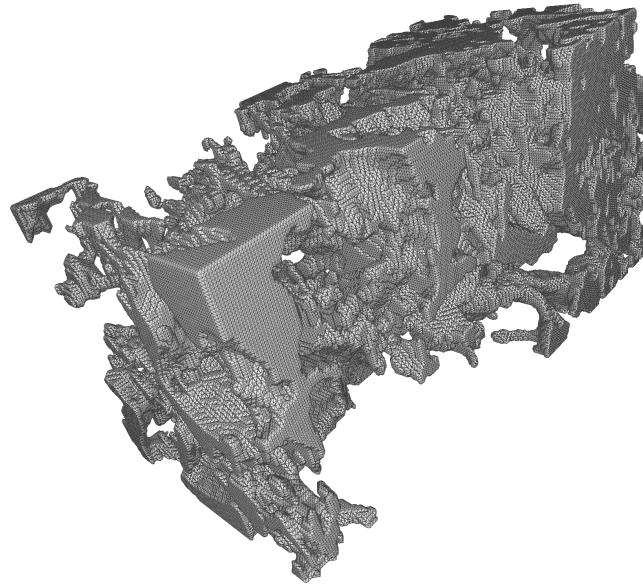
Materiales y métodos

SOLUCIÓN PARA RENDERIZADO DE GEOMETRÍA 3D CON SOFTWARE LIBRE (FIJI y MeshLab)

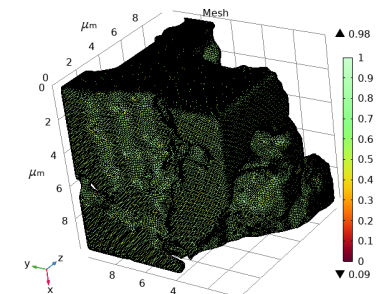
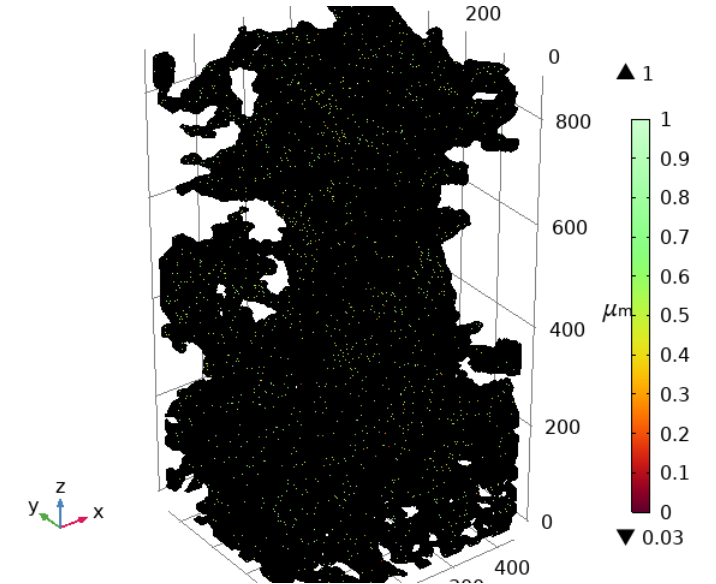
Geometría renderizada con FIJI



Geometría mallada y limpia con MeshLab



Malla importada y funcional en COMSOL



Simulation of transport phenomena in porous media to store H₂ and/or CO₂ capture

Materiales y métodos

CONDICIONES DE BORDE

- Dirichlet para la velocidad entrada de 0.001 m/s en el modelo AMPC2
- Dirichlet para la velocidad entrada de 0.1 m/s en el modelo SS-121
- Dirichlet en la salida a presión constante igual cero para ambos modelos.
- Paredes con condicion de deslizamiento (Según estimación de número de Knudsen)
- Condición de simetría en borde laterales.

ESTUDIO PARAMÉTRICO

- Parametric Sweep of the inlet velocity for the values: 1E-3, 1E-2, 0.1, 0.2, 0.35 and 0.5 m/s.
- Parametric Sweep of the fluid temperature from 25 °C up to 150 °C every 25 °C

CASOS DE ESTUDIO PARA LUJO LAMINAR CON RÉGIMEN ESTACIONARIO

Case #	Parametric Sweep	Parameter values	Fixed parameter	Geometry
1	Material	H2 CO2 CH4 N2 He	Vel_in: 1e-3 / slip walls	AMPOC2
2	Material	H2 CO2 CH4 N2 He	Vel_in: 1e-3 / no slip walls	AMPOC3
3	Velocity (m/s)	1e-4 1e-3 1e-2 0.1 0.5 1	Fluid: H2	AMPOC2
4	Velocity (m/s)	1e-4 1e-3 1e-2 0.1 0.5 1	Fluid: CO2	AMPOC2
5	Temperature (°C)	range(25;25;150)	Fluid: H2	AMPOC2
6	Temperature (°C)	range(25;25;150)	Fluid: CO2	AMPOC2
7	Material	H2 CO2 CH4 N2 He	Vel_in: 1e-3 m/s	SS-121
8	Material	H2 CO2 CH4 N2 He	Vel_in: 1e-3 / slip walls	SS-121
9	Velocity (m/s)	1e-4 1e-3 1e-2 0.1 0.5 1	Vel_in: 1e-3 / no slip walls	SS-121
10	Velocity (m/s)	1e-4 1e-3 1e-2 0.1 0.5 1	Fluid: CO2	SS-121
11	Temperature (°C)	range(25;25;150)	Fluid: H2	SS-121
12	Temperature (°C)	range(25;25;150)	Fluid: CO2	SS-121

Teoría

ECUACIONES DE NAVIER-STOKE PARA FLUJO DE FLUIDO A ESCALA DE PORO

CONSERVACIÓN DE MASA

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

CONSERVACIÓN DE MOMENTO

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \mathbf{K}) + \mathbf{F}$$

$$\rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \mathbf{K}) + \mathbf{F}$$

Dependiente del tiempo

En estado estacionario

CONDICION DE DESLIZAMIENTO EN LAS PAREDES

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$$

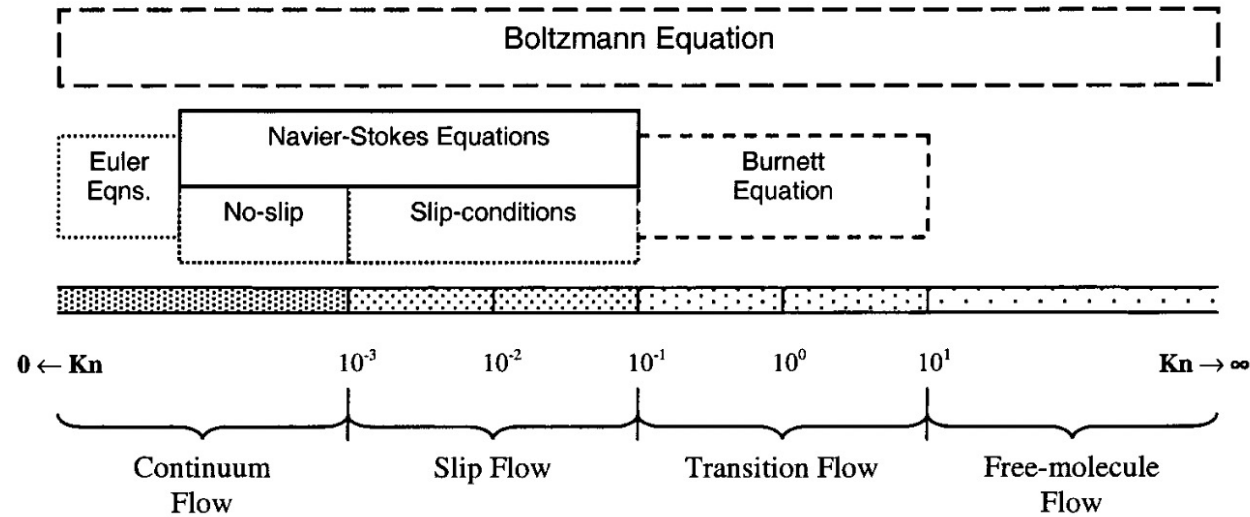
Sin deslizamiento

$$(-p \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) \mathbf{n} = 0$$

Considerando fuerzas viscosas (deslizamiento)

Teoría

REGÍMENES DE FLUJO DE GASES EN MEDIOS POROSOS SEGÚN EL NÚMERO DE KNUDSEN



$$Kn = \frac{\lambda}{L_{char}}$$

$$\lambda = \frac{kT}{4\pi\sqrt{2}r^2p}$$

Geometry	Kn_H2	Kn_CO2	Lc (m)	Flow model
AMPC2	0.019	0.012	4.00E-05	Continous to transition region, Navier-Stokes with slip condition
SS-121	0.075	0.047	9.90E-06	Continous to transition region, Navier-Stokes with slip condition

Teoría

PROPIEDADES DE TRASPORTE MACROSCÓPICAS

$$\varepsilon = \frac{V_{pores}}{V_{total}}$$

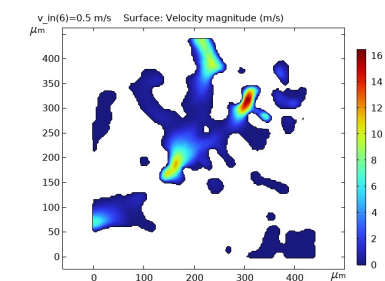
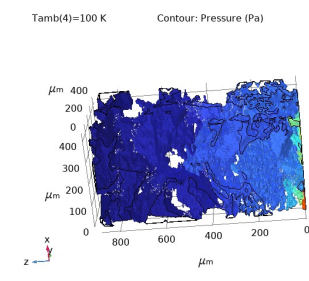
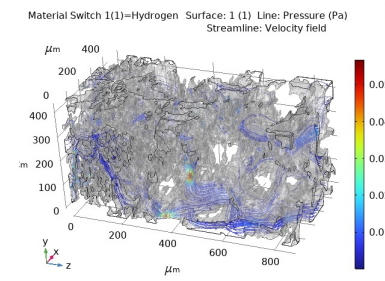
Porosidad

$$\kappa = u_{out} \mu \frac{L}{\Delta p}$$

Permeabilidad absoluta Darcy para líquidos

$$\kappa_g = \frac{2\mu L Q_2 P_2}{A(P_1^2 - P_2^2)}$$

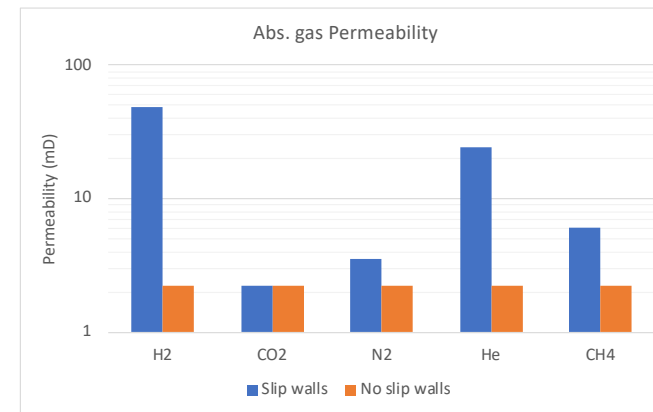
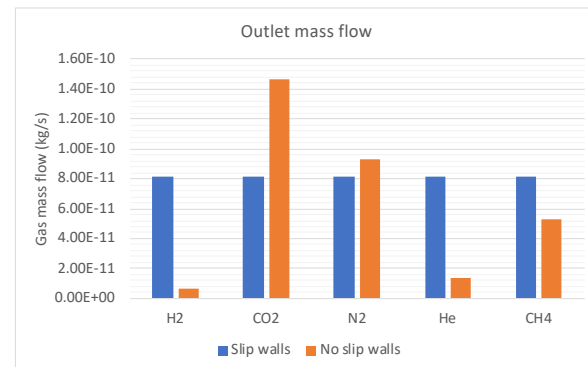
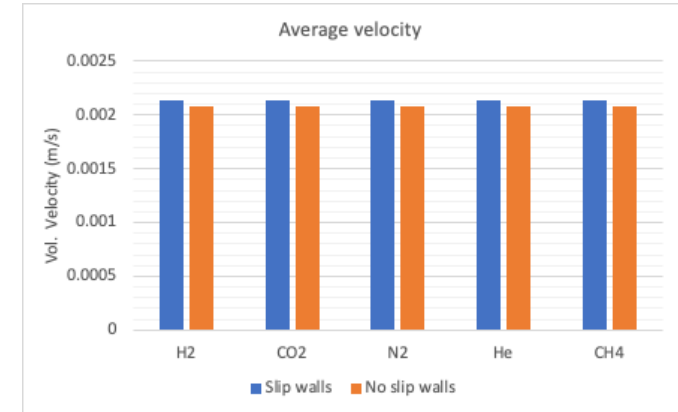
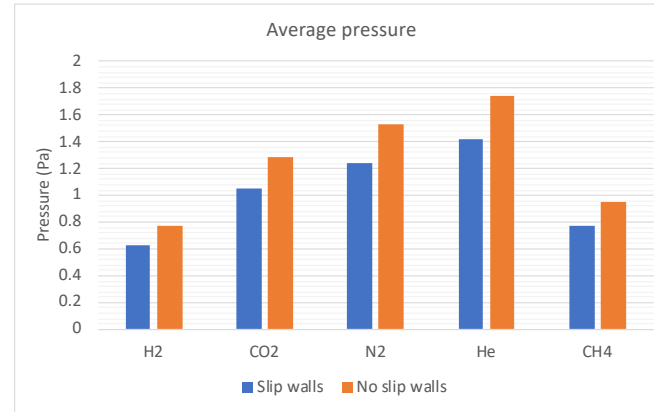
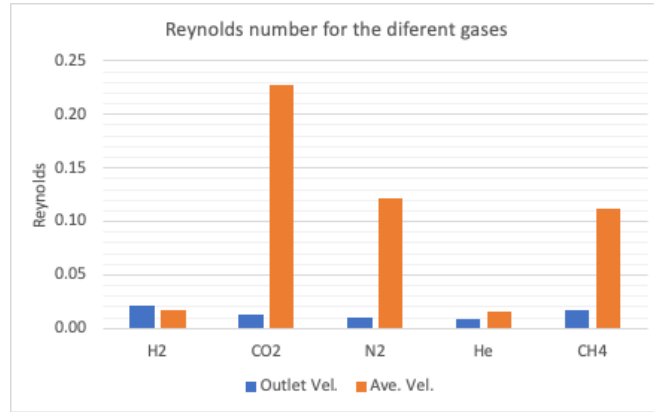
Permeabilidad absoluta Darcy para gases



Resultados

POROSIDAD: 30.9%

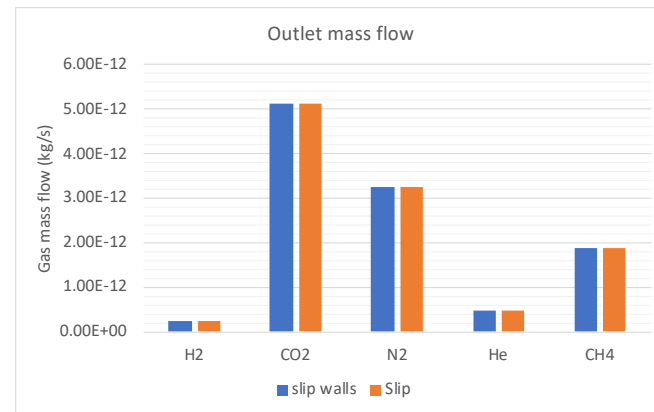
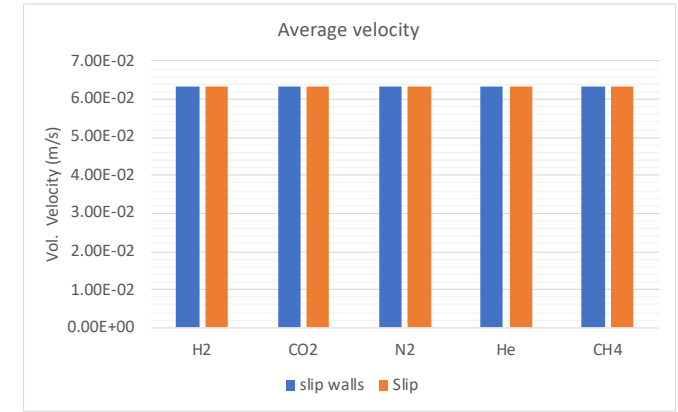
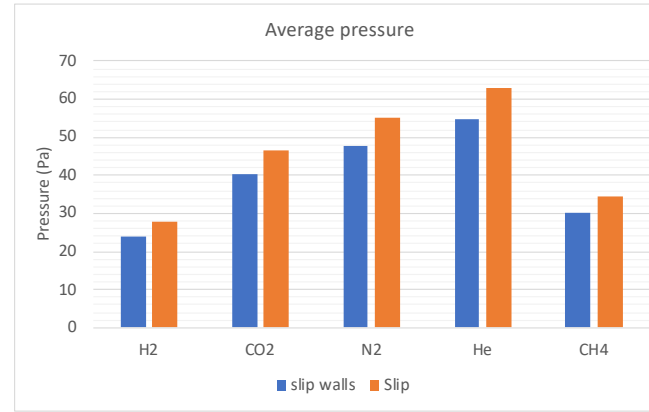
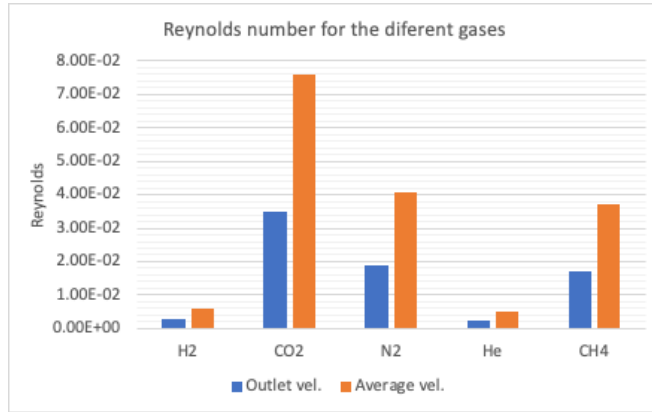
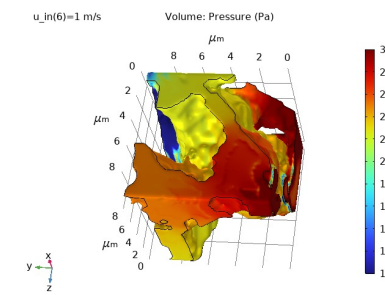
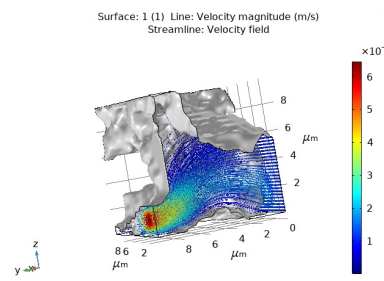
ESTUDIO BARRIDO DE MATERIALES PARA MODELO AMPC2



Resultados

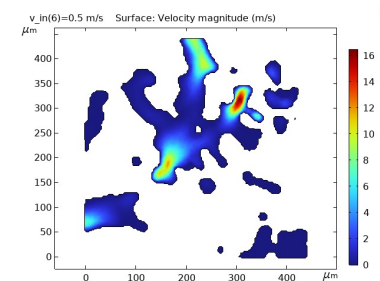
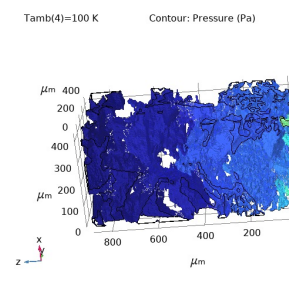
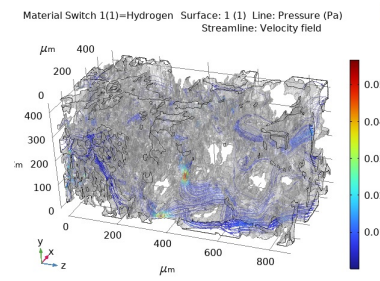
ESTUDIO BARRIDO DE MATERIALES PARA MODELO SS-121

POROSIDAD: 54.8%



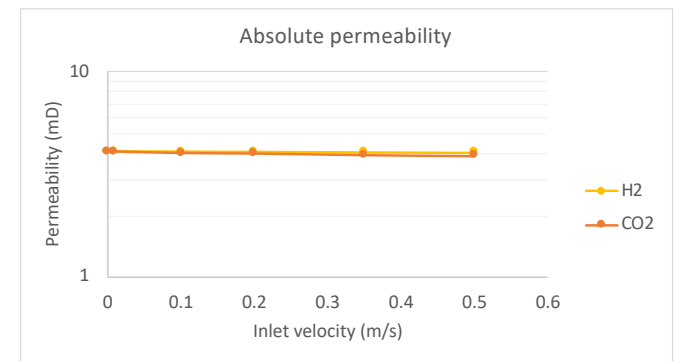
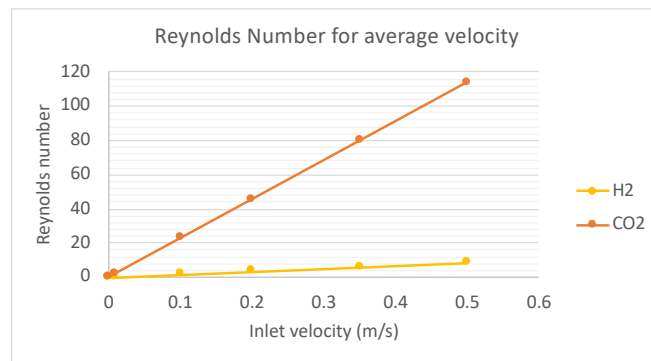
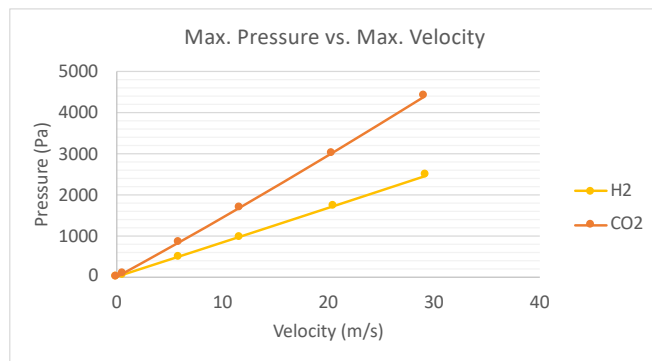
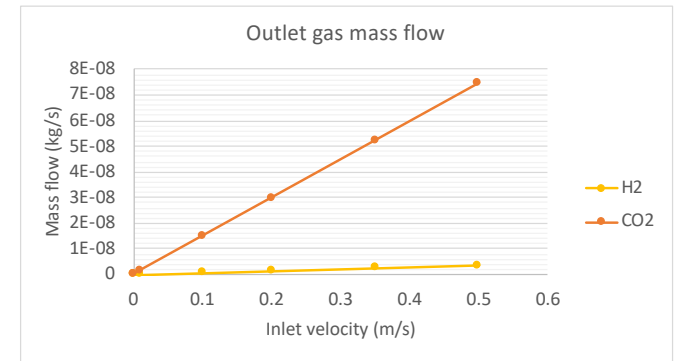
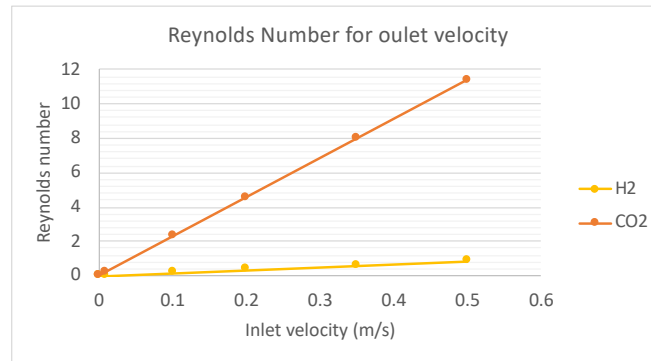
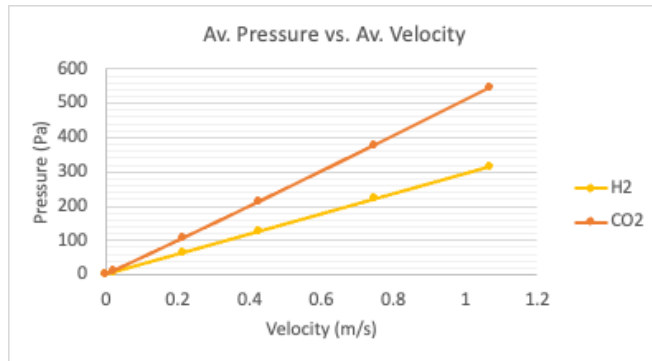
Simulation of transport phenomena in porous media to store H2 and/or CO2 capture

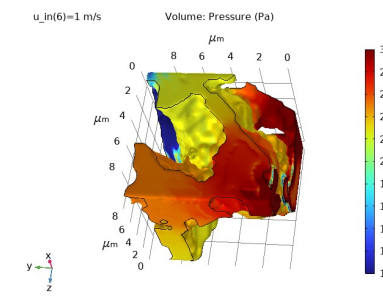
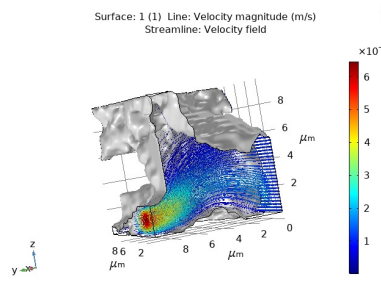
Resultados



POROSIDAD: 30.9%

BARRIDO PARAMÉTRICO DE LA VELOCIDAD DE ENTRADA PARA MODELO AMPC2

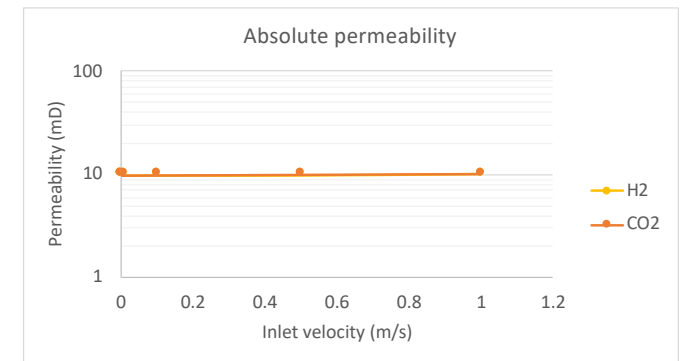
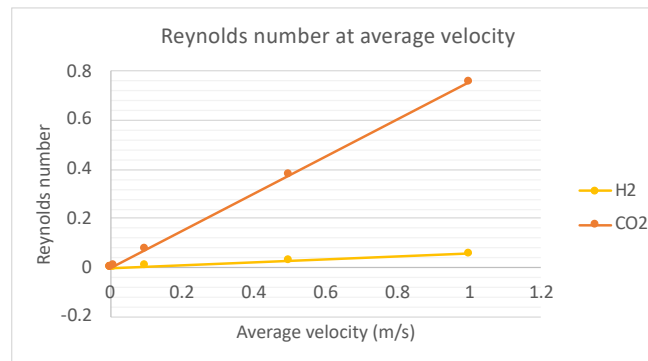
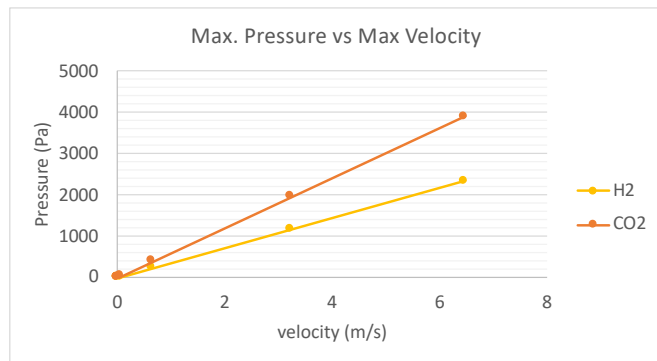
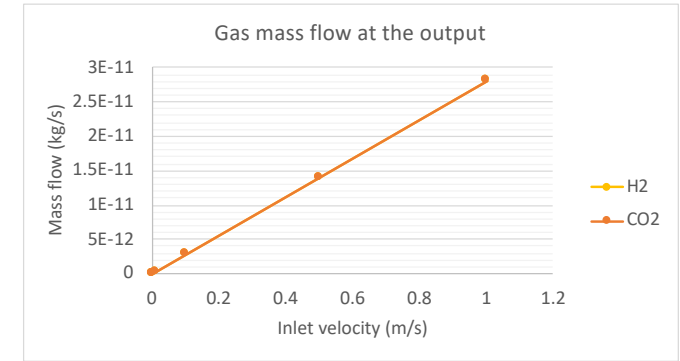
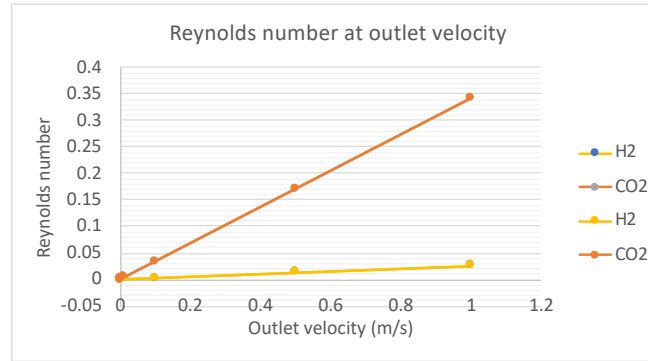
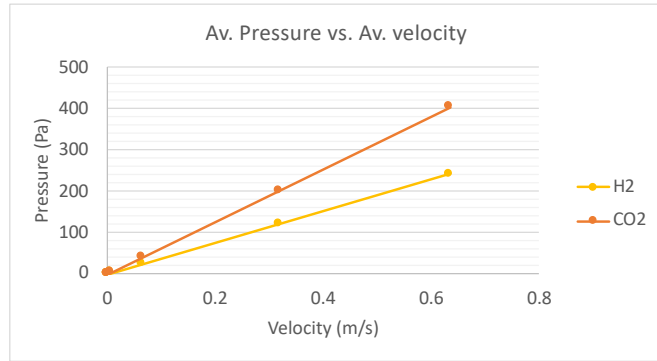




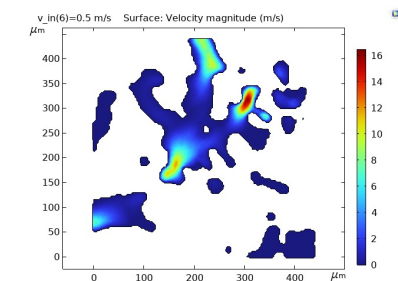
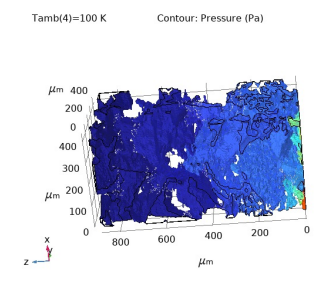
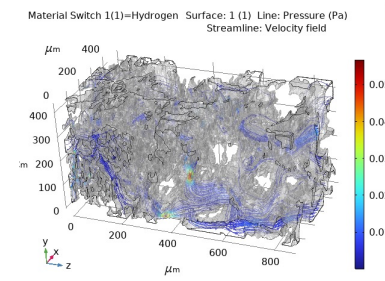
Resultados

POROSIDAD: 54.8%

BARRIDO PARAMÉTRICO DE LA VELOCIDAD DE ENTRADA PARA SS-121

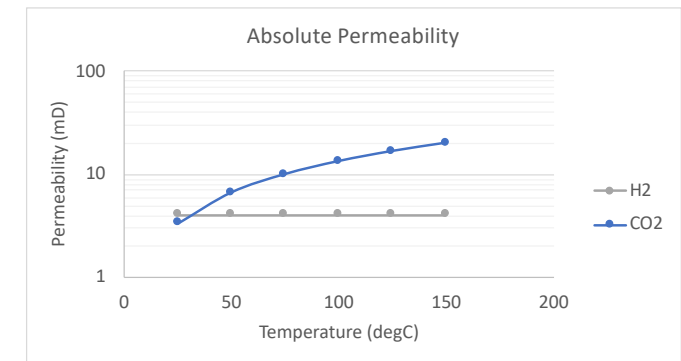
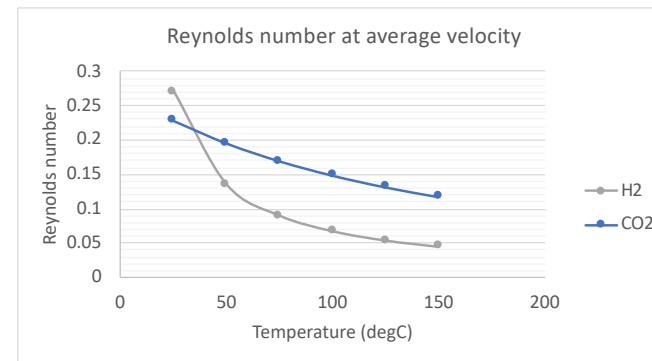
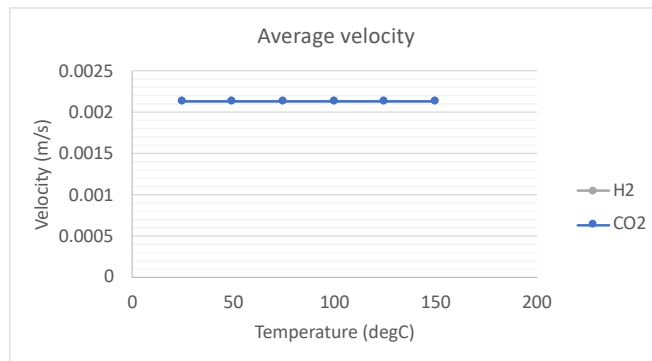
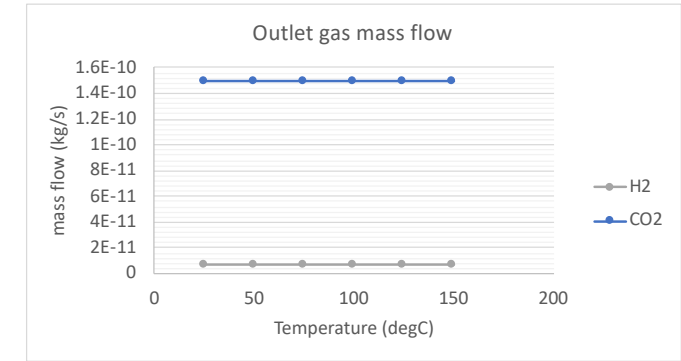
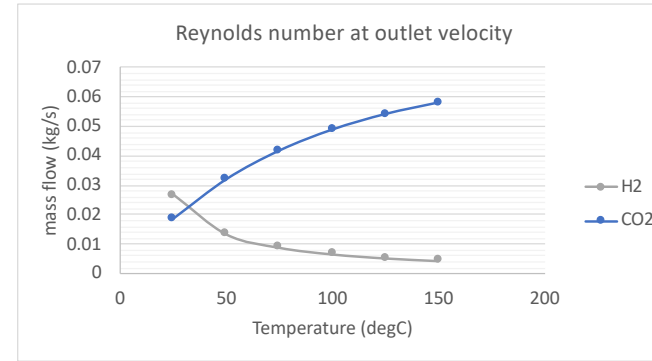
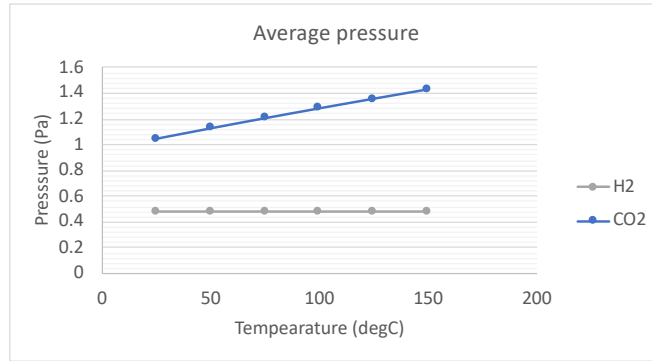


Resultados

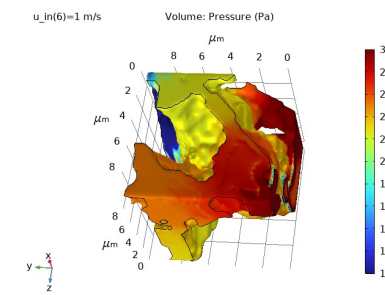
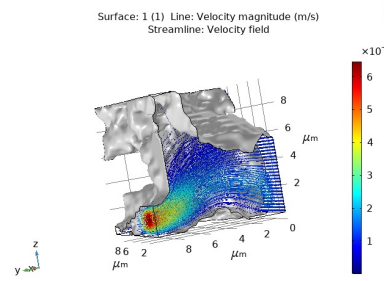


POROSIDAD: 30.9%

BARRIDO PARAMÉTRICO DE LA TEMPERATURA DE ENTRADA PARA MODELO AMPC2

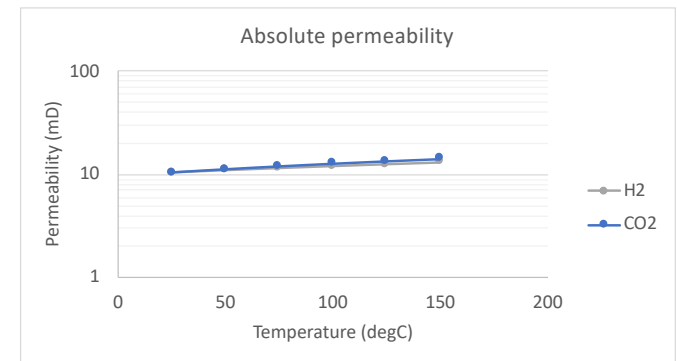
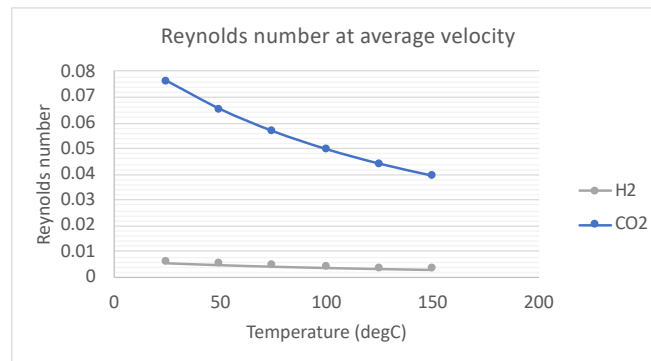
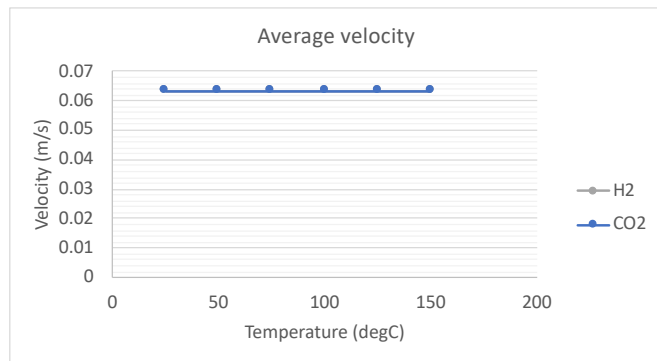
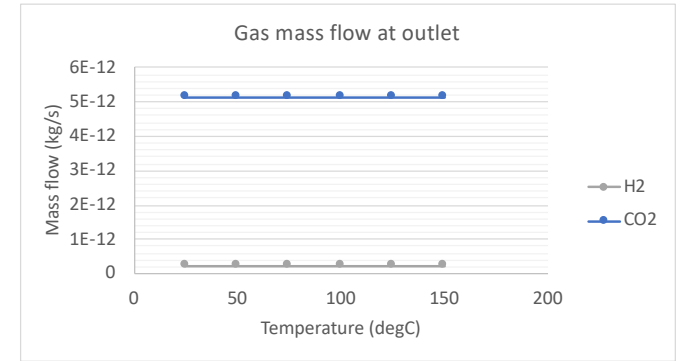
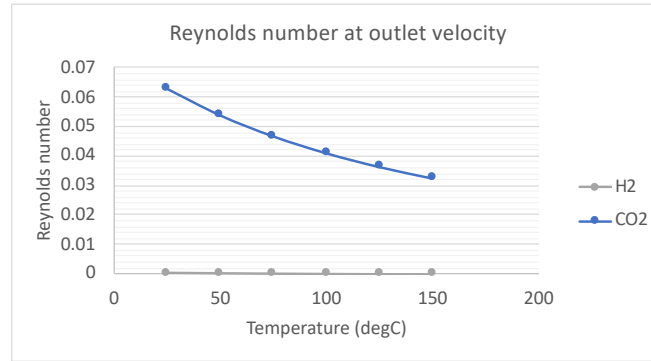
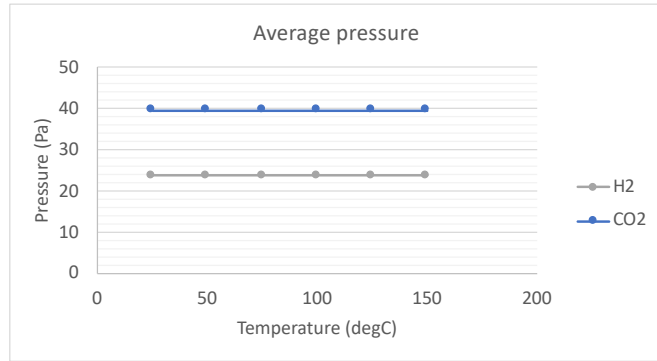


Resultados



POROSIDAD: 54.8%

BARRIDO PARAMÉTRICO DE LA TEMPERATURA DE ENTRADA PARA MODELO SS-121



Conclusiones

- La simulación de flujo de fluidos directa en medios porosos geológicos a escala del poro para dimensiones del Volumen Elemental Representativo (REV) es computacionalmente costoso de modelar en COMSOL.
- El uso de un Volumen de Interés (VOI) de menores dimensiones al REV permite el modelado de flujo de fluidos de una sola fase a un coste computacional razonable, pero con poca o sin escalabilidad a escala macro (Bulk) si los resultados no se combinan con técnicas estocásticas.
- La geometría VOI de la muestra AMPC2 presenta mejor desempeño en la estimación de las propiedades de transporte que la geometría VOI de la muestra SS-121, por lo que la elección del tamaño mínimo del VOI podría condicionar la representatividad de las propiedades a escalar con modelos combinados.
- El estudio del barrido de la velocidad de entrada (tasa de inyección) indica que se mantiene flujo laminar en el medio poroso para el hidrógeno gaseoso, mientras que para el dióxido de carbono se debe inyectar a bajas tasas para mantener el flujo laminar.
- El estudio de barrido paramétrico de temperatura (temperatura en el subsuelo) no presenta variaciones para el hidrógeno y leve incremento de la presión pero posible alta influencia en el cálculo de la permeabilidad absoluta.

Referencias

1. Ho, C. K., & Webb, S. W. (2006). Gas Transport in Porous Media. Albuquerque: Springer.
2. Xue, L. (2020). Chapter 2: Basic Theory. En L. Xue, X. Guo, & H. Chen, Fluid FLOW in Porous Media (págs. 47-67). Beijing.
3. Chen, L., Zhao, J., Kang, Q., Li, Z.-Y., Carmeliet, J., & Shikazono, N. (2022). Pore-scale modeling of complex transport phenomena in porous media. Progress in Energy and Combustion Science (pág. 38). Shaanxi: Elsevier.
4. Jha, N. K., Al-Yaseri, A., Ghasemi, M., Al-Bayati, D., Lebedev, M., & Sarmadivaleh, M. (2021). ore scale investigation of hydrogen injection in sandstone via X-ray micro-tomography. International Journal of Hydrogen Energy , 8.
5. Gärttner, S., Alpak, F. O., Meier, A., Ray, N., & Frank, F. (7 de September de 2021). Estimating permeability of 3D micro-CT images by physics-informed CNNs based on DNS. Erlangen, Nürnberg, Germany.
6. Wagner, A. (2020). Permeability Estimation of Regular Porous Structures: A Benchmark for Comparison of Methods. Transport in Porous Media, 23.
7. AbuAisha, M., & Billiotte, J. (2021). A discussion on hydrogen migration in rock salt for tight underground storage with an insight into a laboratory setup. Journal of Energy Storage, 14.
8. Nishank Saxena, A. H., Ronny Hofmann, F. O., Jesse Dietderich, M. A., & Justin Freeman, H. D. (2019). Rock properties from micro-CT images: Digital rock transforms for resolution, pore volume, and field of view. Advances in Water Resources, 13.
9. Kumar, A., Pramanik, S., & Manoranjan, M. (2016). COMSOL Multiphysics® Modeling in Darcian and Non-Darcian Porous Media. 2016 COMSOL Conference in Bangalore (pág. 6). Bangalore: COMSOL A.B.
10. Raeini, A. Q., Blunt, M. J., & Bijeljic, B. (2014). Direct simulations of two-phase flow on micro-CT images of porous media and upscaling of pore-scale forces. Advances in Water Resources, 11.
11. Blunt, M. J., Branko, B., Hu, D., Oussama, G., Stefan, I., & Peyma, M. (2013). Pore-scale imaging and modelling. Advances in Water Resources, 20.
12. Dorthe, W., & Adrian P., S. (2012). X-ray imaging and analysis techniques for quantifying pore-scale structure and processes in subsurface porous medium systems. Advances in Water Resources, 30.
13. Heiko, A., Nicolas, C., Jack, D., Erik, G., Junehee, H., & Matthias, K. (2013). Digital rock physics benchmarks—part II: Computing effective properties. Computers & Geosciences, 11.
14. Heiko, A., Nicolas, C., Jack, D., Erik, G., Junehee, H., & Matthias, K. (2013). Digital rock physics benchmarks—Part I: Imaging and segmentation. Computers & Geosciences, 8.
15. Peyman, M., Martin J., B., & Branko, B. (2012). Computations of Absolute Permeability on Micro-CT Images. Mathematical Geosciences.
16. Subrata, R., & Reni, R. (2003). Modeling gas flow through microchannels and nanopores. Journal of Applied Physics, 11

MU COM



UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

| uma.es

