

## SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FUGAS PROFUNDAS DE CO<sub>2</sub> EN LA ZONA NO SATURADA: PRIMEROS RESULTADOS DEL PROYECTO PISCO<sub>2</sub>- CIUDEN

A. Credo<sup>1</sup>, F. Grandia<sup>1</sup>, M. Luna<sup>1</sup>, M. Bayer<sup>1</sup>, J. Salas<sup>1</sup>, S. Jordana<sup>1</sup>, J. Bruno<sup>1</sup>

<sup>1</sup>AMPHOS 21 Consulting, S.L. Passeig de Garcia i Faria, 49-51, E-08019 Barcelona, España. Email: anthony.credo<sup>1</sup>@amphos21.com, web: www.amphos21.com.

**RESUMEN.** La captura y almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub> es una de las soluciones a medio plazo para reducir el efecto de las emisiones de gas industrial hacia la atmósfera. Durante las fases de inyección post-operativa, la monitorización ha de permitir el control de la migración vertical y lateral del CO<sub>2</sub> dentro del reservorio y la detección de cualquier fuga, puntual o difusa, hacia los acuíferos superficiales y el suelo. En el Proyecto PISCO<sub>2</sub>, en desarrollo en el marco del Programa de Almacenamiento Geológico de CO<sub>2</sub> de la Fundación Ciudad de la Energía (CIUDEN), se pretende identificar bio-indicadores (plantas, microorganismos, macroorganismos) de flujos anómalos de CO<sub>2</sub>, en suelos contenidos dentro de celdas experimentales de 2,5 m de profundidad y 16 m<sup>2</sup> de superficie. La migración de CO<sub>2</sub> dentro de la zona no saturada del suelo y el flujo saliente en superficie están controlados por inyectoras ubicadas en el fondo de cada celda, permitiendo reproducir diferentes escenarios, como el flujo natural de CO<sub>2</sub> ( $1 \cdot 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ) o la fuga con flujo alto de CO<sub>2</sub> ( $1 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ). En este trabajo, se presentan los primeros resultados de las simulaciones numéricas de la evolución de la migración de gas dentro de una celda de suelo no saturado mediante el código TOUGHREACT. Se comentan las variaciones de presión y contenido en agua en la zona no saturada a lo largo del tiempo de inyección y las implicaciones para los ensayos experimentales del Proyecto PISCO<sub>2</sub>.

**ABSTRACT.** CO<sub>2</sub> Capture and Geological Storage is one of the mid-term solutions to reduce industrial CO<sub>2</sub> emissions to the atmosphere. From injection phase to post-operational phase, the monitoring work enables the control of CO<sub>2</sub> migration (vertical and lateral) inside the reservoir formation and potential CO<sub>2</sub> leakage detection, both diffuse and point-source, into shallow aquifers and soils. In the PISCO<sub>2</sub> Project, in the frame of the Geological Storage of CO<sub>2</sub> lead by the Fundación Ciudad de la Energía (CIUDEN), bio-indicators (plants, microorganisms, macroorganisms) of CO<sub>2</sub> anomalous migration from deep leakage are going to be identified in soils contained in 2.5 m depth cells with an extent of 16 m<sup>2</sup>. CO<sub>2</sub> migration into the unsaturated zone of the soil and surface outflows are controlled by injectors situated at the bottom of each cell, which allows experimental simulation of different scenarios (i.e., reference scenario with natural CO<sub>2</sub> flow of  $1 \cdot 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ , scenario of leakage with high CO<sub>2</sub> flow of  $1 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ). In this study, the first results of the numerical simulations of gas migration evolution into the unsaturated zone of the soil did with TOUGHREACT code are

presented. Variations of pressure and water content over the months of gas injection in the unsaturated zone of the soil are commented and implications for experimental assays are discussed.

### 1.- Introducción

El almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub> es una de las alternativas tecnológicamente viables para la reducción de las emisiones industriales de este gas de efecto invernadero a la atmósfera (IPCC, 2005; IPCC, 2007). La Fundación Ciudad de la Energía (en adelante CIUDEN) es una fundación del sector público estatal que tiene entre sus objetivos el llevar a cabo un programa demostrativo del almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub>. Uno de estos métodos consiste en la observación de microorganismos y vegetación para monitorizar posibles cambios en las concentraciones de CO<sub>2</sub> en el suelo. Este método de monitorización tiene un relativo bajo coste y no requiere un equipamiento sofisticado. No obstante, es necesario disponer de información previa a la inyección y de un periodo de tiempo suficientemente largo para poder discriminar entre las aportaciones naturales de CO<sub>2</sub> y las asociadas a potenciales fugas desde el almacén geológico. No todos los ecosistemas se comportan de la misma manera frente al CO<sub>2</sub> por lo que se requieren estudios que tengan en cuenta tanto factores del suelo y del ecosistema como también parámetros ambientales y climáticos.

En el marco del Subprograma de Análogos Naturales y Monitorización de CIUDEN, se está desarrollando el Proyecto PISCO<sub>2</sub>, que consiste en el diseño y construcción de un conjunto de 18 celdas experimentales en las que se van a inyectar flujos controlados de CO<sub>2</sub> para monitorizar los cambios en los biotopos seleccionados (Bruno et al., 2011). Se va a mantener la vegetación y los ecosistemas inicialmente presentes en los suelos importados y se introducirán plantas, líquenes y microorganismos de interés. Las dimensiones útiles de cada celda son 4 m de largo por 4 m de ancho y 2,5 m de profundidad. Todas las celdas van a ser excavadas en una misma parcela. Cada celda va a ser rellenada por arenas (170-200 cm de grosor) y un nivel de grava infrayacente (30 cm) para favorecer la migración lateral y vertical, homogeneizando la pluma de CO<sub>2(g)</sub> inyectado (Fig. 1). Finalmente, se instalará una capa de suelo superficial (50 cm). Las 18 celdas contarán con una red de suministro de CO<sub>2</sub>, sistemas de drenaje y riego, además de varias herramientas de instrumentación y control. En cada una de las celdas se construirá un pozo de

servicio donde se instalarán una bomba de drenaje y un piezómetro, con el propósito de controlar el nivel freático de la celda, así como un sistema de inyección de dióxido de carbono, cuyo flujo será regulado mediante válvulas. Además, se ha previsto situar varios sensores embebidos con el fin de observar los posibles cambios en los indicadores previamente definidos (Fig. 1). La temperatura, el pH y la saturación en agua serán monitorizados en continuo. Puntualmente, se muestrearán los gases CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub> y el fluido intersticial del suelo para el análisis de su composición química.

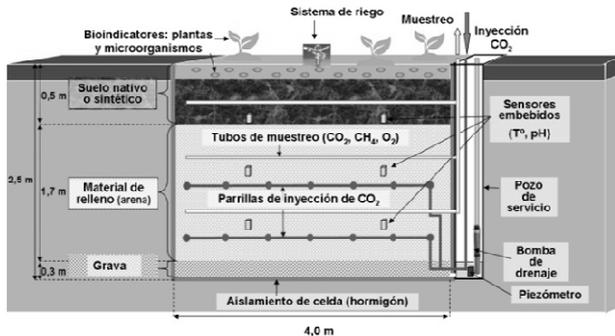


Fig. 1. Configuración de una celda de ensayo en PISCO<sub>2</sub>

## 2.- Antecedentes

Una propiedad característica del CO<sub>2</sub> en relación al aire es su mayor densidad, lo que le hace susceptible de acumulación y movimiento en las zonas más superficiales del suelo, así como también en los primeros centímetros de atmósfera. En general, las zonas más superficiales del suelo se encuentran no saturadas, constituyendo la zona vadosa. Los estudios en esta zona son complejos, y es necesario adaptar las ecuaciones que gobiernan el movimiento de las diferentes fases (agua, gas) frente a una saturación variable del medio. Ello se traduce en una fuerte no-linealidad de los problemas a resolver, lo que debe ser abordado necesariamente a través de la aplicación de métodos iterativos (métodos numéricos).

En la bibliografía, los trabajos relacionados con la modelación numérica de inyección de CO<sub>2</sub> se han centrado principalmente en su comportamiento como fluido de características supercríticas en condiciones geológicas profundas y en medios totalmente saturados, siendo muy escasos los trabajos relacionados con el comportamiento o movilidad del CO<sub>2</sub> en la zona no saturada (ZNS). Entre estos estudios destacan los realizados por Oldenburg y Pruess (2000) y Oldenburg y Unger (2003, 2004). En ellos, se aborda además la relación del movimiento del CO<sub>2</sub> gas con los procesos atmosféricos más superficiales.

En este sentido, existen estudios que si bien no tratan directamente el comportamiento del CO<sub>2</sub> gas, si lo hacen con respecto a otros gases densos y aquellos procesos atmosféricos que controlan la movilidad del gas a nivel más superficial. Entre estos estudios, cabe mencionar los realizados por Britter y Griffiths (1982), Britter y McQuaid (1988) y Britter (1989). Desde el punto de vista

agronómico, se han desarrollado varios estudios y modelos de la producción y del transporte de CO<sub>2</sub> en el suelo (Fang y Mongrieff, 1999; Mongrieff y Fang, 1999). Se ha modelado los procesos de producción natural de CO<sub>2</sub> con el código PATCIS y el 53 % de las emisiones de CO<sub>2</sub> desde el suelo hasta la atmósfera son debidos a la respiración de las raíces y el 47 % son debidos a la descomposición de la materia orgánica.

El objetivo del trabajo que se presenta es la predicción mediante un modelo numérico del ascenso del CO<sub>2</sub> inyectado en una celda experimental para ayudar en el diseño de las celdas y desarrollo de los experimentos, ya que es la principal herramienta para determinar de qué forma el CO<sub>2</sub> inyectado va a moverse. En concreto, se trata de conocer:

Los volúmenes y flujos de CO<sub>2</sub> (g) admisibles de acuerdo con las dimensiones de las celdas.

El efecto de la ZNS sobre la velocidad de ascenso y sobre la distribución en superficie del flujo de CO<sub>2</sub> (g).

El tiempo necesario para obtener flujo estacionario de CO<sub>2</sub> (g) en superficie. Este aspecto es muy importante para el desarrollo de los experimentos eco-biológicos, ya que el flujo debe permanecer estable.

## 3.- Materiales y métodos

### 3.1.- Código numérico de modelización

En general, las herramientas más habituales sólo consideran el flujo de agua en el medio, y no consideran el aire ni su movimiento, y tampoco la evaporación del agua a lo largo de la ZNS. En este trabajo no obstante, se ha utilizado el código TOUGHREACT (Xu et al., 2004), con su módulo EOS3, que permite trabajar con flujo multifase y reacciones químicas. La principal limitación del código (teniendo en cuenta el objetivo) es que no distingue entre las distintas componentes de la fase gaseosa, por lo que las propiedades fisicoquímicas (disolución en agua, reactividad, difusividad,...) van a ser las del aire. Esta simplificación es aceptable en este estadio del proyecto ya que los tiempos de residencia del gas no van a ser largos y los efectos químicos sobre la roca, relativamente pequeños. Sin embargo, para estadios más avanzados del proyecto va a ser necesaria la consideración de versiones no comerciales de este código, permitiendo contemplar distintas componentes para la fase gaseosa, con su densidad, solubilidad y reactividad respectiva.

TOUGHREACT (Xu et al., 2004) puede tratar explícitamente distintos aspectos relevantes expuestos en el modelo conceptual de operación de las celdas experimentales del Proyecto PISCO<sub>2</sub>. Los principales son:

Medio poroso (suelo experimental, hormigón, suelo original). La atmósfera también puede ser tenida en consideración;

Sistema de flujo multifase en condiciones transitorias;

Permeabilidad intrínseca y funciones de permeabilidad relativa y presión capilar de cada material;

Simulación robusta de los flujos en una dimensión (1D), dos dimensiones (2D) y tres dimensiones (3D);

Variación de nivel freático y saturación relativa del suelo en agua o gas;

Inyección de gas localizada con uno o más inyectores y definición del caudal másico exacto (kg/s);

Influencia de la atmósfera sobre las fases de líquido y gas en los primeros centímetros de suelo.

TOUGHREACT añade al código de simulación de flujo multifase TOUGH2 (Pruess et al., 1999) ecuaciones que permiten modelar procesos de transporte reactivo de solutos, fases minerales y gases. TOUGH2 permite simular flujos no isotérmicos de fluidos multicomponentes y multifase en medio poroso o fracturado en una, dos o tres dimensiones.

Para la simulación de la inyección de gas en la ZNS únicamente se dispone de la experiencia previa de Oldenburg y Unger (2003, 2004). La complejidad del sistema requiere de un primer paso de modelación con inyección de un fluido gaseoso casi ideal y poco soluble como el aire, para entender todos los procesos de transporte que podrían producirse en la celda de suelo. Además, la elección del aire como gas de inyección permite una puesta a punto del modelo con la herramienta TOUGHREACT. Para las simulaciones realizadas en este trabajo, se ha considerado la inyección de una fase gaseosa inerte equivalente, de las características físicas del aire. En etapas posteriores, a esta fase gaseosa se le incluirán distintas proporciones del compuesto CO<sub>2</sub> (gas).

### 3.2.- Modelo conceptual y materiales

Se han simulado dos materiales distintos para modelar las celdas experimentales en dos dimensiones (Fig. 2). El primer material (suelo experimental) rellena los 2 metros de suelo experimental (de -0,5 a -2,5 metros) donde va tener lugar la inyección del gas, su migración y las interacciones con los biotipos presentes. Para este trabajo, el suelo ha sido considerado como conductivo (permeabilidad intrínseca  $k = 10^{-13} \text{ m}^2$ ) y poroso (0,15) con unas variaciones de conductividad hidráulica relativa y presión capilar regidas por funciones de Van Genuchten (Van Genuchten, 1980). Por debajo del suelo, se ha implementado un material mucho menos permeable ( $k = 10^{-17} \text{ m}^2$ ) y poco poroso (0,05) para simular la presencia de un nivel muy poco conductivo en la celda experimental (hormigón). Las variaciones de conductividad hidráulica relativa y de presión capilar también vienen dadas por las funciones de Van Genuchten. Las características y parámetros hidráulicos de los dos materiales se muestran en la Tabla 1. La mayoría de los datos han sido extraídos del estudio de Oldenburg y Unger (2003).

### 3.3.- Condiciones de contorno

El nivel freático se encuentra en la base del suelo poco permeable y es impuesto como condición de contorno inferior. En TOUGHREACT, es necesario además especificar los parámetros térmicos (calor específico y conductividad térmica) para mantener las características isothermas del problema.

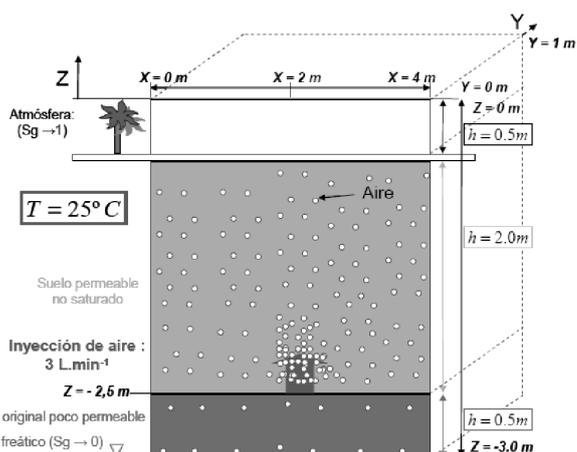


Fig. 2. Modelo conceptual de la celda PISCO<sub>2</sub> con las dimensiones de cada material y las condiciones de contorno.

Por encima de la celda experimental se ha considerado un nivel de 0,5 m que simula la atmósfera (de 0 a -0,5 metros). De este modo se facilita la cuantificación de los flujos de gas en esta interfase durante la inyección, representando la condición de contorno superior del modelo.

Finalmente, como condiciones laterales de contorno, se ha considerado flujo nulo de agua y gas.

### 3.4.- Escenario de simulación

El periodo de inyección de CO<sub>2</sub> simulado ha sido de 6 meses (inyección continua de gas). El objetivo ha sido alcanzar flujos estacionarios de gas en la celda experimental. En las simulaciones realizadas, el gas inyectado es aire asimilado a un gas ideal para favorecer la comprensión de los fenómenos físicos implicados durante la inyección y la migración en la columna de suelo. Se ha elegido un caudal de  $12 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$  ( $2,4 \cdot 10^{-4} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ ), determinado en cálculos preliminares (Credez et al., 2010). En el estudio original, se han simulado tres casos adicionales con variación del caudal de inyección y de la posición del inyector. Los caudales de inyección están especificados por celda experimental ( $16 \text{ m}^2$  de superficie).

La presión inicial en la celda experimental es constante y se aproxima a la presión atmosférica ( $101310 \pm 20 \text{ Pa}$ ;  $1,0131 \text{ bar} \pm 0,2 \text{ mbar}$ ) a lo largo de la columna de suelo (2 m de profundidad), así como en la zona de atmósfera (0,5 m de altura) y cerca del nivel freático (-2,5 m de profundidad). Las pocas variaciones iniciales de presión son debidas al gradiente hidrostático. La distribución inicial del contenido en agua en la ZNS corresponde a la del flujo estacionario de agua. La saturación inicial en agua ( $S_a$ ) y la saturación en gas ( $S_g$ ) ( $S_a = 1 - S_g$ ) varían en función de la profundidad y del suelo. La simulación numérica se realiza en dos dimensiones únicamente con un metro de ancho en la dirección del eje Y (Fig. 2), o sea  $4 \text{ m}^2$  de superficie (x, y), en lugar de  $16 \text{ m}^2$  en tres

dimensiones, y un caudal aplicado de 3 L·min<sup>-1</sup> en este dominio, en lugar de 12 L·min<sup>-1</sup>.

**Tabla 1.** Características y parámetros hidráulicos de los dos materiales de suelo y aislante.

Materiales	Suelo experimental	Material poco permeable
x [m]	4	4
y [m]	1	1
z [m]	2	0,5
Porosidad [-]	0,15	0,05
Densidad [kg·m <sup>-3</sup> ]	1000	1000
<b>Parámetros hidráulicos</b>		
Permeabilidad x [m <sup>2</sup> ]	10 <sup>-13</sup>	10 <sup>-17</sup>
Permeabilidad y [m <sup>2</sup> ]	10 <sup>-13</sup>	10 <sup>-17</sup>
Permeabilidad z [m <sup>2</sup> ]	10 <sup>-13</sup>	10 <sup>-17</sup>
Tortuosidad [-]	0,5	0,5
Parámetro de Klinkenberg [Pa]*	10 <sup>7</sup>	10 <sup>7</sup>
<b>Propiedades térmicas</b>		
Conductividad térmica [W·m <sup>-1</sup> ·°C <sup>-1</sup> ]	0,7	0,7
Calor específico [J·kg <sup>-1</sup> ·°C <sup>-1</sup> ]	850	850
<b>Parámetros de Van Genuchten</b>		
λ [-]	0,2	0,2
α [m <sup>-1</sup> ]	100	1
S <sub>ri</sub> [-]	0,1	0,1
P <sub>max</sub> [Pa]	10 <sup>8</sup>	10 <sup>8</sup>
S <sub>ls</sub> [-]	1,0	1,0

\*Este parámetro condiciona la movilidad del gas con respecto al líquido, en este caso el agua

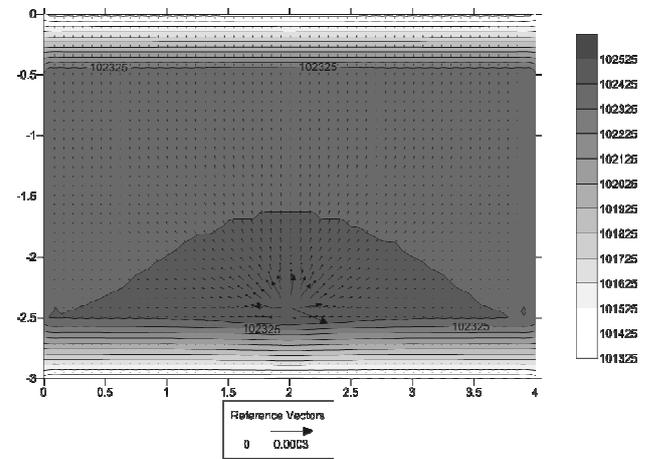
#### 4.- Resultados

El suelo no saturado tiene una presión inicial aproximadamente de 1 atm (101325 Pa) a lo largo de la celda. La presión máxima de inyección de aire dentro de la celda es de 102525 Pa si se mantiene el caudal de inyección impuesto de 12 L·min<sup>-1</sup> en la celda. La sobrepresión debida a la inyección es de +12 mbar (120 Pa). Las condiciones estacionarias en términos de presión de gas y flujo de gas se alcanzan en una hora (Fig. 3) y no evolucionan significativamente durante los 6 meses siguientes. La inyección de gas implica el desplazamiento del agua en la ZNS que resulta bastante lento (hasta varios meses) y muy localizado (unos centímetros cerca del punto de inyección) como indica la saturación en gas en la Fig. 4.

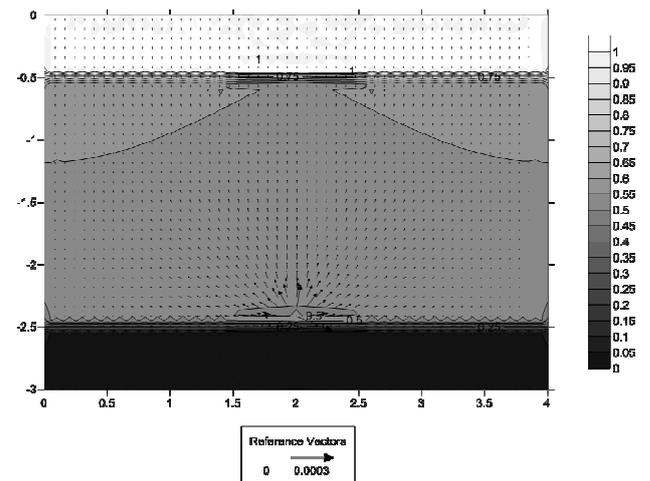
Según los resultados del modelo, estas variaciones locales del contenido de agua del suelo tienen poca influencia en la repartición global de los flujos de gas hacia la superficie. Después de unas horas de inyección, la distribución del flujo de gas en superficie es casi uniforme (Fig. 5).

A partir de 1 mes, la simulación predice el secado de la zona cercana del punto de inyección. Este fenómeno es más visible después de 6 meses de inyección. En la superficie de la celda modelada (de 4 m<sup>2</sup>), los flujos de gas desde el suelo hacia la superficie alcanzan 1,50·10<sup>-5</sup> kg·s<sup>-1</sup>·m<sup>-2</sup>. Si se analiza en detalle la evolución de los flujos (Fig. 5), se predicen flujos superiores en la misma coordenada X de la posición del inyector (+ 2 m). Esta diferencia no será significativa para los biotopos en el sistema real en

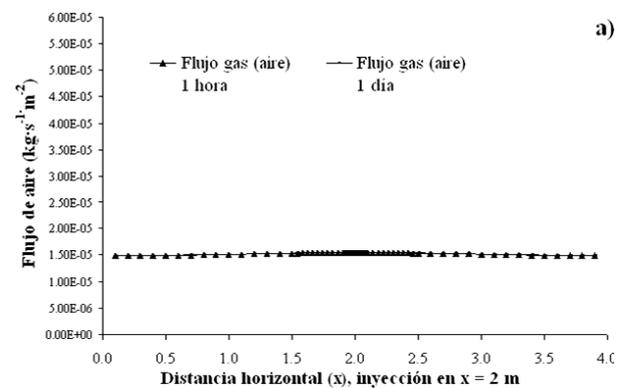
comparación con los flujos globales de CO<sub>2</sub> inyectado. El caudal de gas que sale a la superficie después de 1 hora es el 98,5% del caudal inyectado y en 1 mes es el 98,6% indicando que el flujo de gas se encuentra en condiciones estacionarias.



**Fig. 3.** Presión (Pa) y vectores de flujos de gas (kg·s<sup>-1</sup>·m<sup>-2</sup>) después de 1 día de inyección (12 L·min<sup>-1</sup> en la celda).



**Fig. 4.** Saturación en gas ( $S_g = 1 - S_a$ ) y vectores de flujos de gas (kg·s<sup>-1</sup>·m<sup>-2</sup>) después de 1 día de inyección (12 L·min<sup>-1</sup> en la celda).



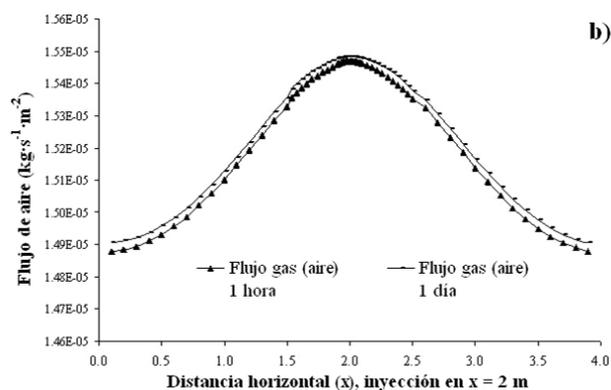


Fig. 5. Flujos de gas ( $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ ) en la superficie de la celda después de 1 hora y 1 día de inyección ( $12\text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$  en la celda). En el gráfico b se muestra con más detalle en la escala vertical.

## 5.- Discusión

Los modelos numéricos realizados en este estudio predicen que a partir de caudales de inyección técnicamente posibles (del orden de  $1$  a  $10\text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$ ) se obtienen flujos homogéneos en superficie del orden de  $1\cdot 10^{-5}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ . Para el futuro desarrollo de los experimentos biológicos, es importante establecer qué posibles efectos podrían tener sobre los organismos (microfauna, líquenes, plantas) es decir, si estos flujos son suficientes o excesivamente elevados. Por ahora, se han simulado solamente los procesos de transporte de gas. En estudios posteriores, se simulará la acidificación del suelo y las consecuencias del transporte reactivo del CO<sub>2</sub>.

En el caso de estudio de emisión natural “normal”, los datos de la línea de base de CO<sub>2</sub> en la Planta de Desarrollo Tecnológico de Hontomín (Burgos), obtenidos en las campañas realizadas en el marco del Subprograma de Sistemas Naturales y Monitorización de CIUDEN, indican un rango de flujos medidos de CO<sub>2</sub> debidos a la actividad biológica entre  $1\cdot 10^{-8}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$  a  $5\cdot 10^{-7}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$  (Mazadiego et al., 2009). Estos datos son totalmente comparables con otros ejemplos descritos; por ejemplo, Costa et al. (2008) presentaron flujos de CO<sub>2</sub> de  $2,3\cdot 10^{-8}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ . Luego, en tres casos de estudio de emisiones anómalas de CO<sub>2</sub>, las medidas realizadas en zonas con actividad emisora alta (en general asociado a descarbonación profunda de carbonatos o a emisiones volcánicas) indican flujos máximos de algunos órdenes de magnitud superiores. Por ejemplo, Costa et al. (2008) presentaron mediciones de  $4\cdot 10^{-5}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$  en la zona de Caldara di Manziana (Italia) donde sólo persisten plantas especialmente adaptadas a estas condiciones. Flujos similares (de hasta  $7,5\cdot 10^{-5}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ ) han sido reportados en otras zonas por Nisi et al. (2009) en Caprese Michelangelo (Italia) y por Rogie et al. (2001) en la zona de Mammoth Mountain (EEUU). En este último caso, las consecuencias para los ecosistemas han resultado funestas. En vista a lo expuesto, se propone que el caudal mínimo de CO<sub>2(g)</sub> a inyectar (considerando una densidad de  $2\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ) sea de  $1,6\cdot 10^{-7}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$  por celda ( $16\text{ m}^2$  de superficie), es decir de  $4,8\cdot 10^{-3}\text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$  para reproducir flujos no anómalos

en zonas naturales. Además, se recomienda una capacidad de inyección máxima de un caudal de CO<sub>2(g)</sub> de  $2\cdot 10^{-5}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$  por celda,  $10\text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$ , para realizar ensayos de inyección de CO<sub>2</sub> en escenarios de fuga muy alta. Muy posiblemente, flujos mayores implicarían una muerte rápida de los ecosistemas de las celdas experimentales.

No obstante, se debe de considerar también la influencia de la actividad edafológica durante la medición de flujos de CO<sub>2</sub> en superficie. Los procesos microbiológicos del suelo, la evolución de la materia orgánica y la influencia de la estructura de suelo en agregados (Paustian et al., 2000) podrían capturar o producir una cantidad significativa del CO<sub>2</sub> inyectado al iniciar las operaciones de inyección en la planta experimental PISCO<sub>2</sub>.

## 6.- Conclusiones

Los resultados de la simulación de la inyección de gas ideal (aire) con un caudal de  $12\text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$  en la celda experimental indican sobrepresiones de 12 mbar si se mantiene el caudal impuesto. Los flujos de gas en la interfase suelo/atmósfera productos de la inyección serán homogéneos después de pocas horas, y del orden de  $1,50\cdot 10^{-5}\text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ . Aunque el flujo de gas en superficie sea uniforme en la interfase suelo/atmósfera, se predice una amplitud mayor en la coordenada x de la posición del inyector cuando más cerca esté el inyector, pero sin impacto significativo sobre las condiciones biogeoquímicas y los biotopos del sistema real. Los modelos también predicen el fenómeno de desplazamiento de agua sin influencia significativa sobre los flujos de gas.

A partir de los resultados de este estudio se puede concluir que el grado de saturación en agua de la ZNS (y por lo tanto los resultados de los cálculos) es muy sensible a los parámetros intrínsecos de los materiales: porosidad, saturación residual, conductividad saturada (Ksat), permeabilidad intrínseca (k), curvas de retención (función de Van Genuchten).

Está previsto que en futuros estudios, se considere la inyección de CO<sub>2(g)</sub>, el efecto de las reacciones químicas implicadas, la variación del pH del suelo en condiciones estacionarias de inyección de gas y los cambios de porosidad por precipitación/disolución de minerales en el suelo.

*Agradecimientos.* Este trabajo ha sido financiado por la Fundación Ciudad de la Energía, mediante el convenio de colaboración entre la Fundación y la consultoría Amphos 21 (ALM/09/036) y cofinanciados por la Unión Europea (European Energy Programme for Recovery). La única responsabilidad de esta publicación es de los propios autores. La Unión Europea no es responsable de cualquier uso que pueda ser realizado de la información contenida en este documento.

## 7.- Bibliografía

Britter, R.E., y Griffiths, R.F. (1982). Dense gas dispersion *Chem Eng Monogr* 16 Elsevier, New York.

- Britter, R.E., y McQuaid, J. (1988). *Workbook on the dispersion of dense gases HSE Contract Research Rep 17/1988* Health Saf Exec Rep, Sheffield, UK.
- Britter, R.E. (1989). Atmospheric dispersion of dense gases. *Ann.Rev.Fluid Mech.* 21:317-344.
- Bruno, J., Credo, A., Grandia, F., García, D.A., Fuentes-Cantillana, J.L., Calabuig, E.L y, Montoto, M. (2011). PISCO2 Project: In-situ experiments of the ecological response to CO<sub>2</sub> leakage in soils – EEPR OXYCFB300 Compostilla Project, Spain. Poster contribution to the 3rd European Conference on CCS Research, Development and Demonstration. London, May, 24-26th.
- Costa, A., Chiodini, G., Granieri, D. y Folch A. (2008). A shallow-layer model for heavy gas dispersion from natural sources: Application and hazard assessment at Caldara di Manziara, Italy. *Geochemistry Geophysics Geosystems* G3, 9(3), DOI: 10.1029/2007GC001762.
- Credo, A., Bayer, M., Luna, M., Grandia, F. y Jordana, S. (2010). Modelización de inyección de CO<sub>2</sub> para la optimización del diseño de parcelas experimentales. Informe CIUDEN, Proyecto PISCO2 ALM/09/036. 51 p.
- Fang, C. y Mongrieff, J.B. (1999). A model for soil CO<sub>2</sub> production and transport 1: Model development. *Agricultural and Forest Meteorology*, 95 (4), 225-236.
- IPCC (2005). Carbon dioxide capture and storage - Bert Metz, Ogunlade Davidson, Heleen de Coninck, Manuela Loos and Leo Meyer (Eds.) Cambridge University Press, UK. pp 431.
- IPCC (2007). Fourth Assessment Report on Climate Change (AR4): Synthesis report. Pachauri, R.K. and Reisinger, A. (Eds.). IPCC, Geneva, Switzerland. pp 104.
- Mazadiego, L.F., de Elio, J., Chacón, E., Llamas, J.F., García, E. y Ortega, M. (2009). Interpretación de las campañas 0 y 1 realizadas en Hontomin (Burgos). Informe Universidad Politécnica de Madrid. Subprograma de Monitorización y Sistemas Naturales, CIUDEN.
- Mongrieff, J.B. y Fang, C. (1999). A model for soil CO<sub>2</sub> production and transport. 2: Application to a florida Pinus elliotte plantation. *Agricultural and Forest Meteorology*, 95 (4), 237-256.
- Nisi, B., Vaselli, O., Lelli, M., Segoni, S., Moretti, S., Tassi, F. y Montegrossi, G. (2009). Diffuse CO<sub>2</sub> flux and high precision GPS measurements at Caprese Michelangelo (Arezzo, Tuscany) : the “0” point. Informe CNR-IGG. Subprograma de Monitorización y Sistemas Naturales, CIUDEN.
- Oldenburg, C.M. y K. Pruess (2000). Simulation of propagating fronts in geothermal reservoirs with the implicit Leonard total variation diminishing scheme. *Geothermics* 29:1-25.
- Oldenburg, C. M. y Unger, A. J. A. (2003). On leakage and seepage from geologic carbon sequestration sites: Unsaturated zone attenuation. *Vadose Zone J.* 2: 287-296.
- Oldenburg, C.M. y Unger, A.J.A. (2004). Coupled Vadose Zone and Atmospheric Surface-Layer Transport of Carbon Dioxide from Geologic Carbon Sequestration Sites. *Vadose Zone Journal*, 3: 848-857.
- Paustian, K., Six, J., Elliott, E.T. y Hunt, H.W. (2000). Management options for reducing CO<sub>2</sub> emissions from agricultural soils. *Biogeochemistry*, 48, 147-163.
- Pruess, K., Oldenburg, C. y Moridis, G. (1999). TOUGH2 user's guide, Version 2.0, Lawrence Berkeley Laboratory Report LBL-43134, Berkeley, California.
- Rogie, J. D., Kerrick, D.M. Sorey, M.L. Chiodini, G. y Galloway, D.L. (2001), Dynamics of carbon dioxide emission at Mammoth Mountain, California, *Earth and Planetary Sci. Lett.*, 188, pp. 535-541.
- Van Genuchten, M. T. H. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science of American proceedings*, 44, no. 5, p. 892-898.
- Xu, T., Sonnenthal, E., Spycher, N. y Pruess, K. (2004) TOUGHREACT User's Guide: A Simulation Program for Non-isothermal Multiphase Reactive Geochemical Transport in Variably Saturated Geologic Media. Earth Sciences Division. Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley, CA 94720.