

Assessing the Concentration of CO₂ in Coal using Raw Volumetric Sorption Data: Importance and Challenges

Yuriko Yarel Bueno-Yamamoto^{1,2,3*}, Cristina F. Alves Rodrigues^{3,4,5}, Juan Josué Enciso-Cárdenas^{1,2}, Arturo Bueno-Tokunaga¹, Luis Fernando Camacho-Ortegón^{1,2}, Manuel João Lemos de Sousa^{3,4,5}, Genaro de la Rosa Rodríguez^{1,2,3}.

¹ Centro de Investigación en Geociencias Aplicadas, Universidad Autónoma de Coahuila (UADEC).

² Centro de Estudios e Investigaciones Interdisciplinarios, (UADEC).

³ I3&ID - Fundação/Universidade Fernando Pessoa.

⁴ MARE – Centro de Ciência do Mar e Ambiente.

⁵ Academia das Ciências de Lisboa.

Evaluación de la concentración de CO₂ en el carbón utilizando datos volumétricos brutos de sorción: Importancia y Retos

Yuriko Yarel Bueno-Yamamoto^{1,2,3*}, Cristina F. Alves Rodrigues^{3,4,5}, Juan Josué Enciso-Cárdenas^{1,2}, Arturo Bueno-Tokunaga¹, Luis Fernando Camacho-Ortegón^{1,2}, Manuel João Lemos de Sousa^{3,4,5}, Genaro de la Rosa Rodríguez^{1,2,3}.

¹ Centro de Investigación en Geociencias Aplicadas, Universidad Autónoma de Coahuila (UADEC).

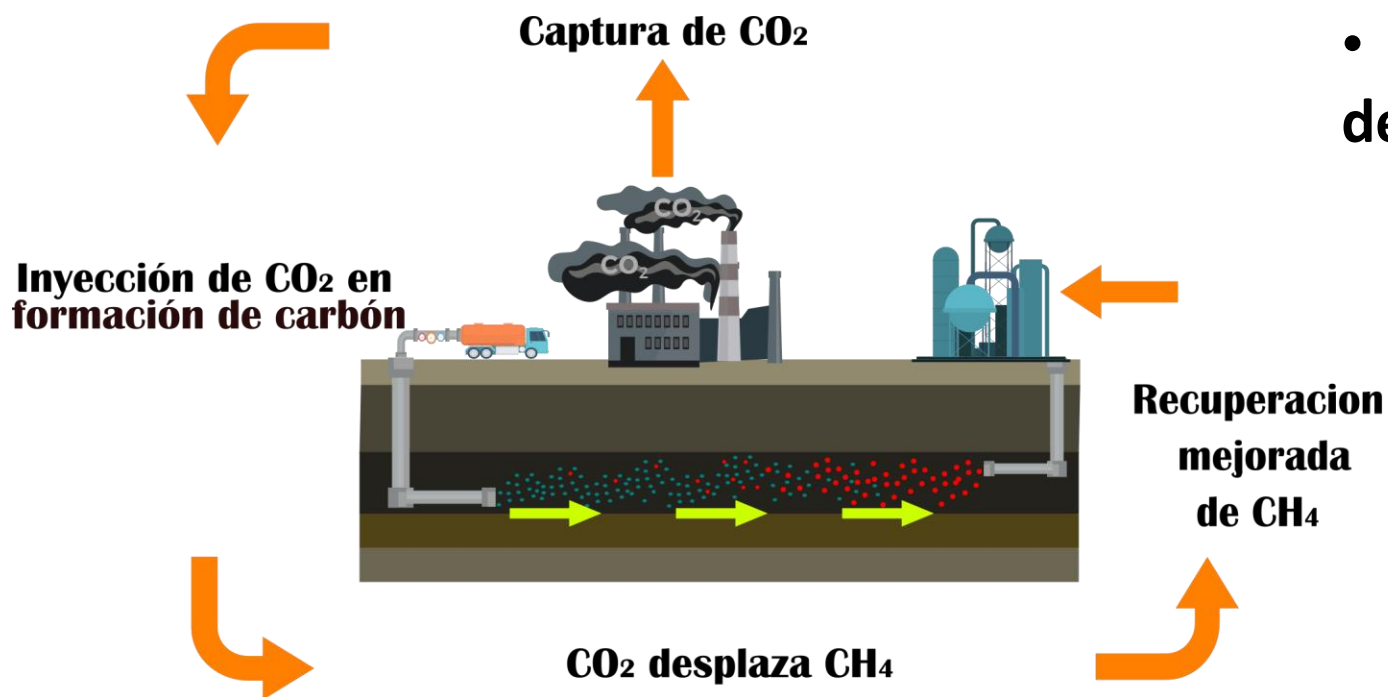
² Centro de Estudios e Investigaciones Interdisciplinarios, (UADEC).

³ I3&ID - Fundação/Universidade Fernando Pessoa.

⁴ MARE – Centro de Ciência do Mar e Ambiente.

⁵ Academia das Ciências de Lisboa.

- Cambio climático → necesidad de reducir emisiones.



- Captura, utilización y almacenamiento de carbono (CCUS).

- Alternativas: acuíferos salinos, yacimientos agotados, Capas de carbon, etc.

Fuente: Bueno-Yamamoto et al., 2025;
Geomimet, 374.

Carbón como alternativa

Alta microporosidad

Afinidad por CO₂



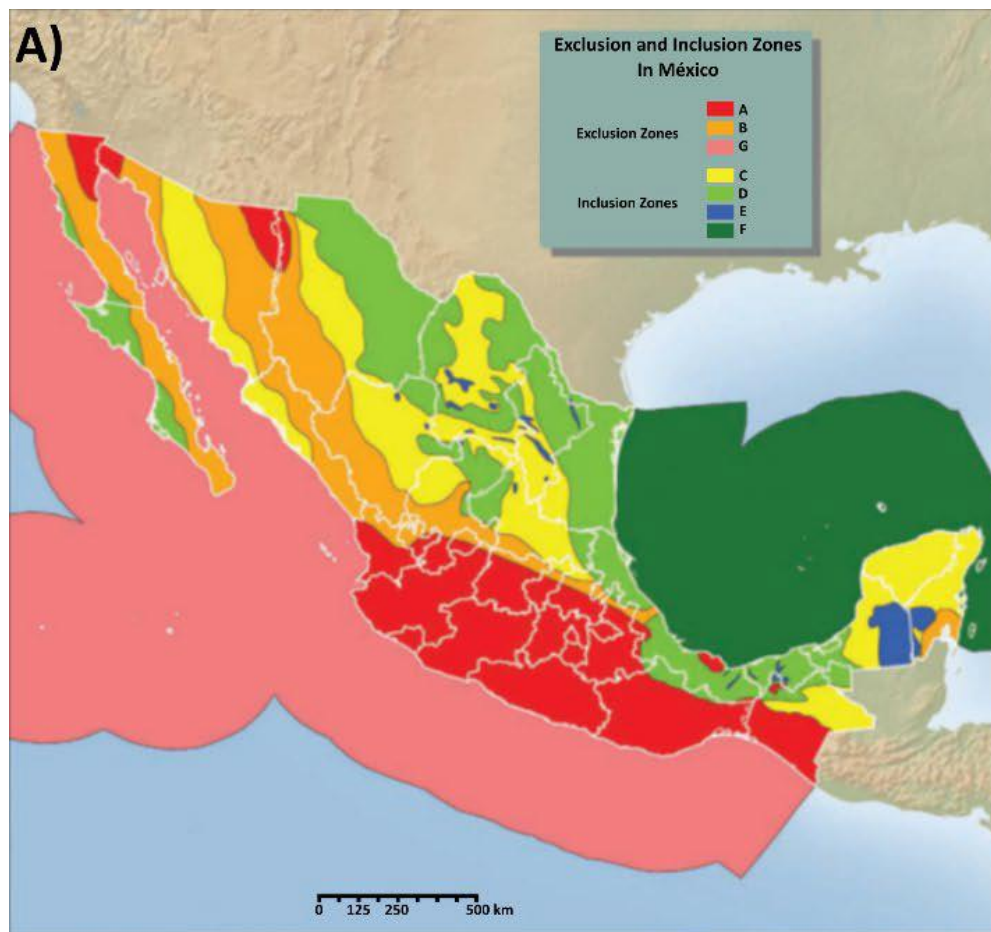
Potencial de almacenamiento
significativo

Recuperación de metano
como beneficio adicional

Situación Mundial

Como parte de las estrategias para mitigar el cambio climático, han sido exitosamente implementadas tecnologías CCUS en capas de carbon en paises como Canada, Polonia, Chile, Japón, entre otros.

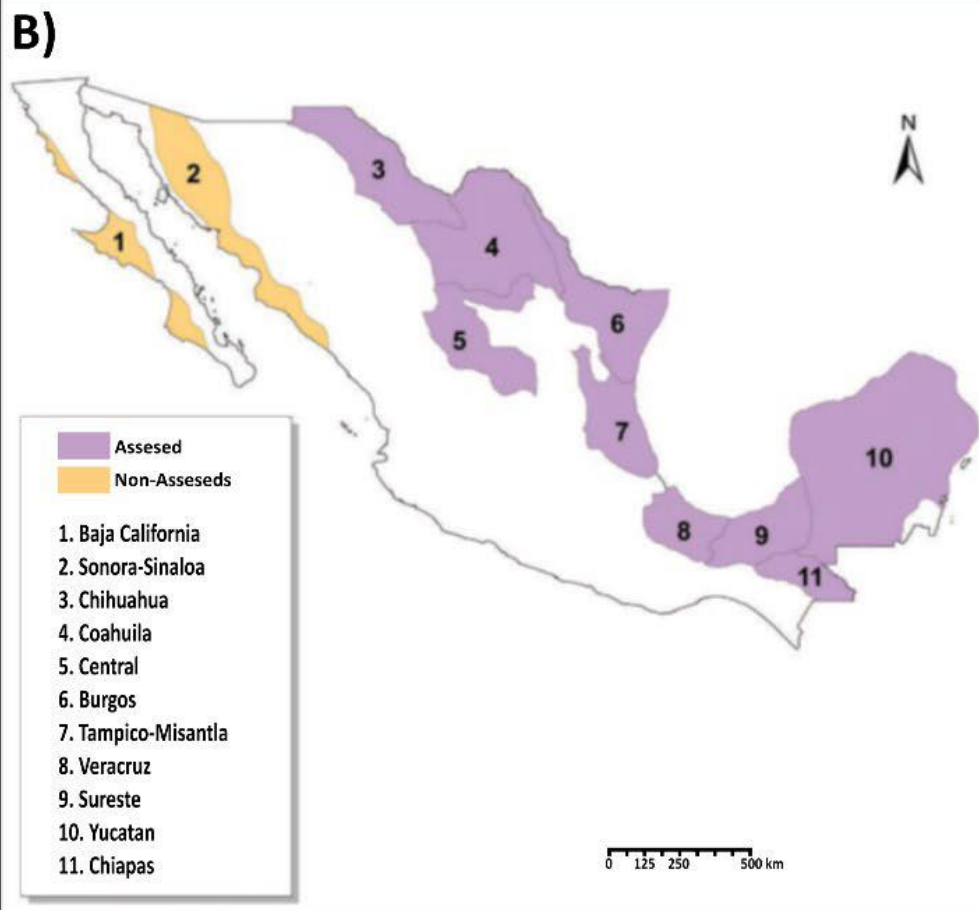




Fuente: Dávila et al., 2010; NACSA, 2012.

- México ha avanzado significativamente en el desarrollo de tecnologías de captura y almacenamiento de carbono (CCS/CCUS).
- Desde 2007, el CCUS se integró en la Estrategia Nacional de Cambio Climático, y en 2009–2012 se realizaron los primeros estudios de factibilidad.
- En 2011, un estudio nacional identificó zonas favorables para el almacenamiento geológico de CO₂.

Situación en México



- Se elaboró un mapa de zonas de inclusión y exclusión, con 11 regiones de alto potencial.
- Los resultados mostraron el potencial de México, pero también la necesidad de estudios geológicos más específicos.
- Zona carbonífera de Coahuila.
- Estudios recientes estiman una capacidad de almacenamiento: 17 Mm³ de CO₂.

Fuente: Dávila et al., 2010; NACSA, 2012.

Efectividad del almacenamiento de CO_2

La efectividad del almacenamiento geológico depende de:

Capacidad de almacenamiento de la formación.

Estabilidad del CO_2 a largo plazo.

Mecanismos de transporte en el medio poroso.



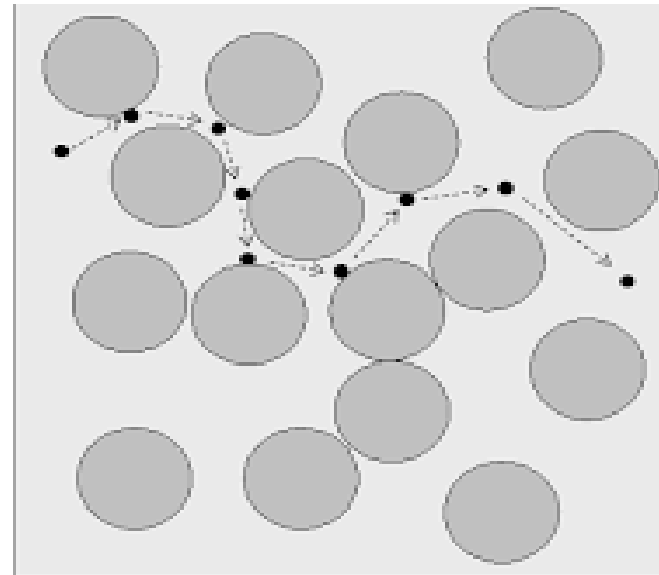
Entre 95% y 98% del gas en el carbón se encuentra adsorbido en la matriz orgánica.



En formaciones de baja permeabilidad, como el carbón, la difusión controla el movimiento y retención del CO_2 .

Difusión

Es la difusión quien controla movimiento del gas a través de la estructura porosa y por ende la seguridad del almacenamiento.



**Económicamente
un parámetro
importante**

Difusión

La difusión es impulsada en gran medida por los gradientes de concentración, lo que permite que los gases se muevan a través de los poros de la materia orgánica desde las áreas de mayor concentración hacia las de menor concentración.



Mayor Concentración

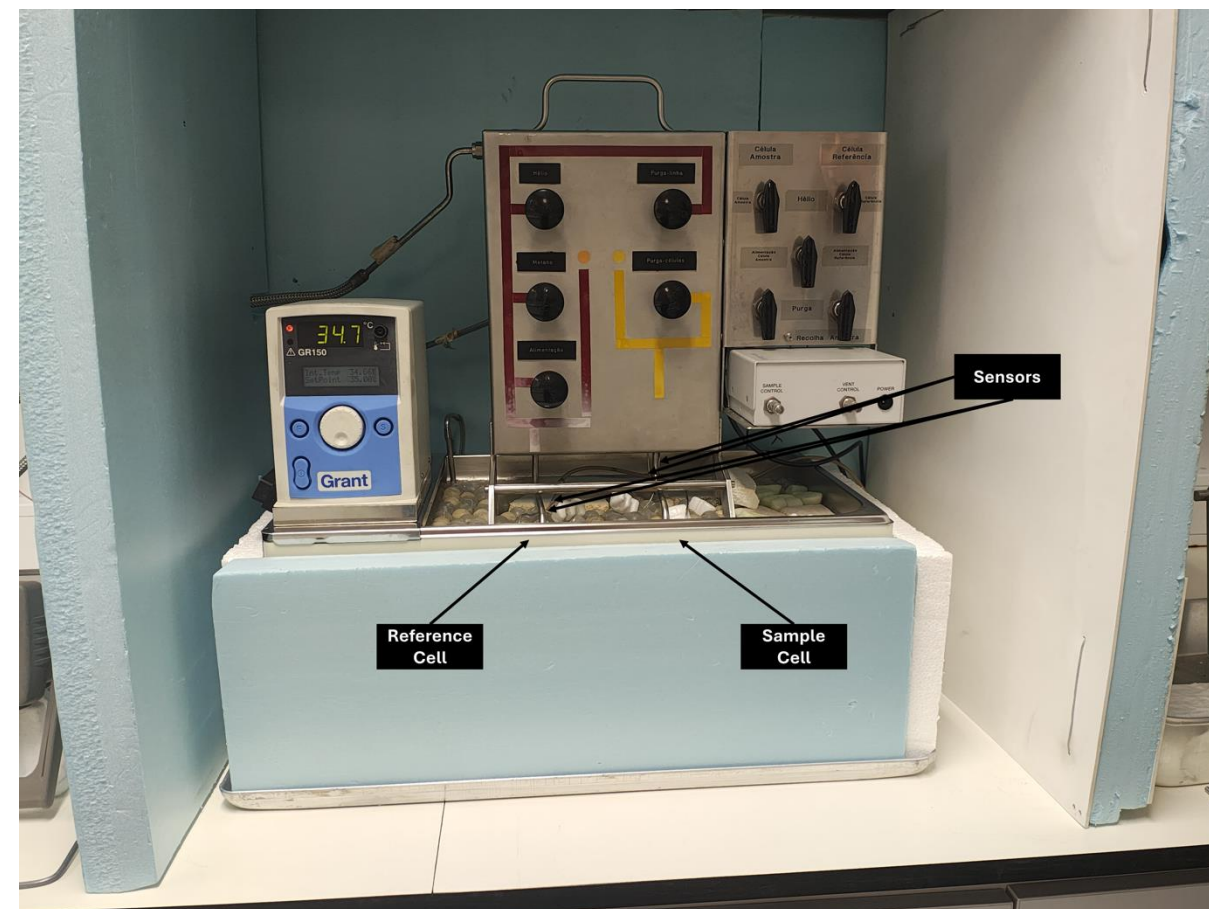


Menor Concentración

Equipo: celda de referencia y celda de muestra en baño térmico.

Procedimiento: calibración con y sin muestra.

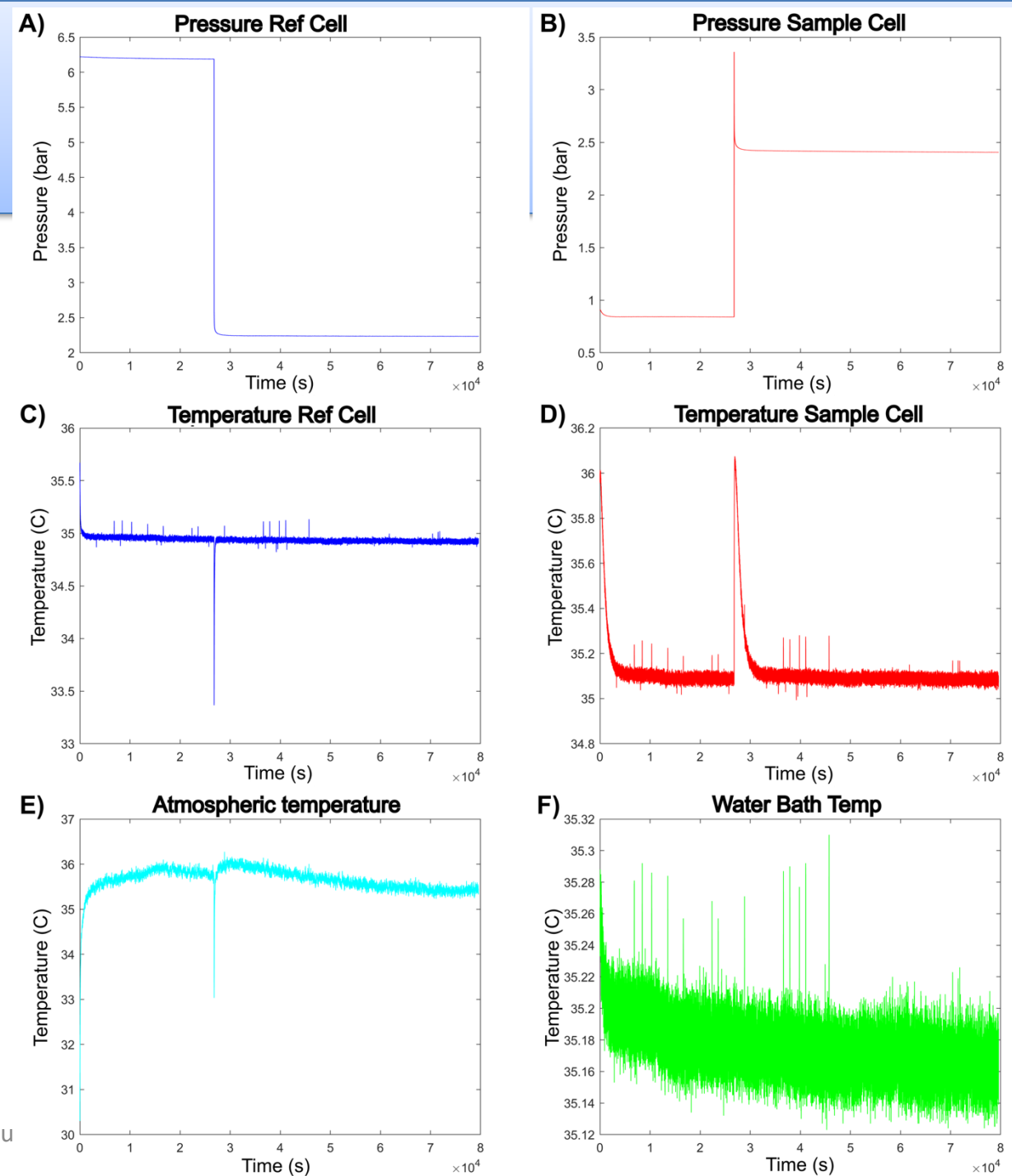
Varios steps con incrementos/decrementos de presión.



Resultados



Registro de presión en ambas celdas y temperatura (cambas celdas, baño, y atmósfera) por segundo.



Concentración

Concentración

$$C = 3.6692 \times 10^{-5} \gamma_g \rho_c v$$

γ_g Gravedad específica del gas

ρ_c Densidad del Carbón (g/cm^3)

v Capacidad de sorción (m^3/ton)

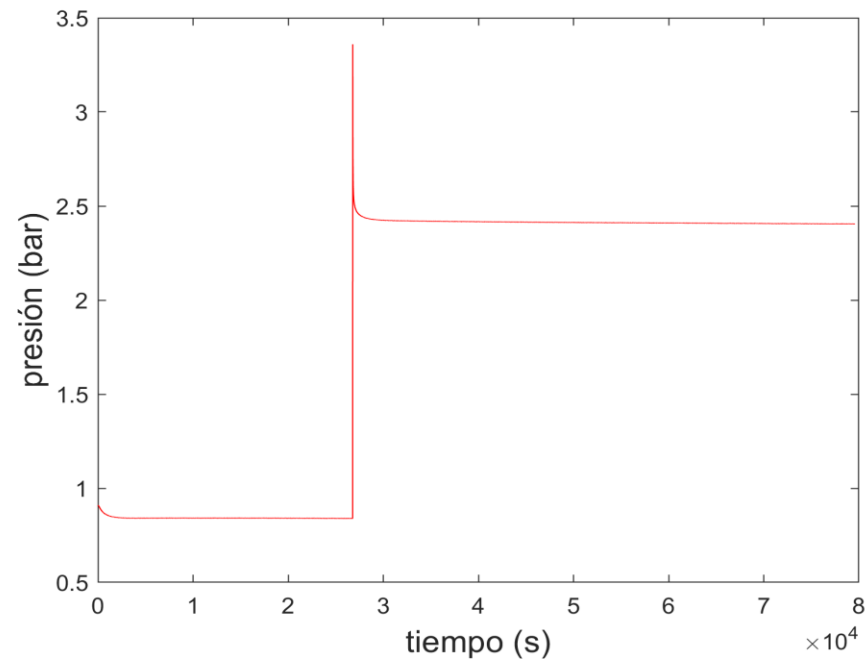
Gravedad
específica de CO_2
1.52

Densidad de la
muestra de carbón
 $1.344 g/cm^3$

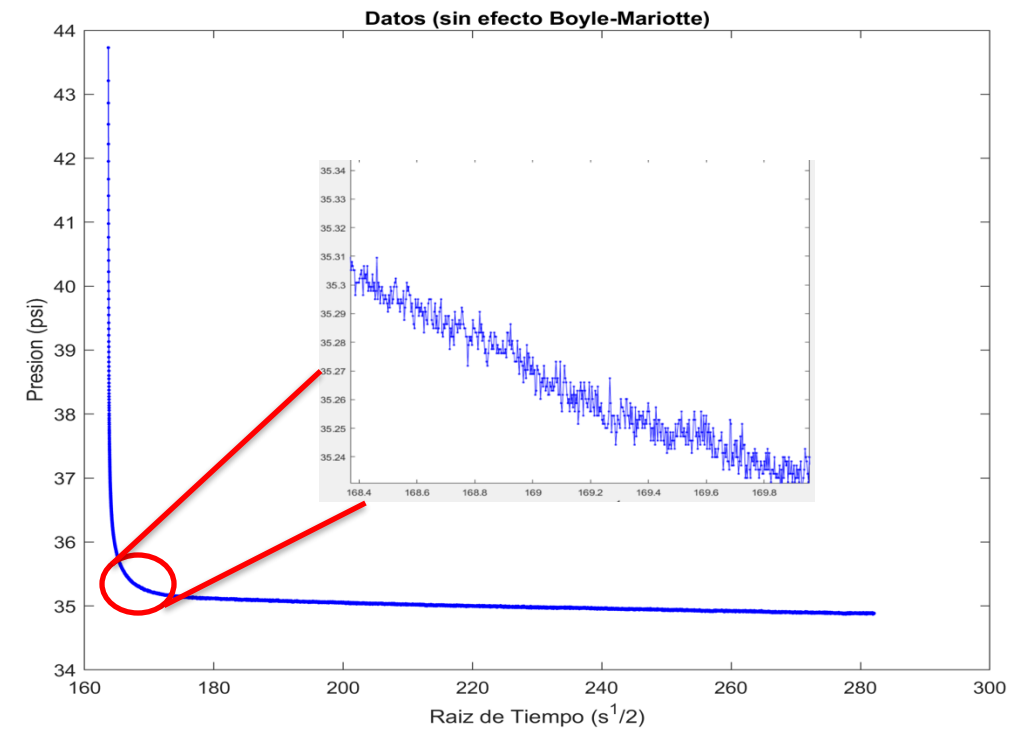
Ecuación de Langmuir

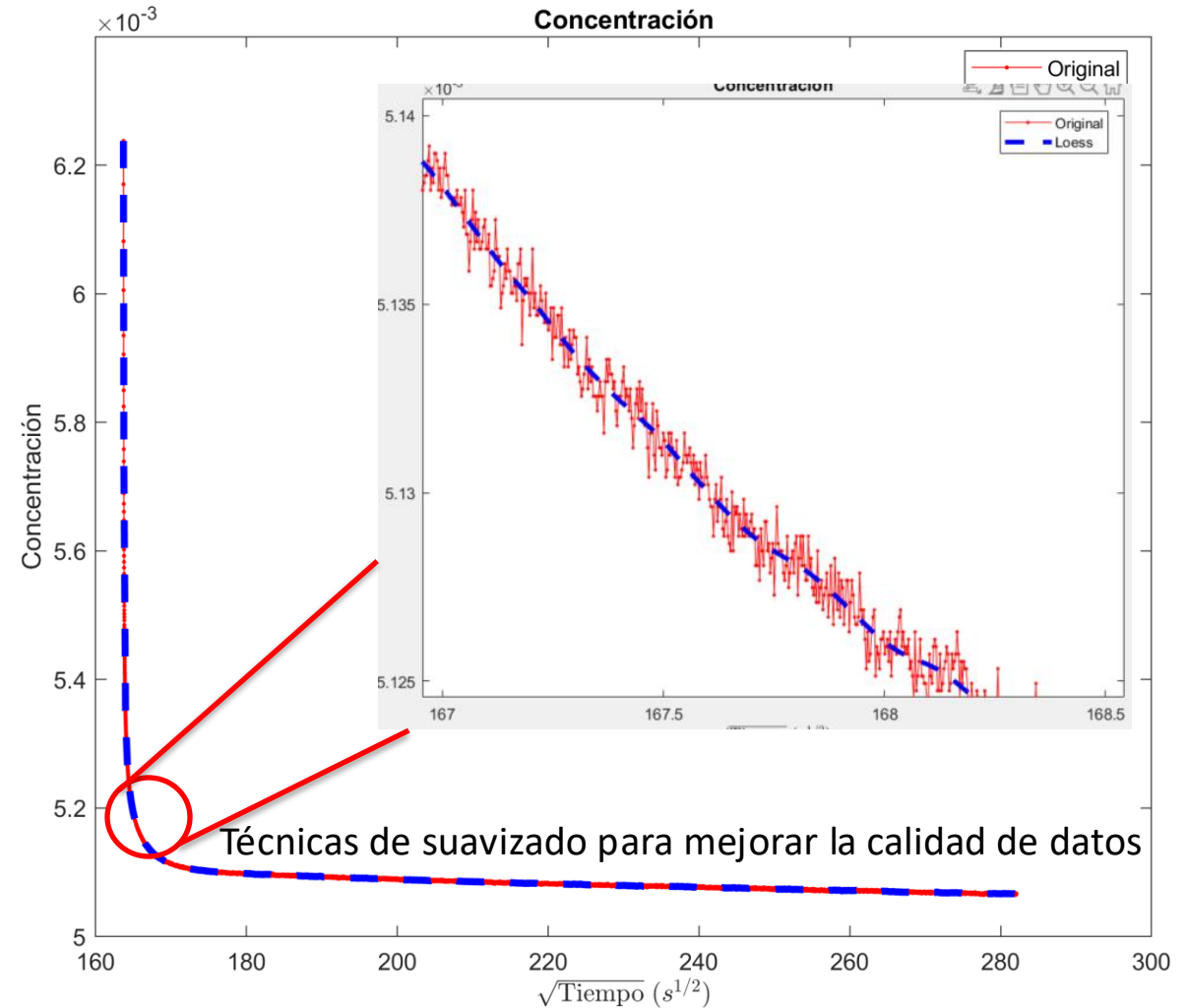
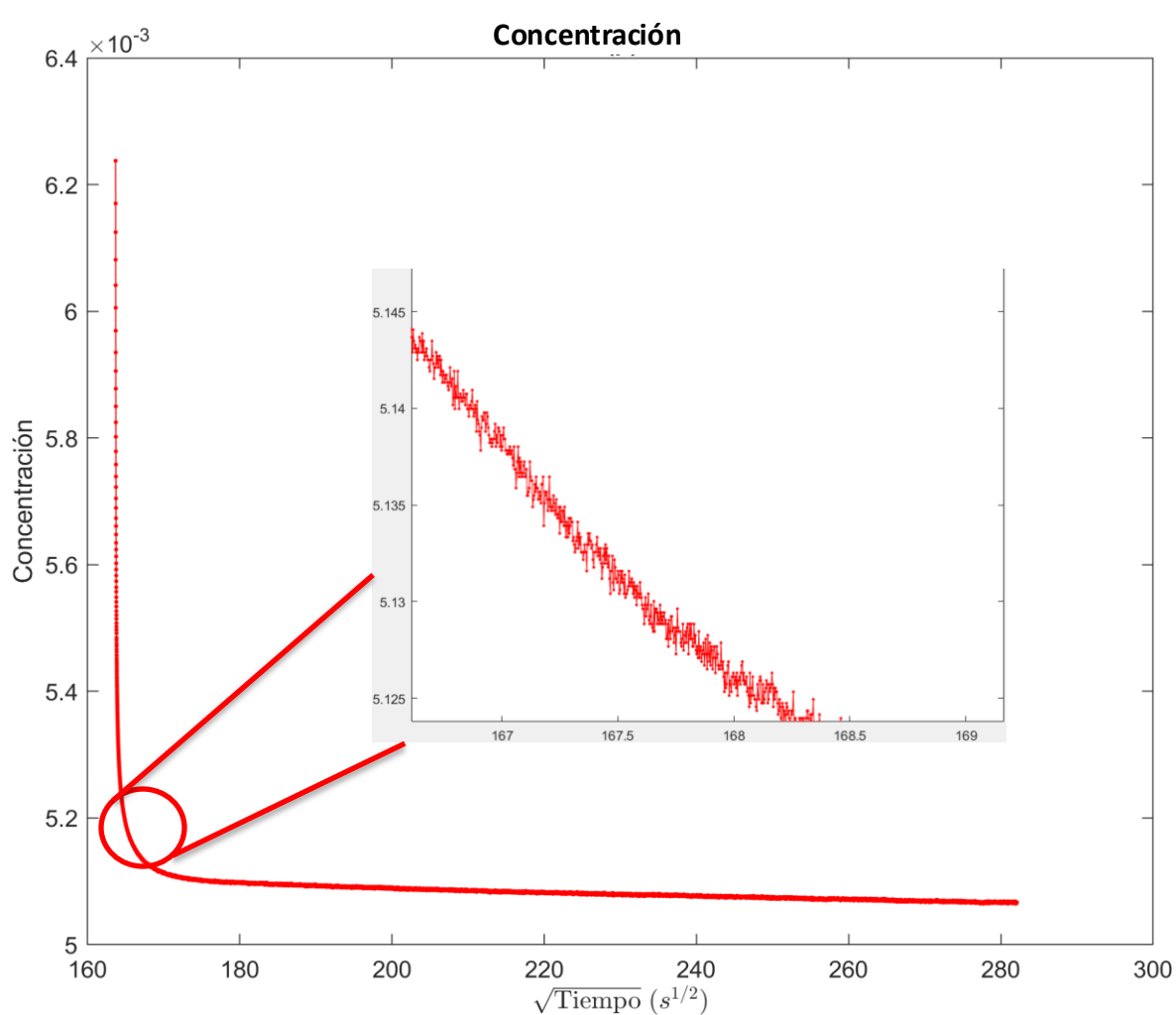
$$V = \frac{V_L \times P}{P_L + P}$$

Presión Celda Muestra



Efecto
Boyle-Mariotte





Resultados

Se realizan todos los steps (incrementos) para obtener la ecuación de langmuir



$$V(P) = \frac{933.6474 \times P}{450.4857 + P}$$



Se transforma a función del tiempo con P(t)



Ecuación de Concentración

Conclusiones



La caracterización precisa del CO₂ en carbón es clave para evaluar la viabilidad del almacenamiento geológico

El uso de datos volumétricos crudos permite identificar y corregir incertidumbres experimentales.

Se propone una metodología mas consistente para mejorar el análisis de sorción de carbón.

El procesamiento adecuado de datos mejora la estimación de concentraciones de CO₂ en formaciones geológicas.

El ruido afecta cálculos, las técnicas de suavizado reducen el ruido experimental y mejoran la calidad de los cálculos posteriores (difusión, simulación).

Precisión en concentración de CO₂ en carbón es clave para el cálculo de la difusión y viabilidad económica en el CCUS.

Gracias por su atención



¿Preguntas?



UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DE
COAHUILA

Contacto:

Yuriko Yarel Bueno Yamamoto
buenoyuriko@uadec.edu.mx

Bachu, S. (2008). CO₂ storage in geological media: Role, means, status and barriers to deployment. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(2), 254-273.

<https://doi.org/10.1016/j.peccs.2007.10.001>

Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2002). *Fenómenos de transporte* (2ª ed.). Reverté.

Busch, A., Gensterblum, Y., & Krooss, B. M. (2003). Methane and CO₂ sorption and desorption measurements on dry Argonne premium coals: Pure components and mixtures. *International Journal of Coal Geology*, 55(2-4), 205-224. [https://doi.org/10.1016/S0166-5162\(03\)00113-7](https://doi.org/10.1016/S0166-5162(03)00113-7)

Cui, X., Bustin, R. M., & Dipple, G. (2004). Differential transport of CO₂ and CH₄ in coalbed aquifers: Implications for coalbed gas distribution and composition. *AAPG bulletin*, 88(8), 1149-1161.

Dávila Serrano, M., O. Jiménez, et. al. (2010). "A preliminary study of regional geologic carbon sequestration in Mexico." *International Journal of Physical Science* 5(5): 408-414.

De la Rosa Rodríguez G., Enciso Cárdenas J.J., Alves Rodrigues C.F., Nuñez Useche F., Martínez Hernández D., Bueno Yamamoto Y.Y., Camacho Ortégón L.F., Bueno Tokunaga A., Lemos de Sousa M.J. (2023). Almacenamiento Geológico de CO₂: Una Oportunidad para la diversificación en el uso del carbón en la Subcuenca de Sabinas. *GEOMIMET* 363, ISSN 0185-1314 p.12-20

De Silva, D., Jaramillo, M. I., & Husein, M. (2009). Diffusion of CO₂ in coal and its role in CO₂ sequestration. *Energy Procedia*, 1(1), 3515-3522. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.464>

Enciso-Cárdenas, J. J., Rodrigues, C., Martínez, L., Camacho-Ortegón, L. F., Lemos de Sousa, M. J., la O-Burrola, D., & Dinis, M. A. P. (2015), Estudio de las propiedades de adsorción/desorción de gas en el carbón de la Cuenca de Sabinas en México: Study of gas adsorption/desorption properties in coals of Sabinas Basin on Mexico. *Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica*, 3(15), 1-12.

Gensterblum, Y., van Hemert, P., Bakkum, E., Busch, A., Krooss, B. M., & Littke, R. (2009). European inter-laboratory comparison of high pressure CO₂ sorption isotherms II: Natural coals. *International Journal of Coal Geology*, 79(1-2), 1-15. <https://doi.org/10.1016/j.coal.2009.04.001>

Gray I. (1987) Reservoir engineering in coal seams. Part I. The physical process of gas storage and movement in coal seams. *SPE Reservoir Engng*;28–34.

Ibrahim, A. F., & Nasr-El-Din, H. A. (2018), CO₂ Injection in Coal Formations for Enhanced Coalbed Methane and CO₂ Sequestration. *Natural Gas Processing from Midstream to Downstream*, 89-111. <https://doi.org/10.1002/9781119269618.ch4>.

Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). (2005). *IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage*. Cambridge University Press. Recuperado de https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/03/srccs_wholereport-1.pdf

Referencias

- Maldonado Pérez, M. (2015). Variación del campo de presiones por almacenamiento geológico de CO₂. Universidad de Salamanca. Recuperado de https://gredos.usal.es/bitstream/10366/122209/1/TFM_MaldonadoPerezM_Variaciondelcampo.pdf
- Marchese, J., Horas, J. A., & Rivarola, J. B. P. (1982). Difusión superficial de gases en medios porosos. *Revista Latinoamericana de Ingeniería Química y Química Aplicada*, 12(1), 23-45. Recuperado de <https://biblat.unam.mx/es/revista/revista-latinoamericana-de-ingenieria-quimica-y-quimica-aplicada/articulo/difusion-superficial-de-gases-en-medios-porosos>
- Mavor, M. J., Owen, L. B., & Pratt, T. J. (1990, September). Measurement and evaluation of coal sorption isotherm data. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition?* (pp. SPE-20728). SPE.
- Metz, B., Davidson, O., De Coninck, H. C., Loos, M., & Meyer, L. (2005), IPCC special report on carbon dioxide capture and storage. Cambridge: Cambridge University Press.
- Natural Resources Canada, Mexican Ministry of Energy, & U.S. Department of Energy. (2012). North American Carbon Storage Atlas (NACSA) (1ª ed.). <http://co2.energia.gob.mx/res/ATLAS%20FINAL.pdf>
- Naveen P., Asif M., Ojha K., Panigrahi D.C., Vuthaluru H.B., (2017). Sorption Kinetics of CH₄ and CO₂ Diffusion in Coal: Theoretical and Experimental Study. *Energy & Fuels* 31, 6825-6837. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7b00721
- Pan, L., Zha, H., Li, Y., & Liu, W. (2013). Geomechanical effects of CO₂ sequestration in coal seams: Implications for storage capacity and safety. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 15, 106-113. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2013.01.008>
- Ramos, A. D. S., de Araujo, G. E., Siviero, L., Ketzer, J. M., Heemann, R., Lourega, R. V., & Rodrigues, L. F. (2018), Comparative assessment between different sample preparation methodologies for PTGA CO₂ adsorption assays—Pellet, powder, and fragment samples. *Adsorption Science & Technology*, 36(7-8), 1441-1455. doi:10.1177/0263617418779459.
- Rodrigues C. F., (2002). The application of isotherm studies to evaluate the Coalbed Methane potential of the Waterberg Basine, South Africa. PhD Thesis, Universidade do Porto, Faculdade de Ciências, Departamento de Geologia.
- Rodrigues, C.F., Lemos de Sousa, M.J. (2002), The measurement of coal porosity with different gases. *International Journal of Coal Geology* 48, 245–251.
- Rutqvist, J. (2012). The geomechanics of CO₂ storage in deep sedimentary formations. *Geotechnical and Geological Engineering*, 30(4), 1059-1075. <https://doi.org/10.1007/s11041-012-9494-1>
- Tunik, M. (2024). El rol de la petrografía en la mitigación del cambio climático a través del almacenamiento de dióxido de carbono CONICET. Recuperado de <https://patagoniaconfluencia.conicet.gov.ar/el-rol-de-la-petrografia-en-la-mitigacion-del-cambio-climatico-a-traves-del-almacenamiento-de-dioxido-de-carbono/>