

Projet SHPCO2

Appel à projet ANR-CIS 2007

Anthony MICHEL
IFP énergies nouvelles

SHPCO2

- Simulation Haute Performance du stockage géologique de CO2
- Appel d'offre - ANR Calcul Intensif et Simulation 2007
- Début du projet : 2008, Fin du projet : 2011 (extension 1 an)

- Coût total projet : 1.6 M€
- Financement ANR : 496 k€

- Label : Pôle de Compétitivité SYSTEMATIC Paris-Region

Plan de la présentation

- Introduction
- Objectifs de simulation et cas d'étude
- Méthodes numériques et développements logiciels
- Calcul intensif et étude de performance
- Exercice de transport réactif SHPCO₂
- Perspectives

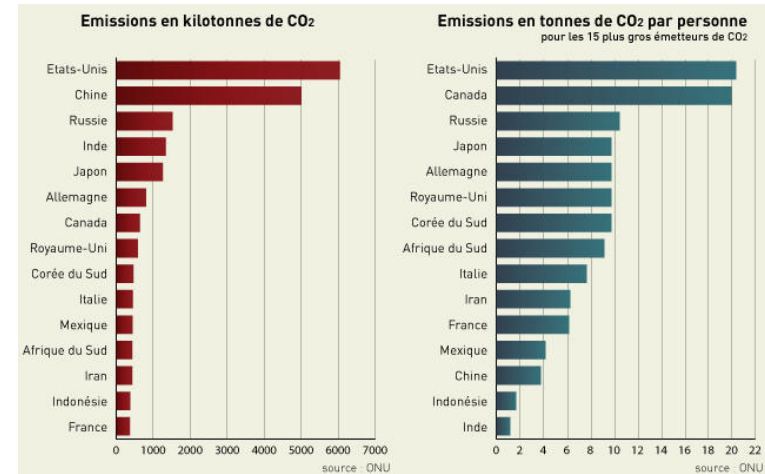


Introduction

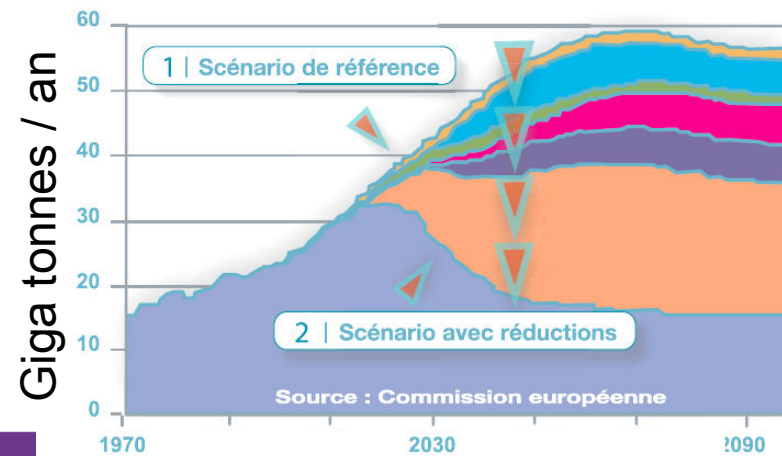


Introduction

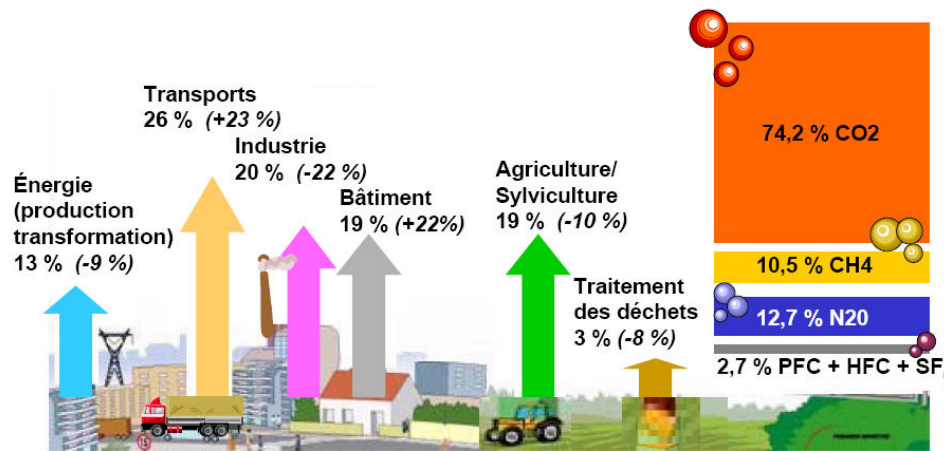
Enjeux de la réduction des émissions de CO2



Émissions de CO₂ (en milliards de tonnes de CO₂)



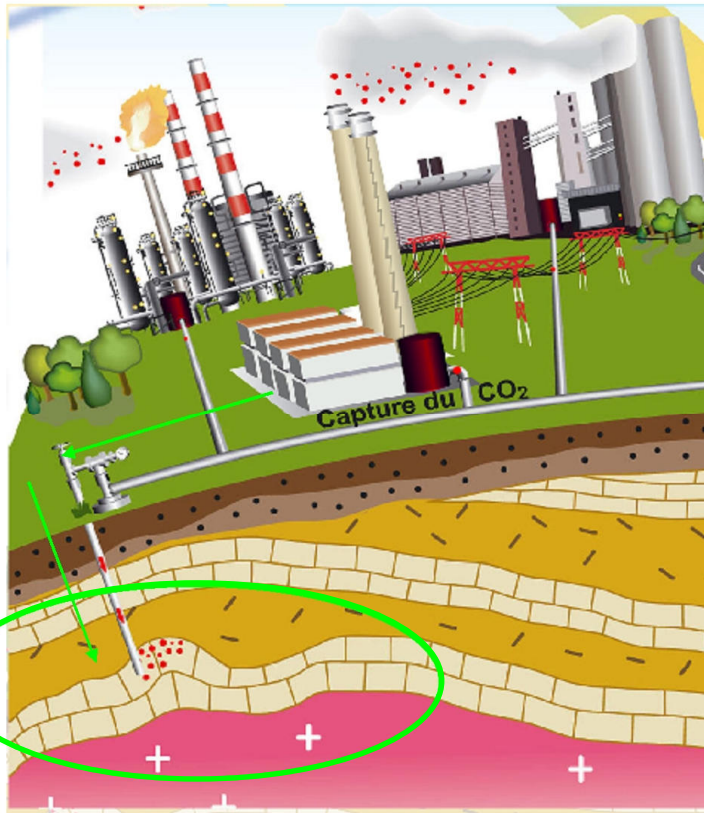
- Puits naturels
- Solaire, Eolien, Nucléaire
- Captage et stockage
- Biocarburants
- Carburant de substitution
- Efficacité Energétique



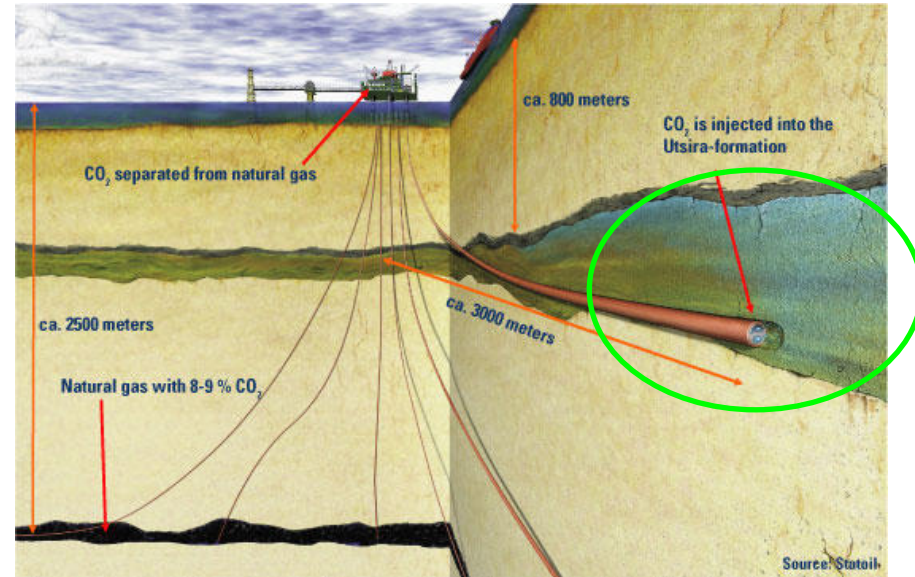
Émissions de GES² en France (y compris DOM/COM) en 2004, par secteur (hors UTCF³) (entre parenthèses, l'évolution depuis 1990 ; source : CITEPA/Inventaire SECTEN/Format PNLC, février 2006)

Introduction

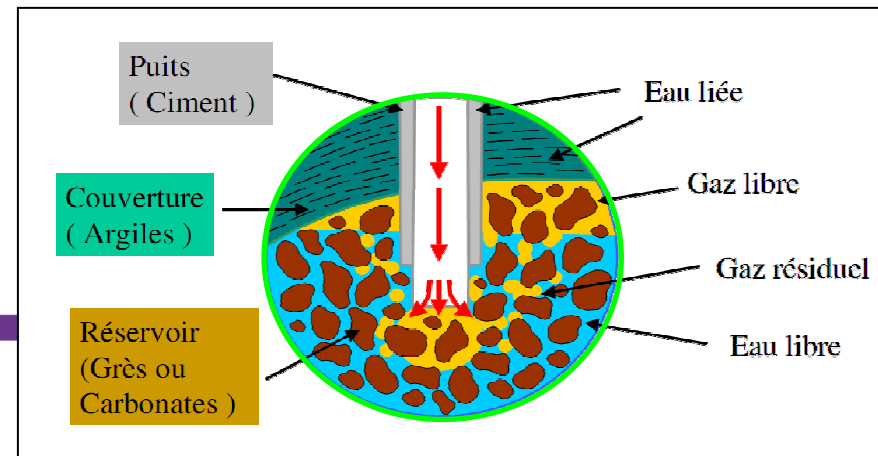
Principe du stockage géologique de CO2



Source BRGM / IFP

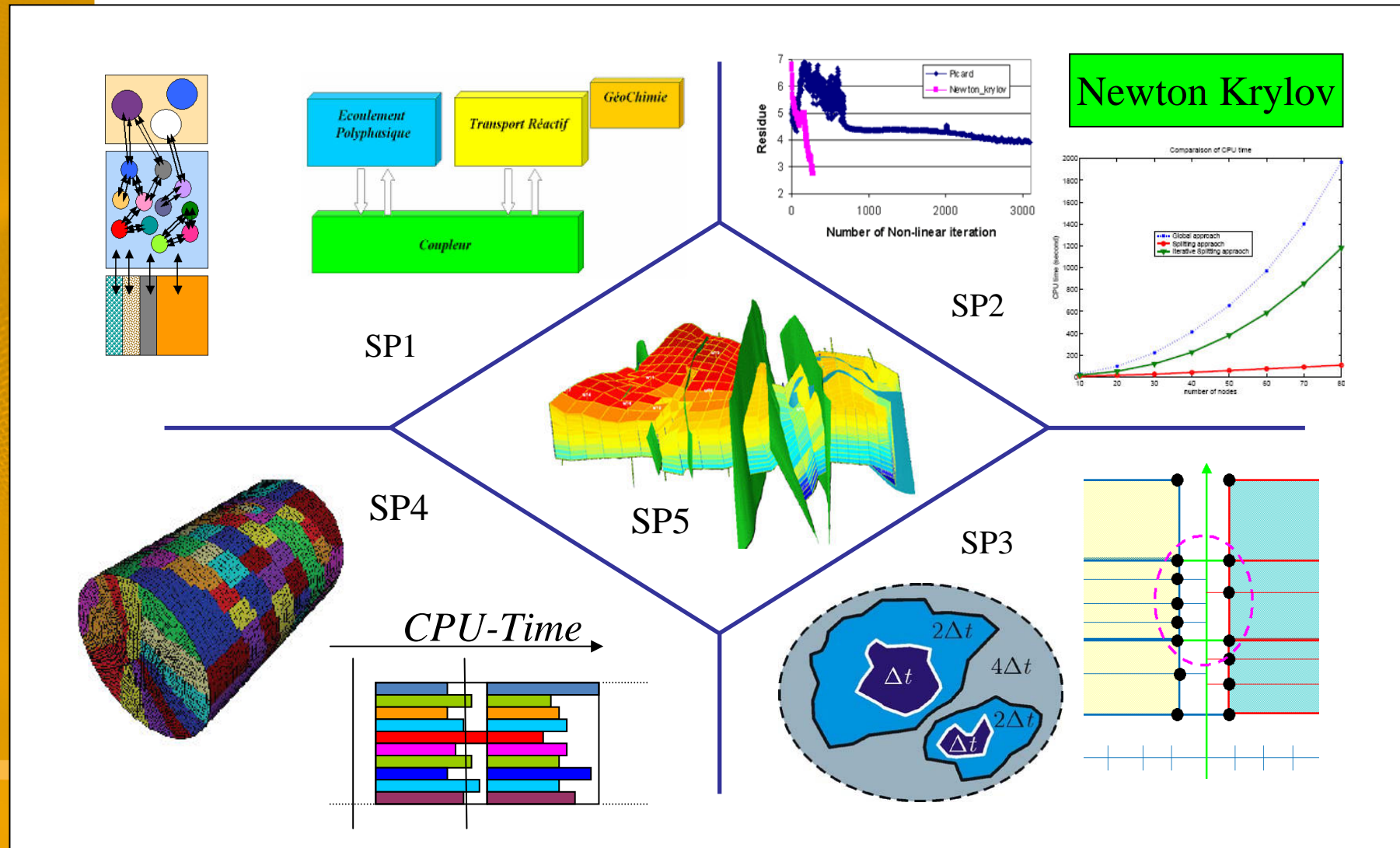


Source Statoil



Introduction

Structure du Projet ANR-SHPCO2



Introduction

Equipes et partenaires



- Anthony MICHEL
- Jean-Marc GRATIEN
- Ani ANCIAUX
- Laurent TRENTY
- Roland MASSON
- Sylvain DESROZIERES
- Pascal HAVE
- Youssef MESRI
- Florian HAEBERLEIN (Thèse)
- Houari KHENOUS (CDD)
- Safwat HAMAD (Post Doc)
- Glenn Favennec (Stage)

Université
de Genève

- Martin GANDER



- Laurence HALPERN
- Loïc GOUARIN
- Jeremy SWETZEL
- Felipa CAETANO (Post Doc)




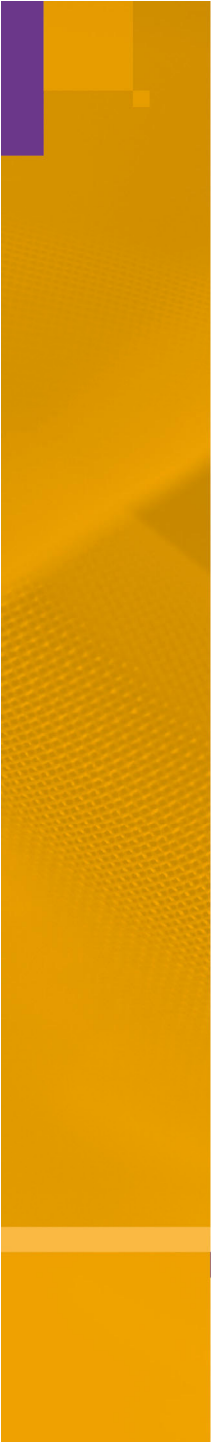
- Daniel GARCIA
- Bernard GUY
- Jacques MOUTTE
- Guillaume BATTIAA (Post Doc)



- Michel KERN
- Jérôme JAFFRE
- Jean ROBERTS
- Jean Charles GILBERT
- Abdelaziz TAAKILI (Post Doc)
- Blandine GUESLIN (Post Doc)
- Franco (Stage)



- Pascal AUDIGANE
- Frédéric WERTZ
- Christophe KERVEVAN
- Sunséaré GABALDA (Post Doc)



Objectifs de simulation et cas d'étude

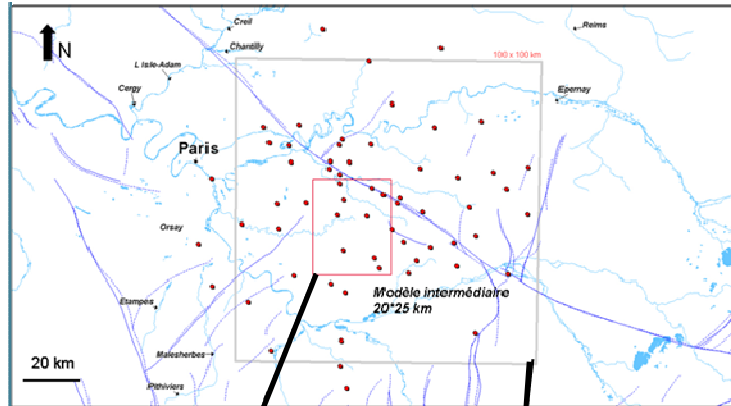
Objectifs de simulation et cas d'étude

Synthèse des cas étudiés

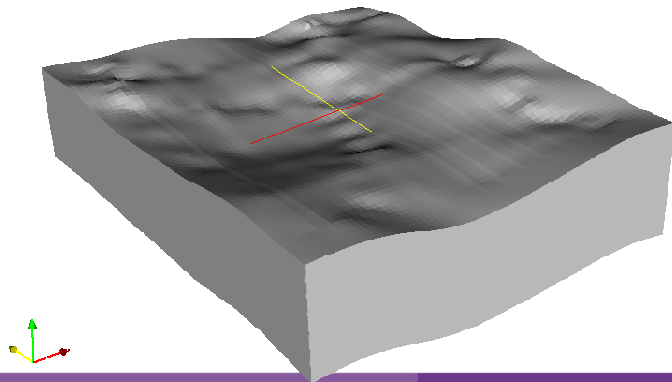
- Capacité de stockage
 - Stockage géologique grande échelle Bassin Parisien
 - Modèle Local : 20 km x 20 km
 - Modèle Régional 100 km x 100 km
- Modification des propriétés réservoir
 - Balayage aquifère
- Intégrité de la couverture
 - Transport et réactions dans la couverture

Objectifs de simulation et cas d'étude

Stockage géologique Bassin Parisien

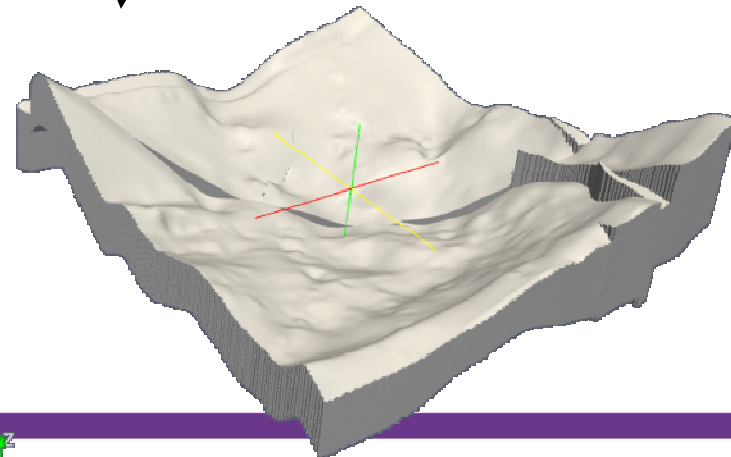


Modèle1 Local
20 km x 20 km



425 000 mailles sans faille
4 Millions de mailles sans faille

Modèle3 Régional
100 km x 100 km

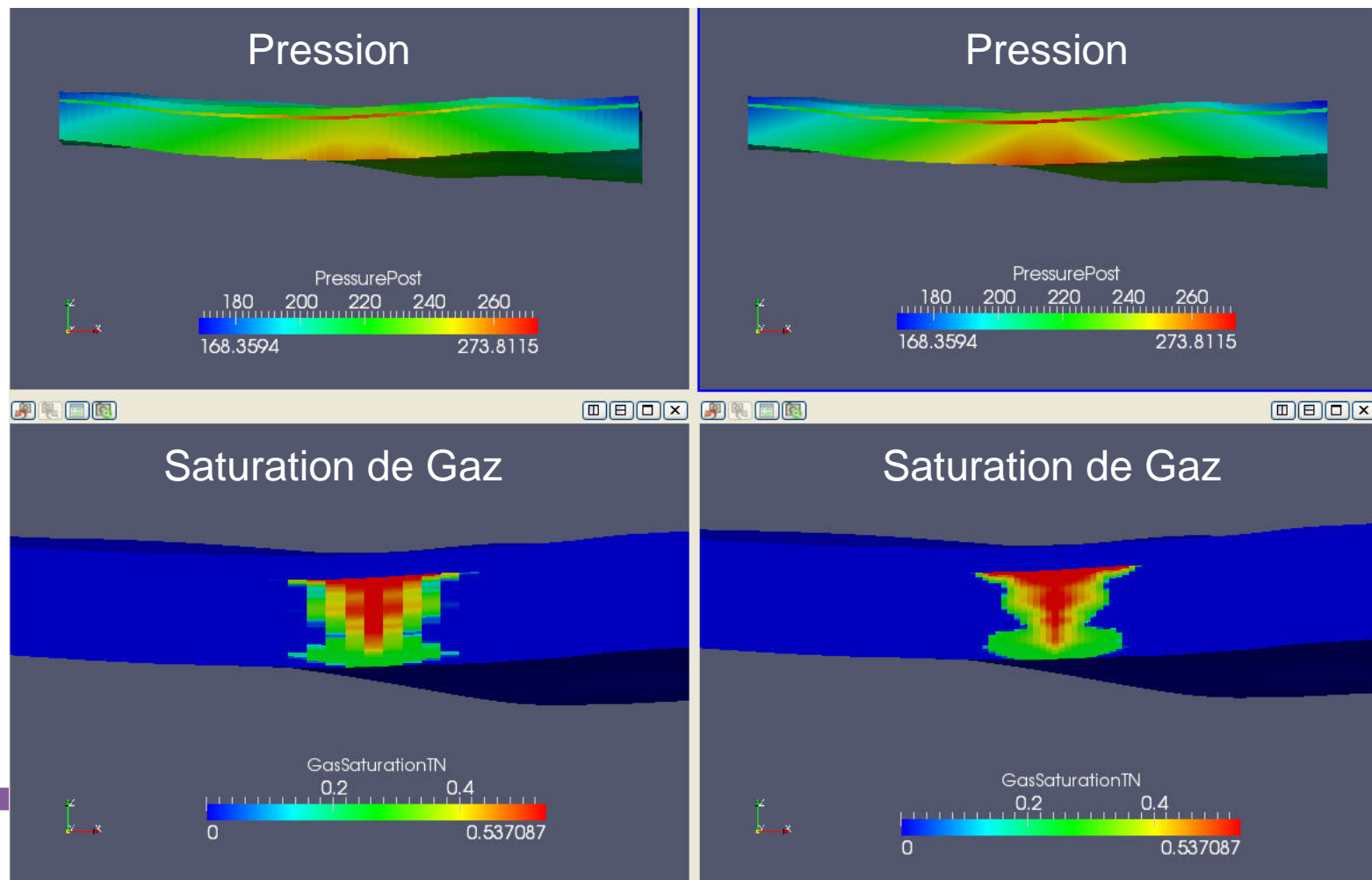


8 Millions de mailles avec failles

Objectifs de simulation et cas d'étude

Modèle Local avec Raffinement

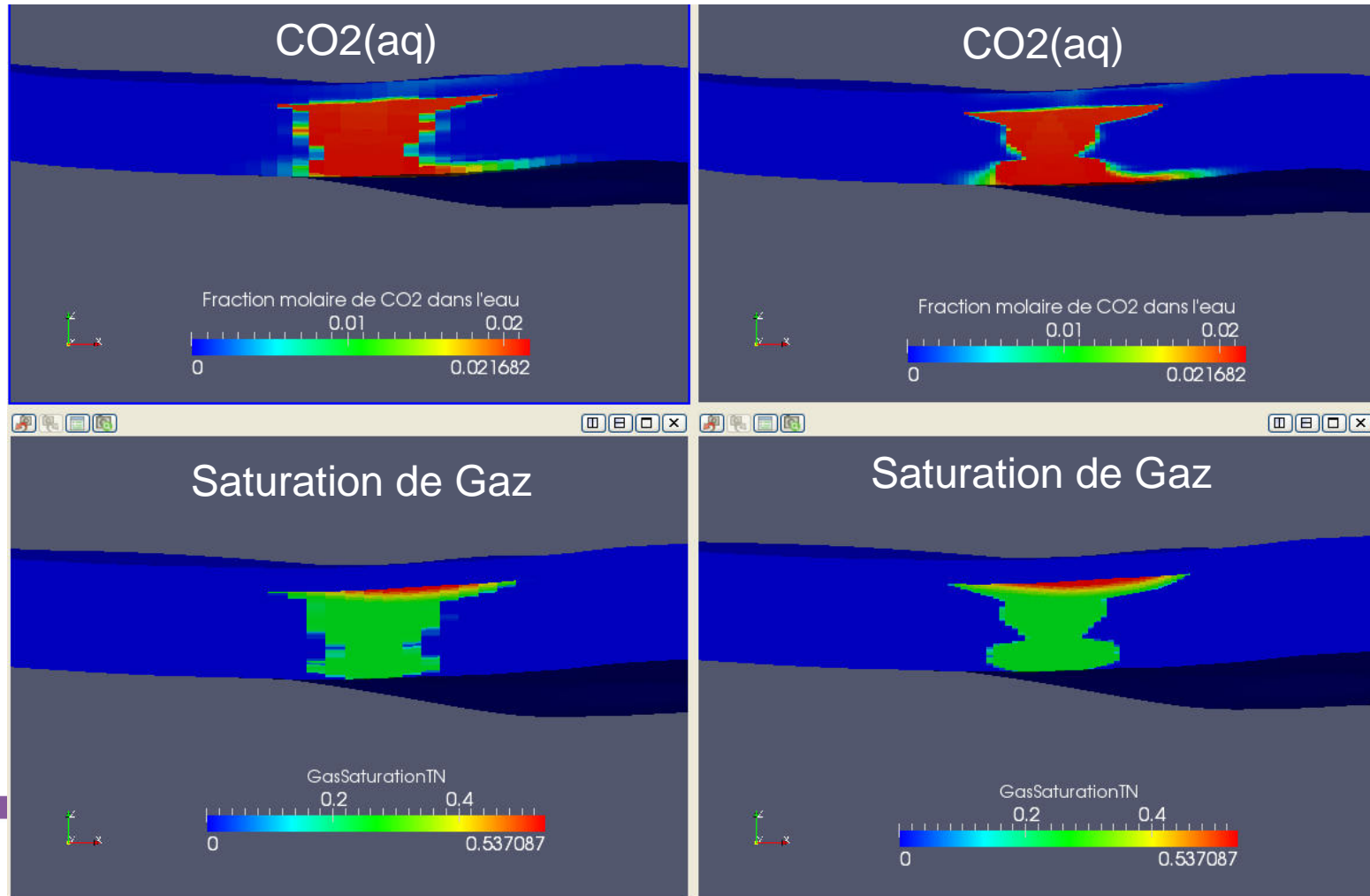
Résultat en fin de la période d'injection à $t = 3$ ans



Objectifs de simulation et cas d'étude

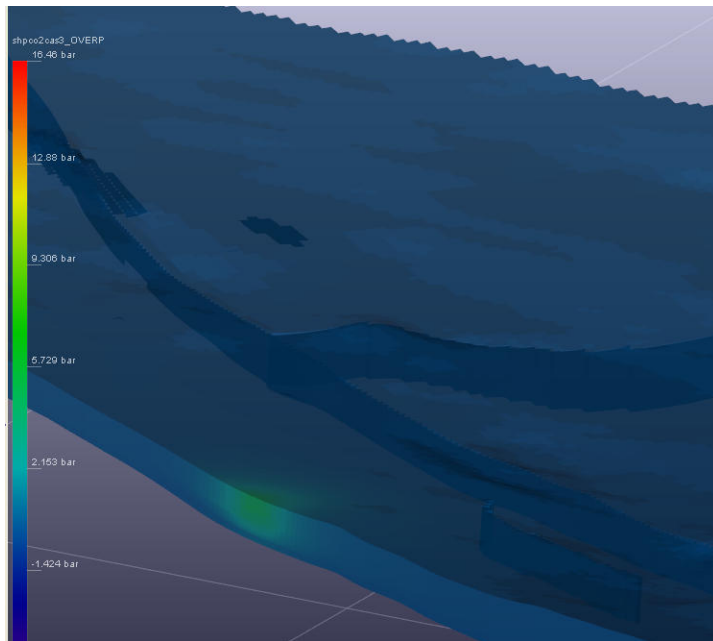
Modèle Local avec Raffinement

Résultats en fin de période de stockage à $t = 1000$ ans

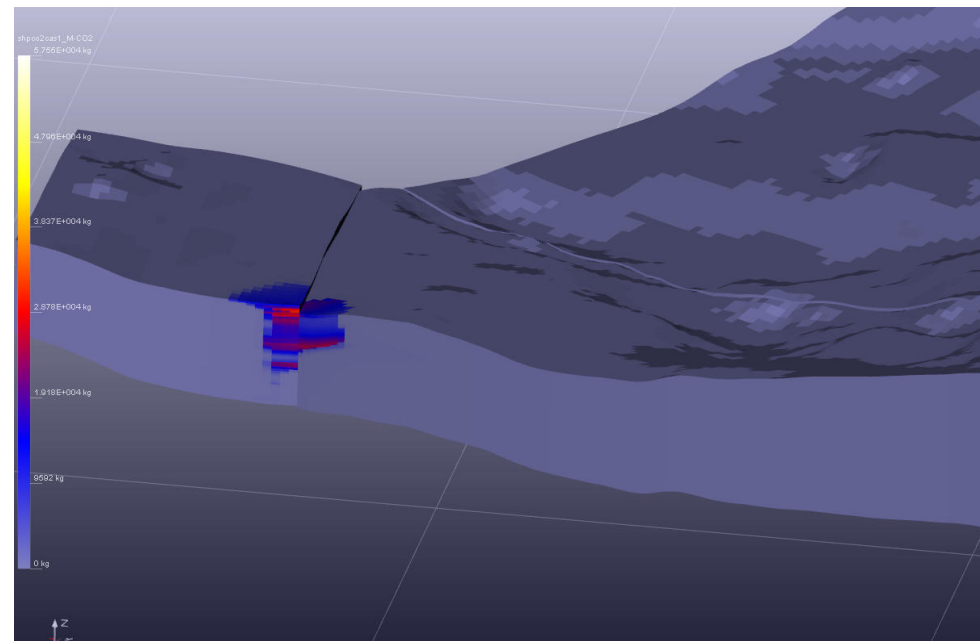


Objectifs de simulation et cas d'étude

Modèle Régional



Surpression
à la fin de la période d'injection



Masse de CO₂
à la date t = 1000 ans

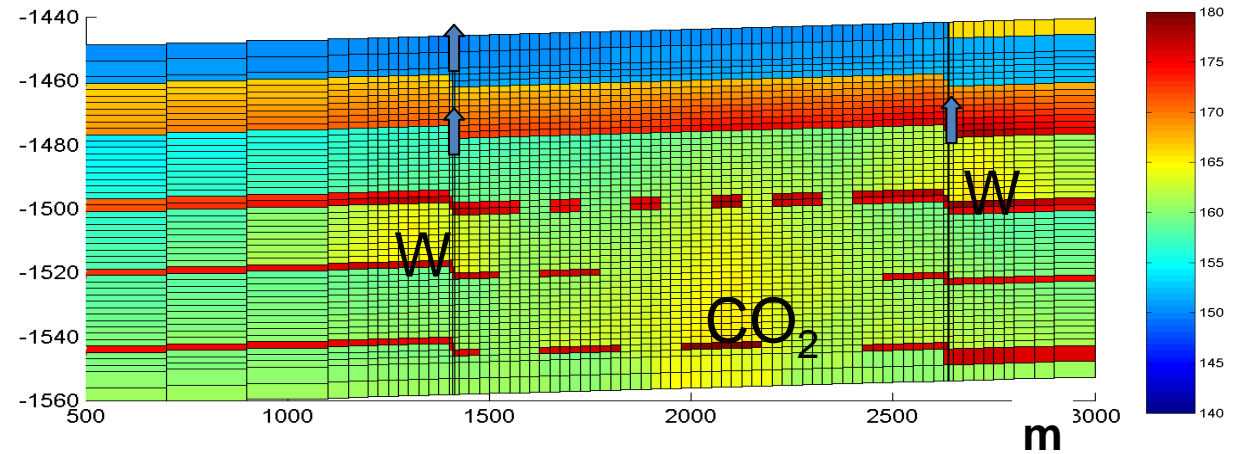
Objectifs de simulation et cas d'étude

Balayage Aquifère

Etape 1

Injection de CO₂

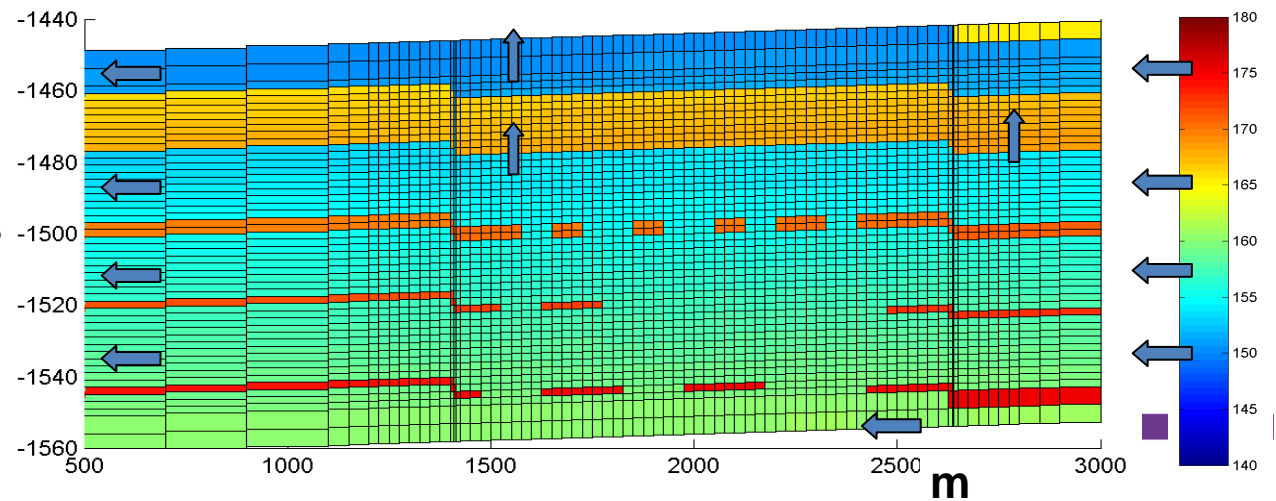
t = 0 → 5 ans



Etape 2

Balayage naturel
Aquifère régional

t = 5 ans → 3000 ans

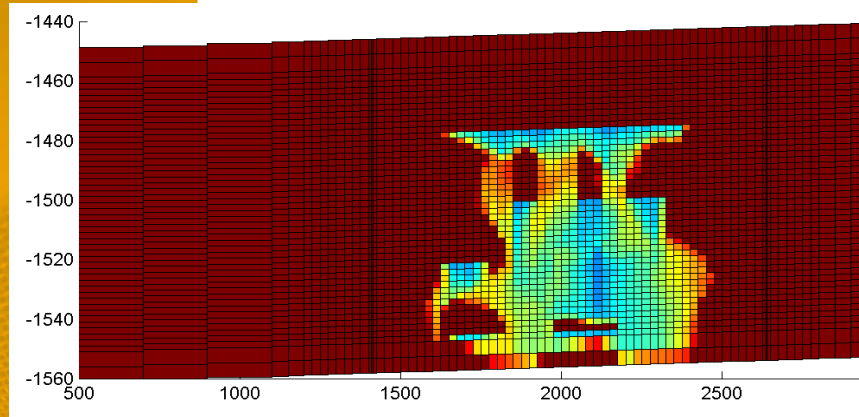


Objectifs de simulation et cas d'étude

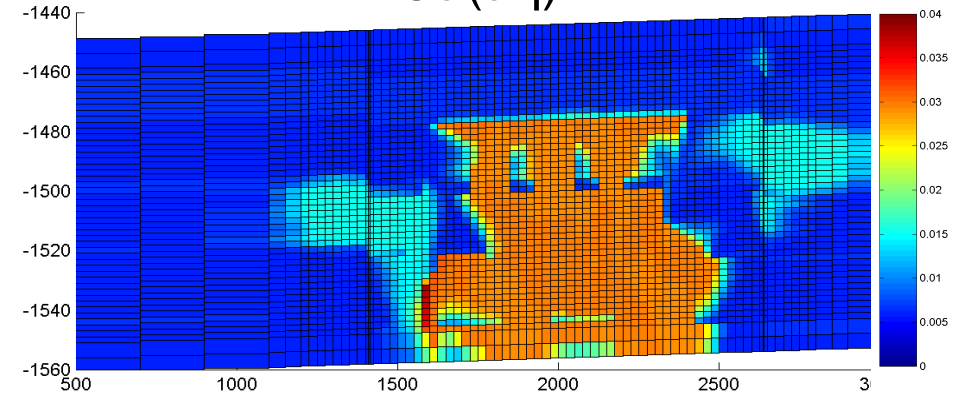
Balayage Aquifère

t = 5 ans

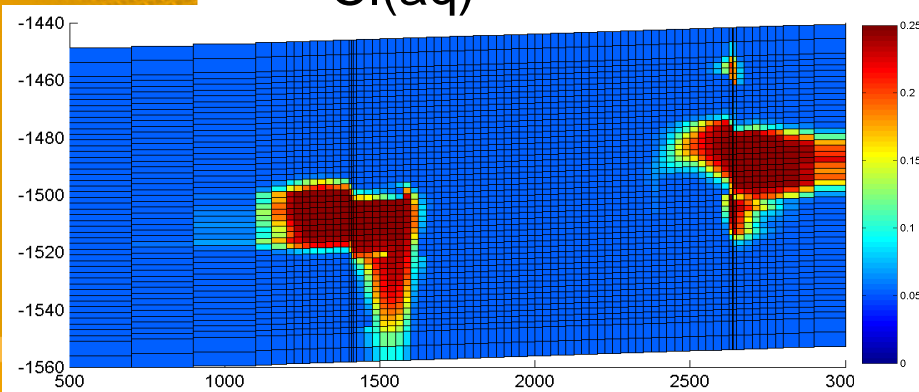
$S_w = 1 - S_g$



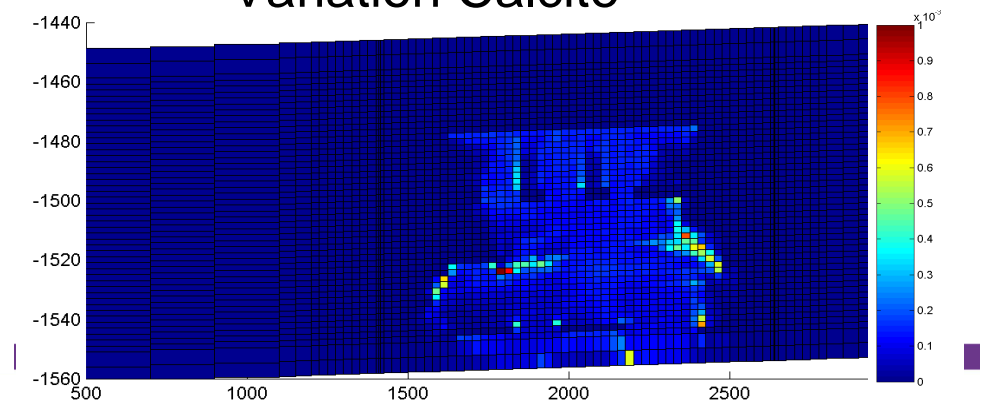
Ca(aq)



Cl(aq)



Variation Calcite

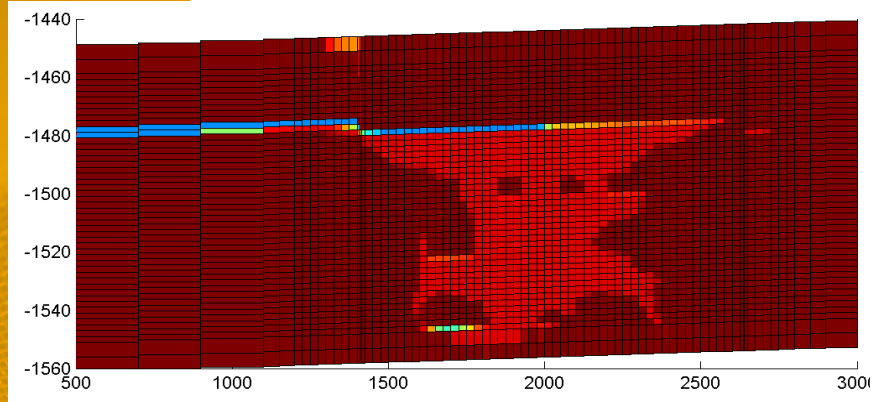


Objectifs de simulation et cas d'étude

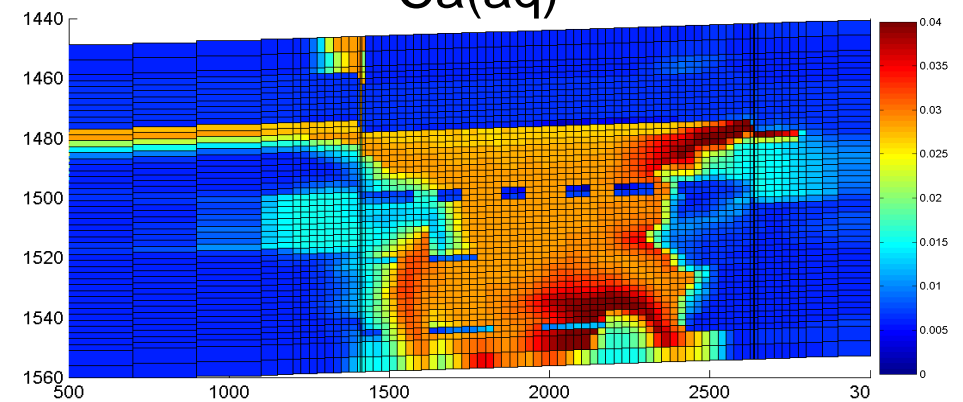
Balayage Aquifère

t = 100 ans

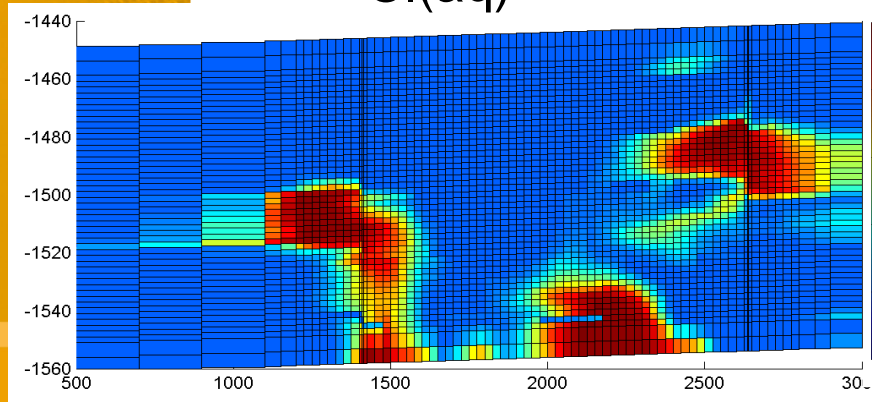
$S_w = 1 - S_g$



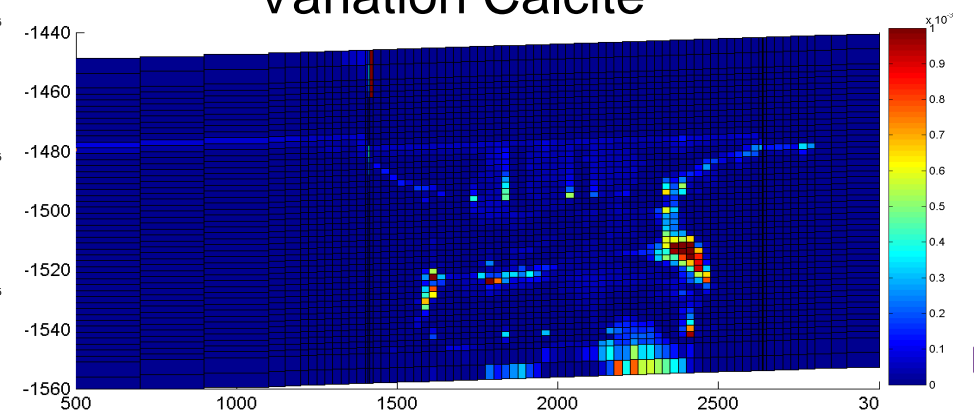
Ca(aq)



Cl(aq)



Variation Calcite

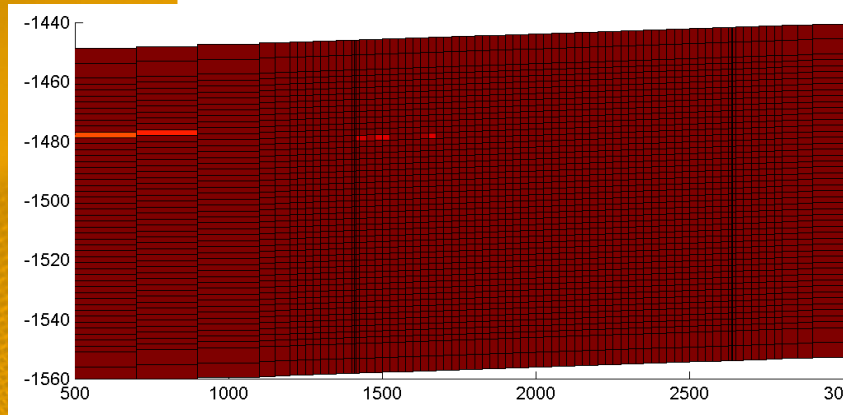


Objectifs de simulation et cas d'étude

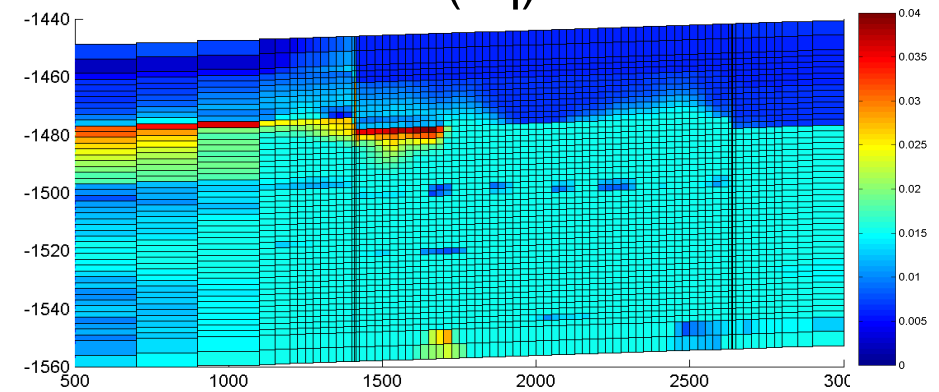
Balayage Aquifère

t = 3000 ans

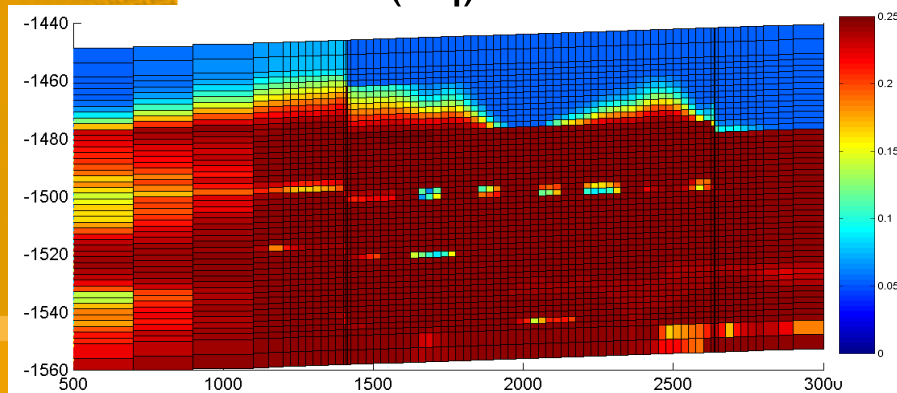
$S_w = 1 - S_g$



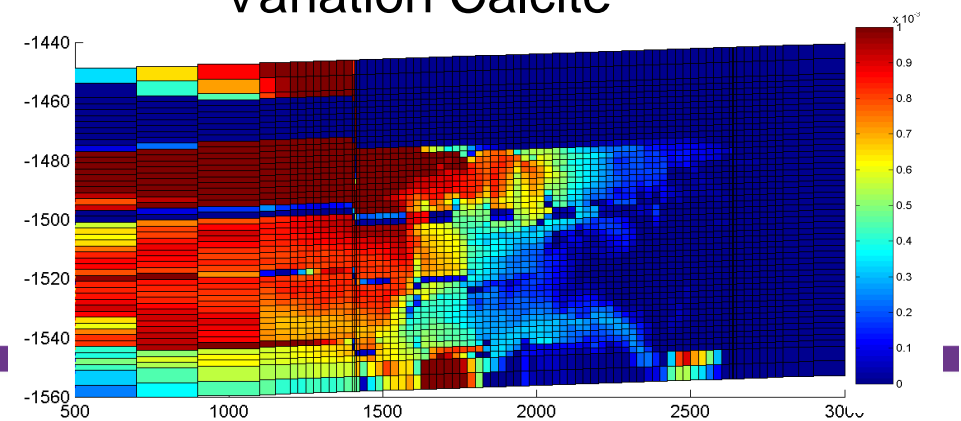
Ca(aq)



Cl(aq)

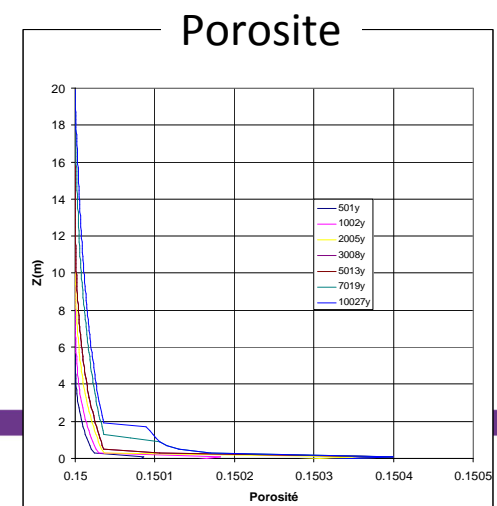
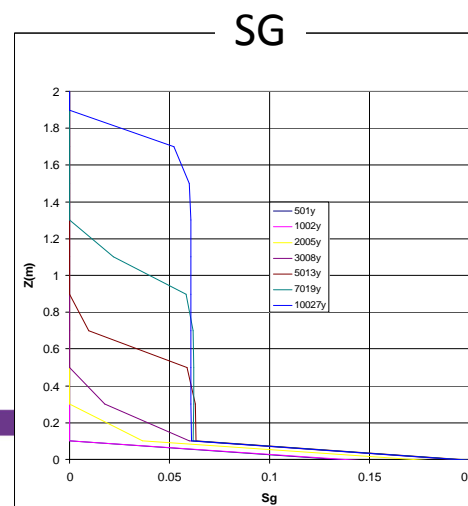
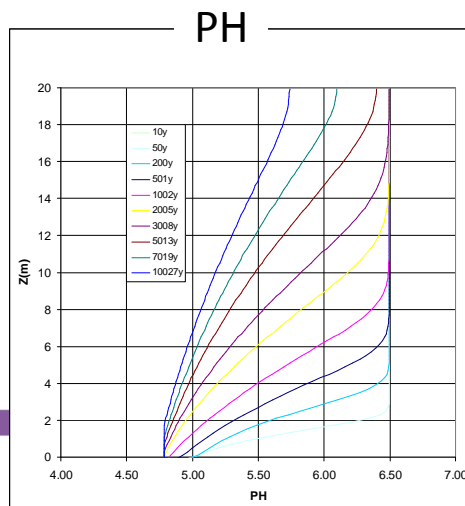
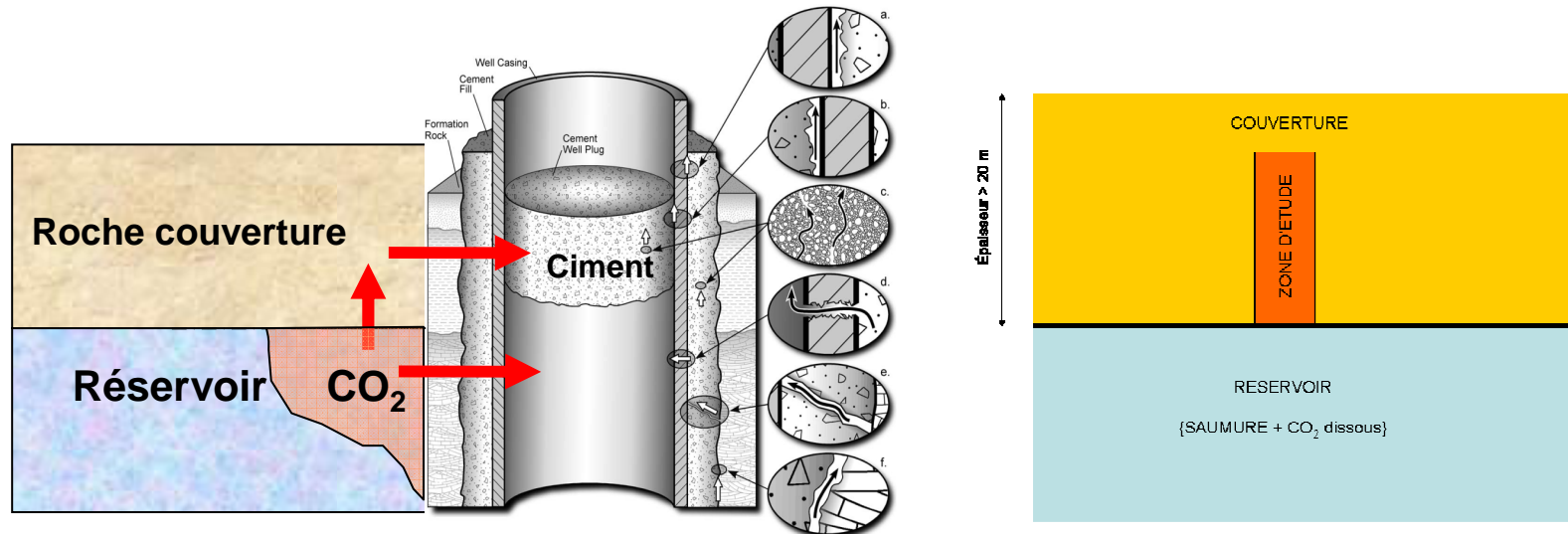


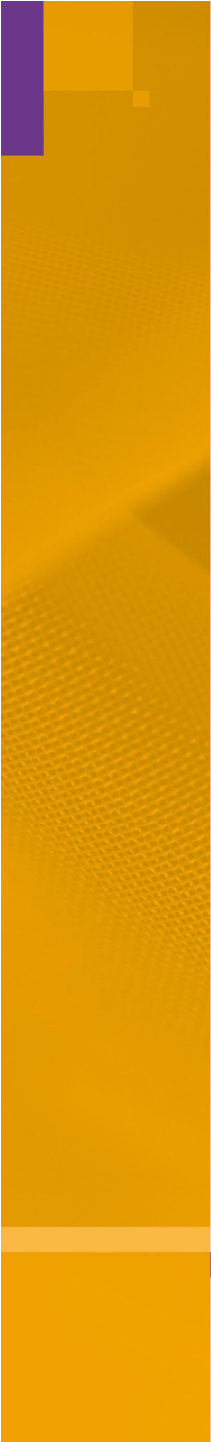
Variation Calcite




Objectifs de simulation et cas d'étude

Diffusion réaction dans la couverture





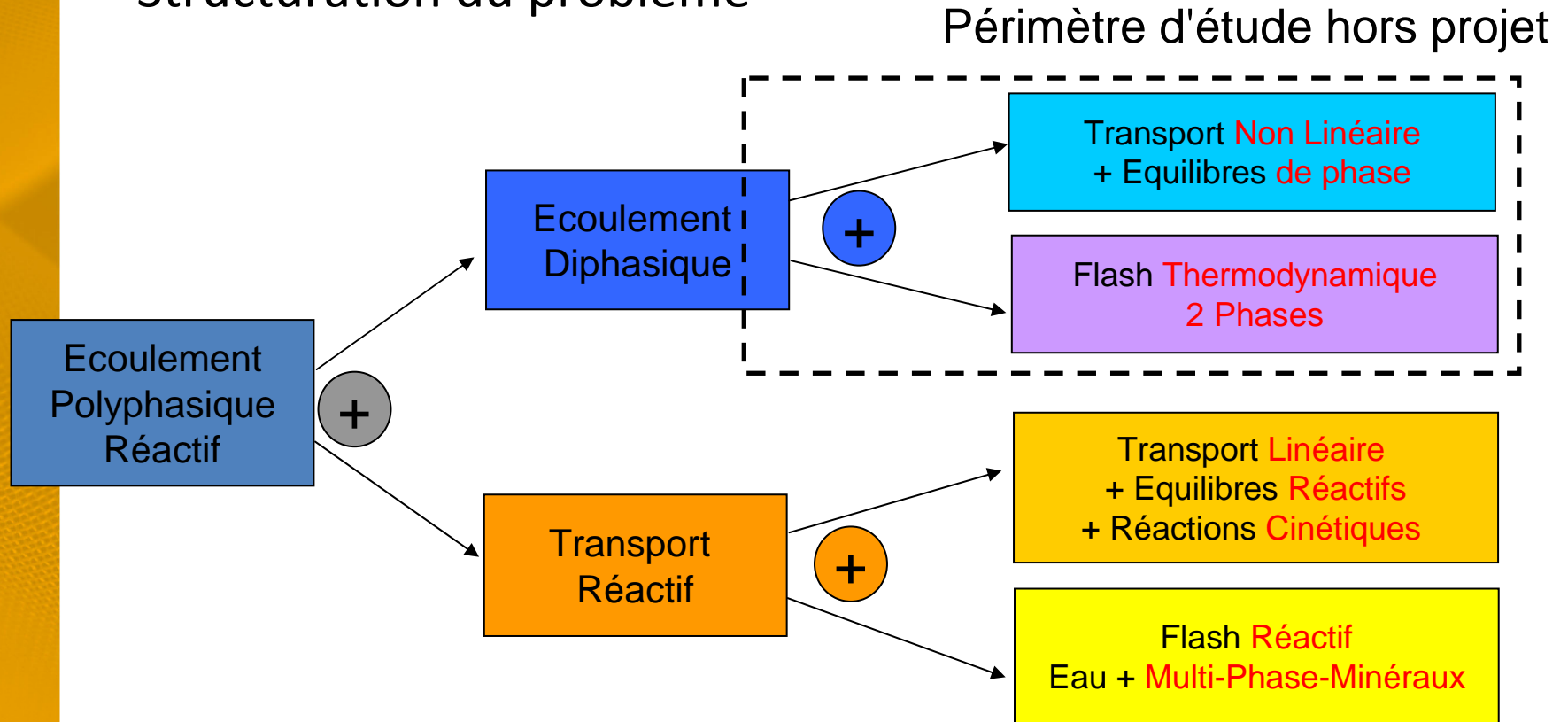
Méthodes numériques et développements logiciels



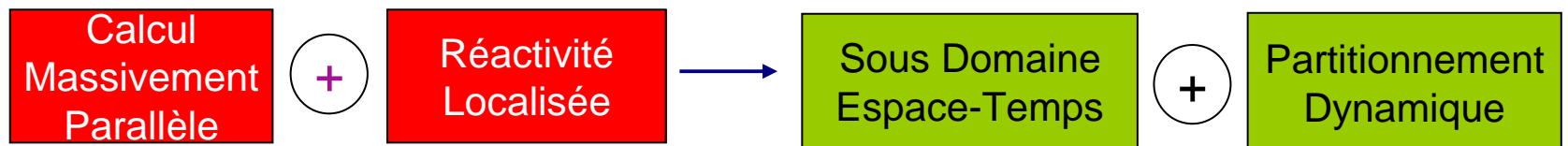
Méthodes numériques et développements logiciels

Organisation des développements

- Structuration du problème



- Contraintes imposées



Méthodes numériques et développements logiciels

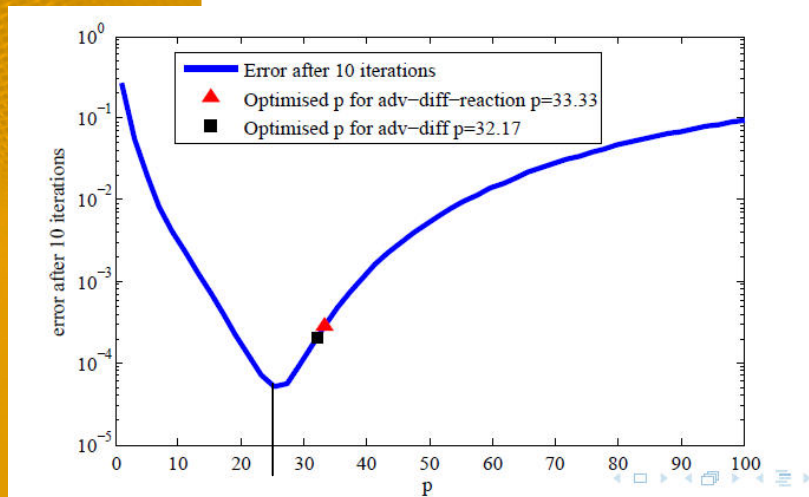
Synthèse des réalisations

- Couplage écoulement diphasique - transport réactif
 - Algorithme de couplage (Codes Coores-Arcane, Coores, ToughReact)
- Formulation numérique du transport réactif
 - Approche globale pour le transport réactif
- Résolution du transport réactif
 - Méthode DD Espace-Temps SWR (Etudes + Code TR Arcane)
 - Newton-Krylov avec Préconditionnement (Etudes + Code TR Life V)
- Résolution des équilibres chimiques
 - Smooth Newton (Code Flash Réactif)
 - DAE vs Gibbs Minimization (Etudes + Logiciel Arxim)

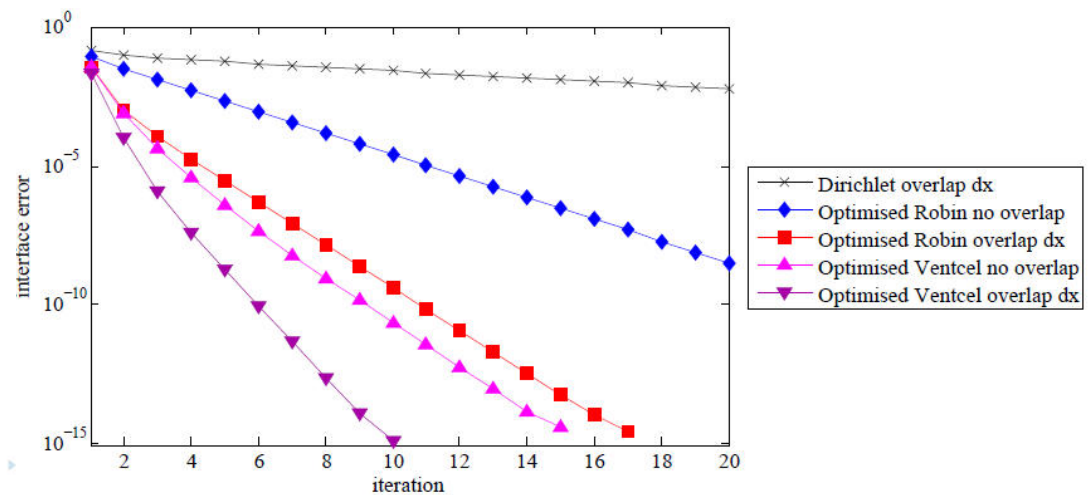
Méthodes numériques et développements logiciels

Décomposition de Domaine Espace Temps

- Résultats numériques pour le problème linéaire
 - Validation du paramètre optimal théorique p^*
 - Efficacité relative de la montée en ordre et du recouvrement.



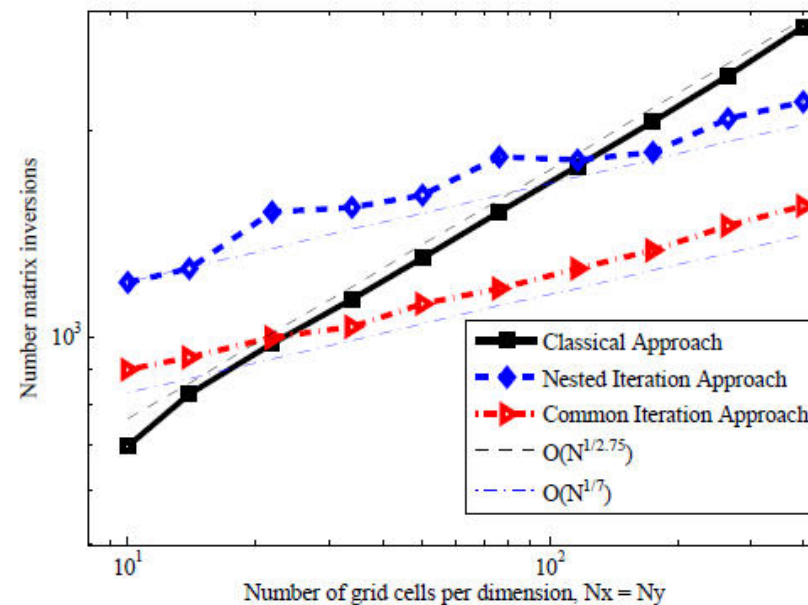
p^* optimal



Méthodes numériques et développements logiciels

Décomposition de Domaine Espace Temps

- Résultats numériques pour le problème non linéaire
 - Comparaison des méthodes Schwarz / Newton / Krylov,
 - Sensibilité à la taille du problème.



Méthodes numériques et développements logiciels

Newton Krylov et Préconditionneurs pour le transport réactif

- Importance du préconditionnement
 - Effet positif des deux préconditionneurs proposés
 - Effet accru avec la taille du maillage
 - Indépendance nombre d'itérations / taille du maillage

	h		$h/2$		$h/4$		$h/8$	
	NI	LI	NI	LI	NI	LI	NI	LI
None	8	42	8	76	10	105	10	177
BGS	8	23	7	24	7	22	8	25
Elimination	5	15	5	15	5	15	5	15

Résultats comparés sur test synthétique 2 espèces

NI = Itérations Solveur Non Linéaire (Newton)

LI = Itérations Solveur Linéaire (GMRES)



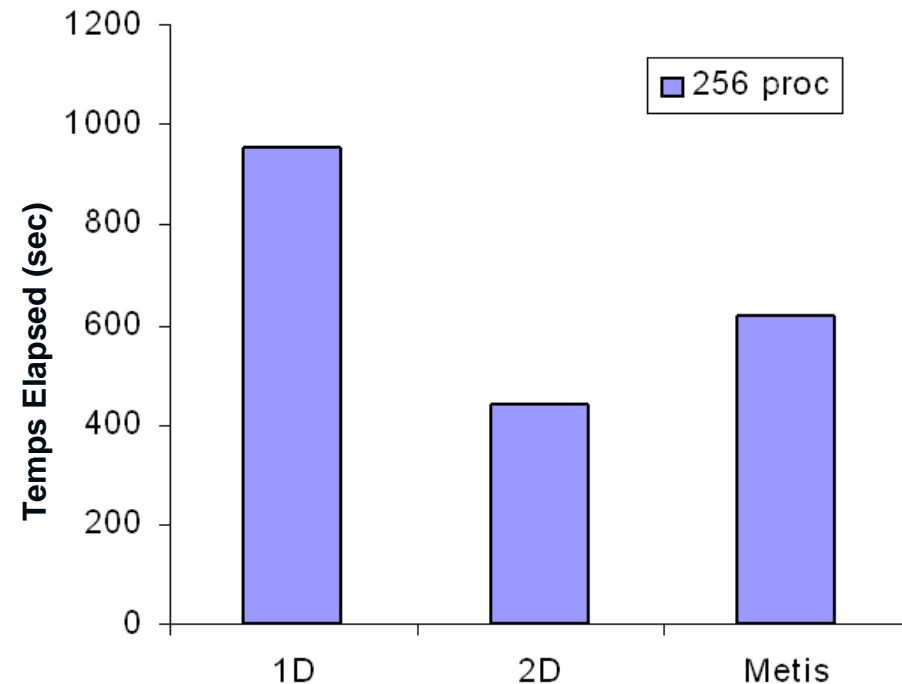
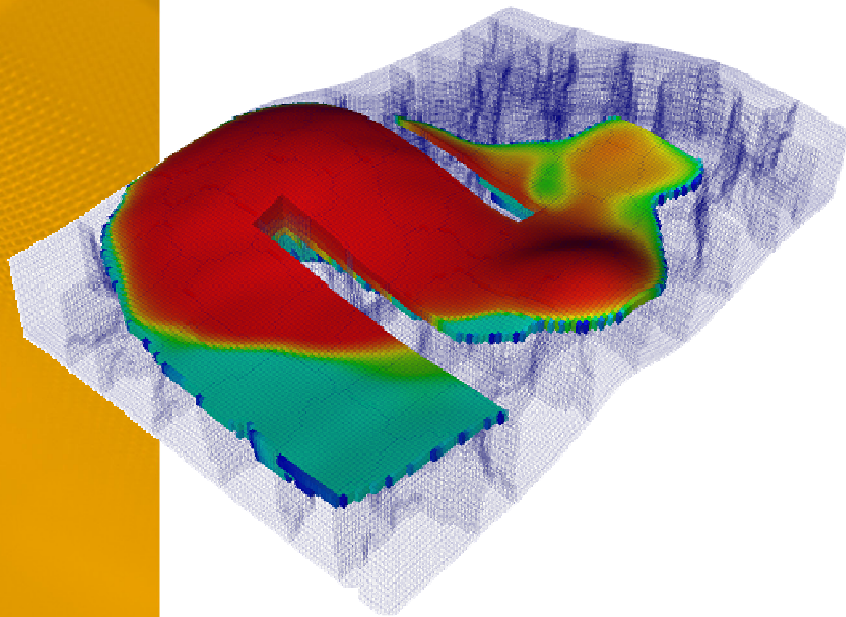
Calcul intensif et performances



Calcul intensif et performances

Cas Test SHPCO2 (Partitionneurs)

- Ecoulement Diphasique W-G
- Pré Conditionneur CPR-AMG

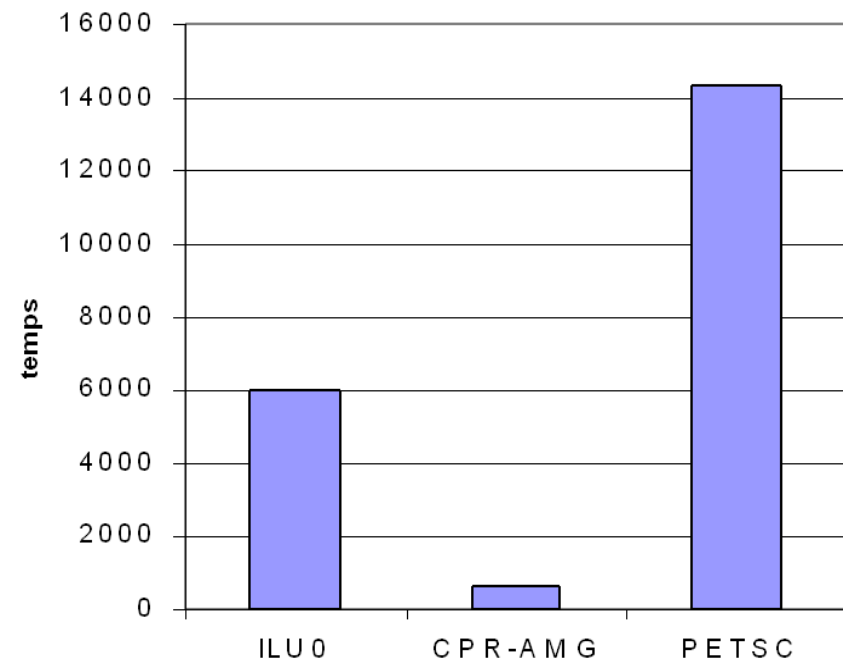
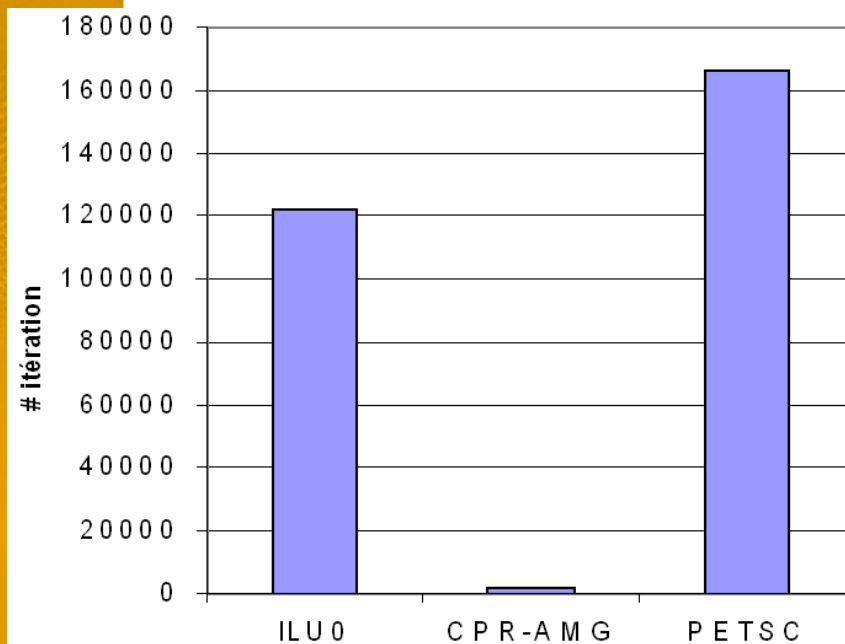


Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

Calcul intensif et performances

Cas Test SHPCO2 (Pré Conditionneurs)

- CPR-AMG très efficace sur ces simulations de grande taille
- Pour ILU0 la version IFPEN par bloc est plus rapide

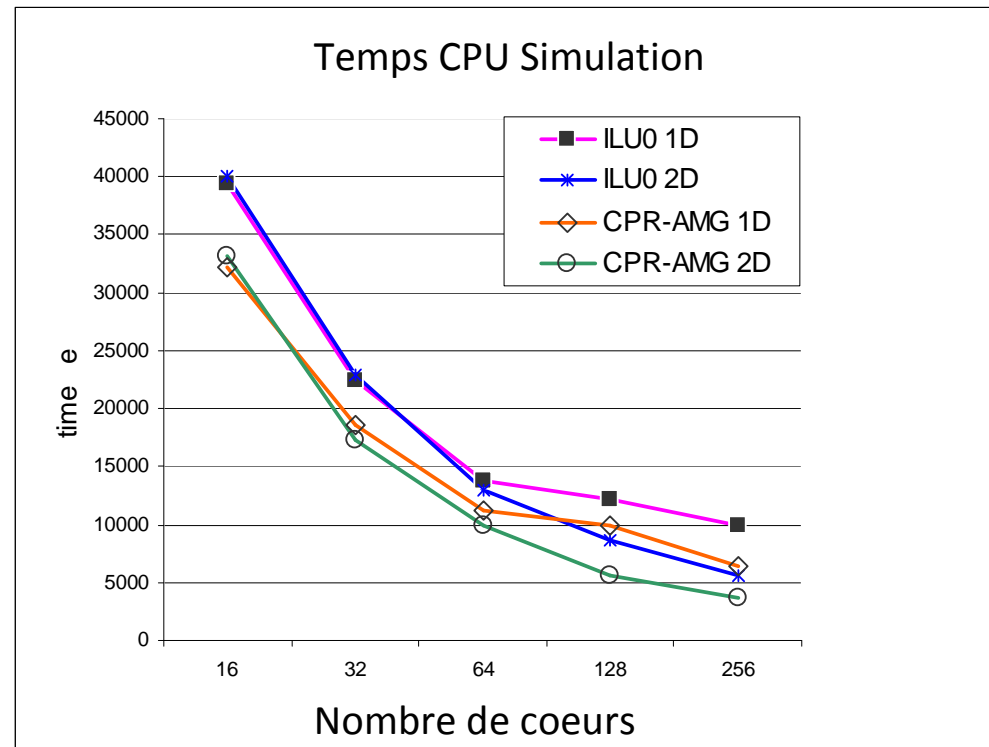
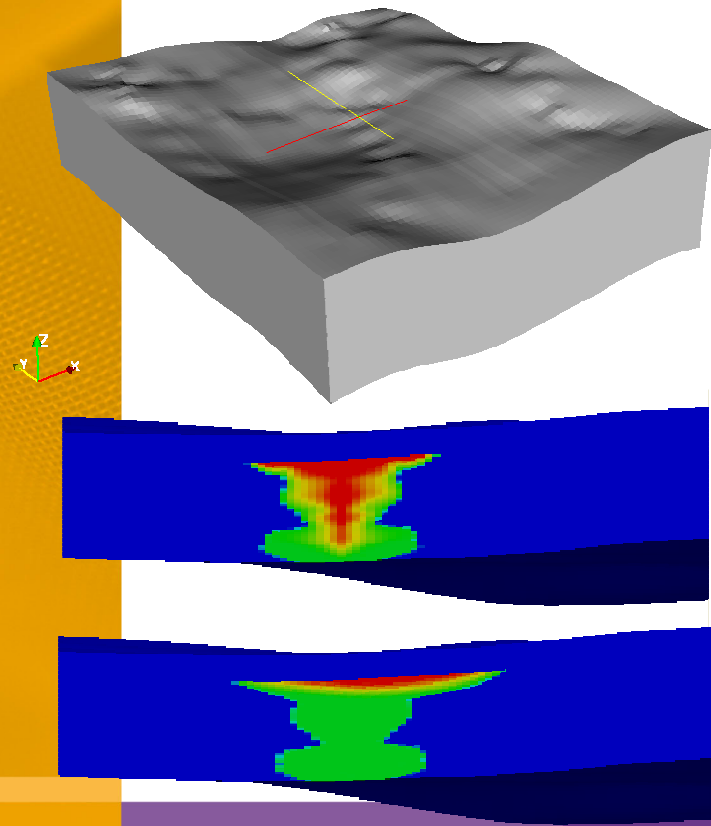


Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

Calcul intensif et performances

Cas Test Bassin Parisien (Effets d'échelle)

- Ecoulement Diphasique W-G

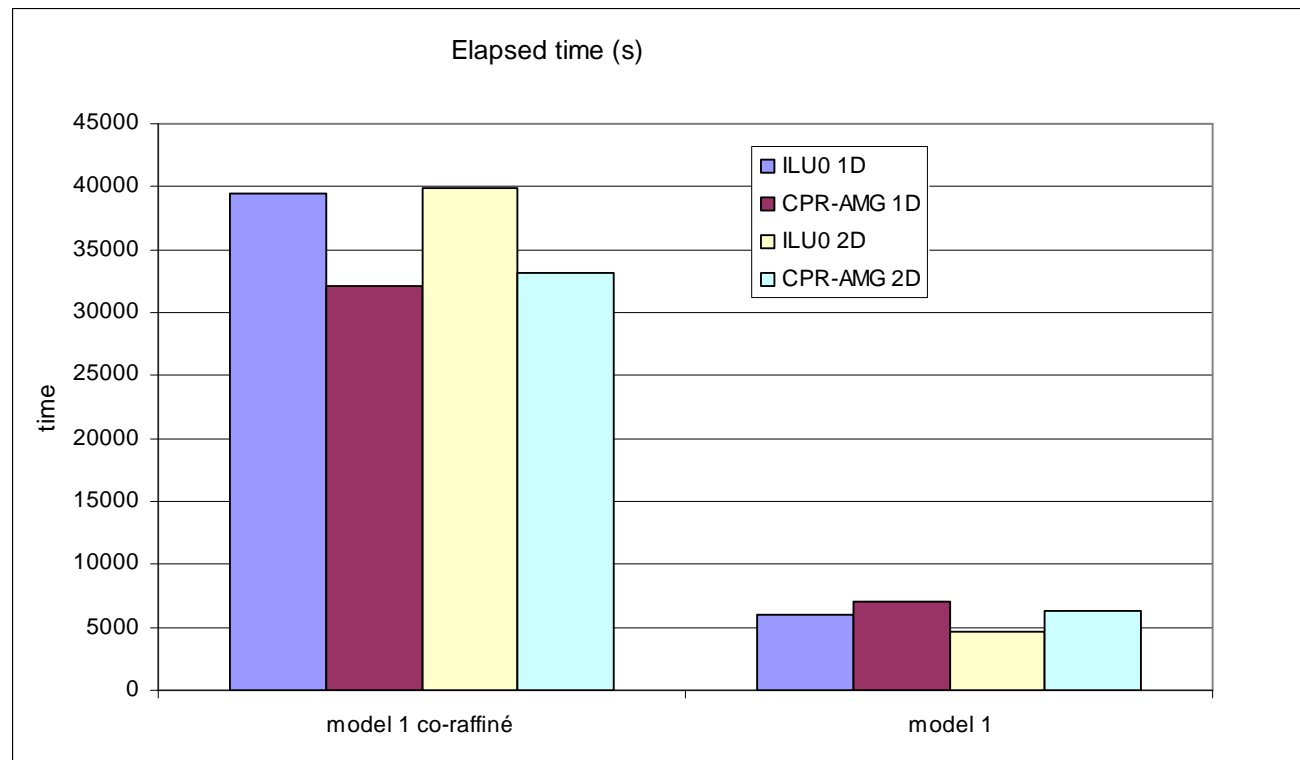


Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

Calcul intensif et performances

Cas Test Bassin Parisien (Pré Conditionneurs)

- Simulation avec 16 coeurs
- Tendence inversée entre cas de petit taille et gros cas



Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

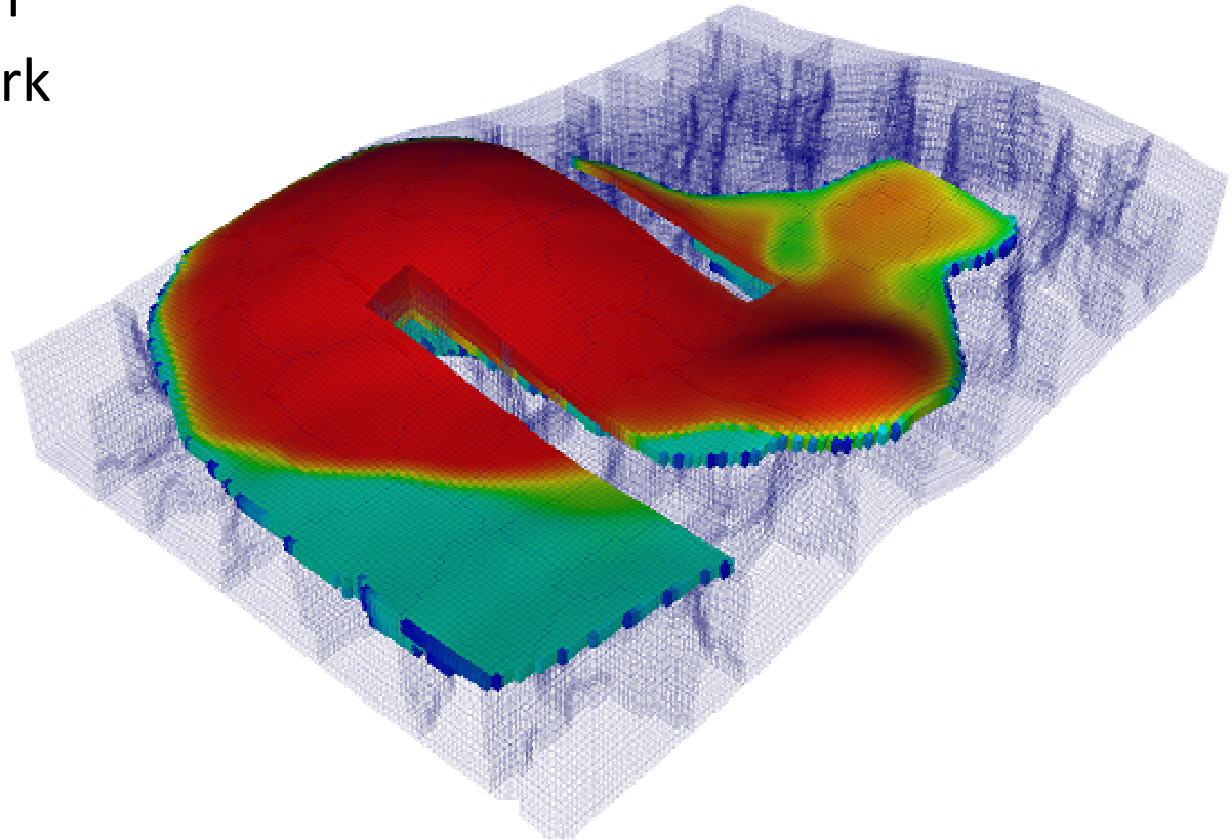


Exercice de transport réactif SHPCO₂

Exercice transport réactif SHPCO2

Introduction

- Exercice commun
 - Validation
 - Benchmark



AGENCE NATIONALE DE LA RECHERCHE
ANR

SHPCO₂

 **SYSTEM@TIC**
PARIS-REGION
Pôle de compétitivité

Exercice transport réactif SHPCO2

Définition du problème

- Géométrie et conditions limites

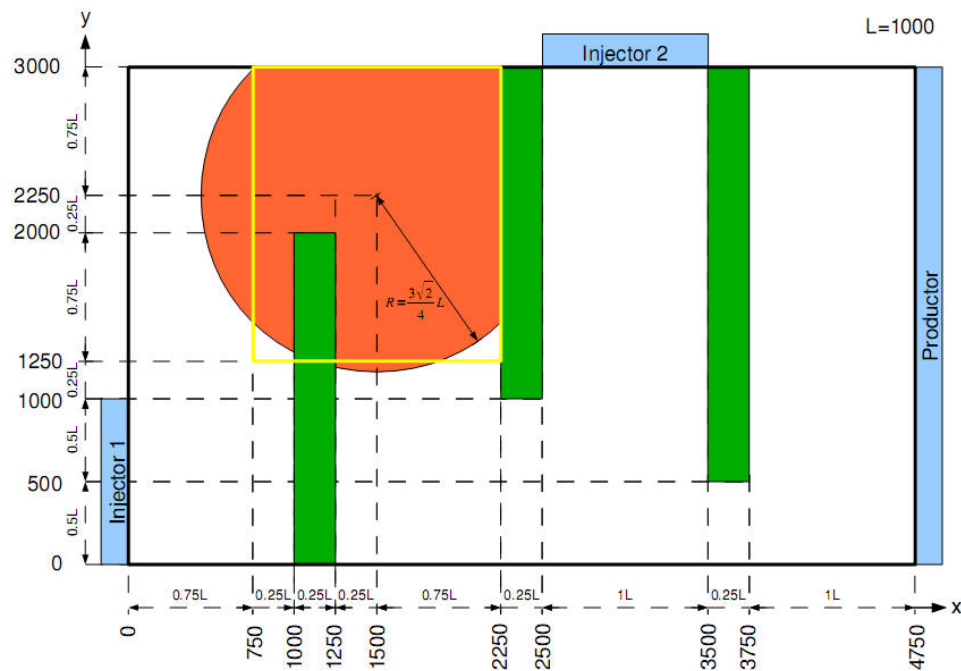


Illustration : Géométrie 2D

Maillage de référence

Maillage	XS	S	M	L
Dx	250	50	10	5
Dy	250	50	10	5
Dz	100	100	100	100
Nx	19	95	475	950
Ny	12	60	300	600
NCell	228	5700	142500	570000

Table : Paramètres des Maillages 2D

Exercice transport réactif SHPCO2

Définition du problème

- Système chimique

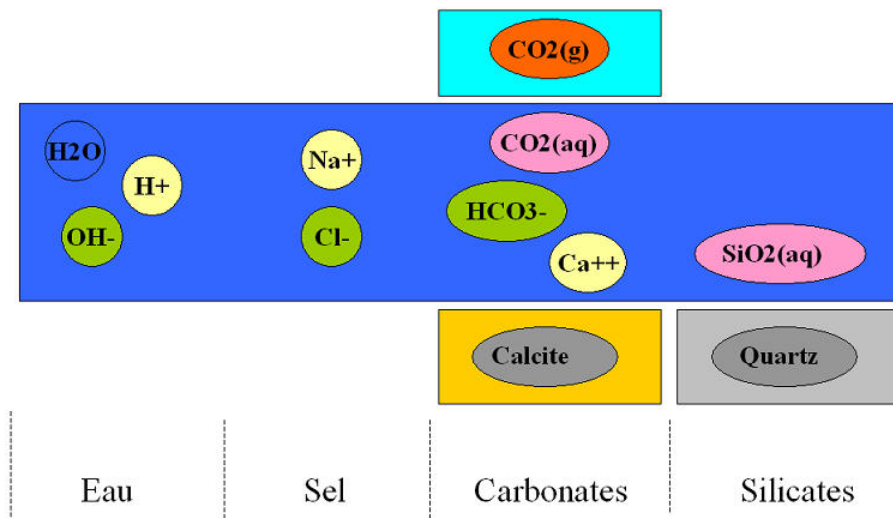
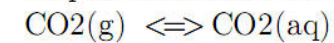


Illustration : Structure du système compositionnel

Req 1. Hydrolyse de l'eau



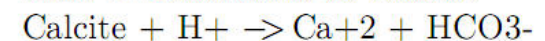
Req 2. Dissolution de CO₂(g) dans l'eau



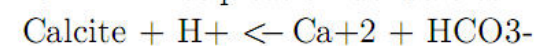
Req 3. Dissociation de CO₂(aq)



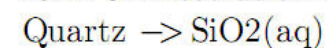
Rkin 1. Dissolution de Calcite



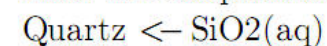
Rkin 2. Précipitation de Calcite



Rkin 3. Dissolution de Quartz



Rkin 4. Précipitation de Quartz



Exercice transport réactif SHPCO2

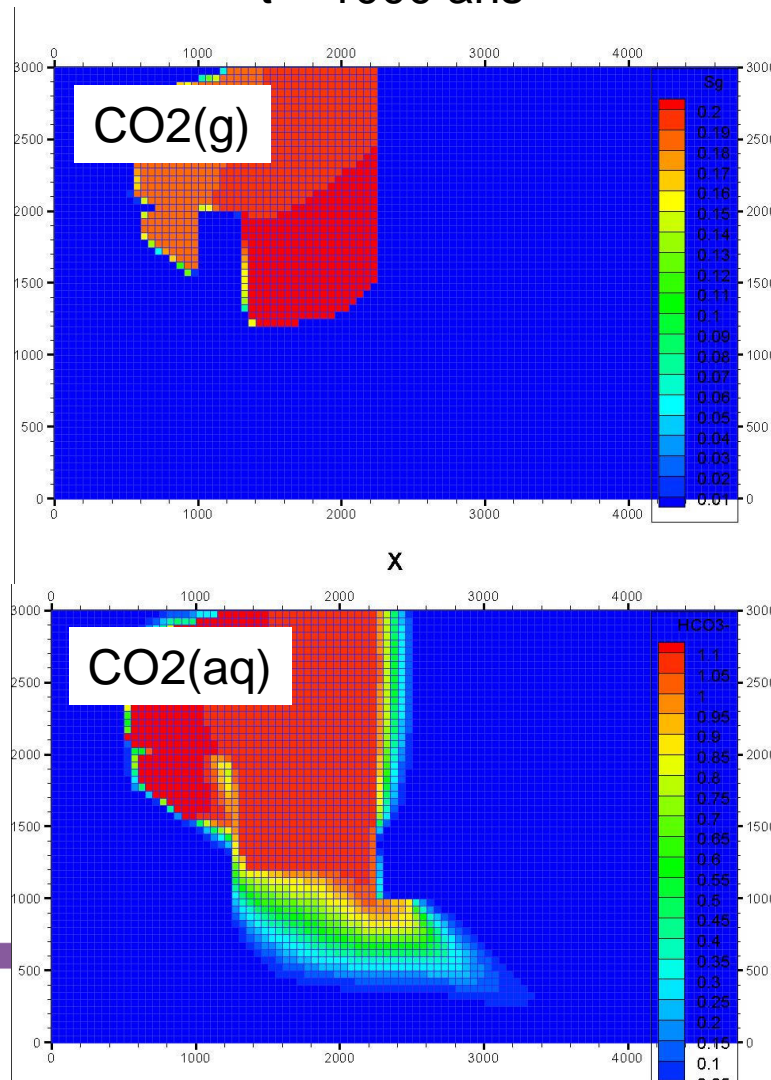
Contribution des équipes du projet

- INRIA
 - Code Transport réactif (NK) - Life V
- BRGM
 - Simulations ToughReact (LBNL)
- IFPEN / ENSMSE
 - Simulations Coores-Arxim
- IFPEN / LAGA
 - Code Transport réactif (DD) – Arcane

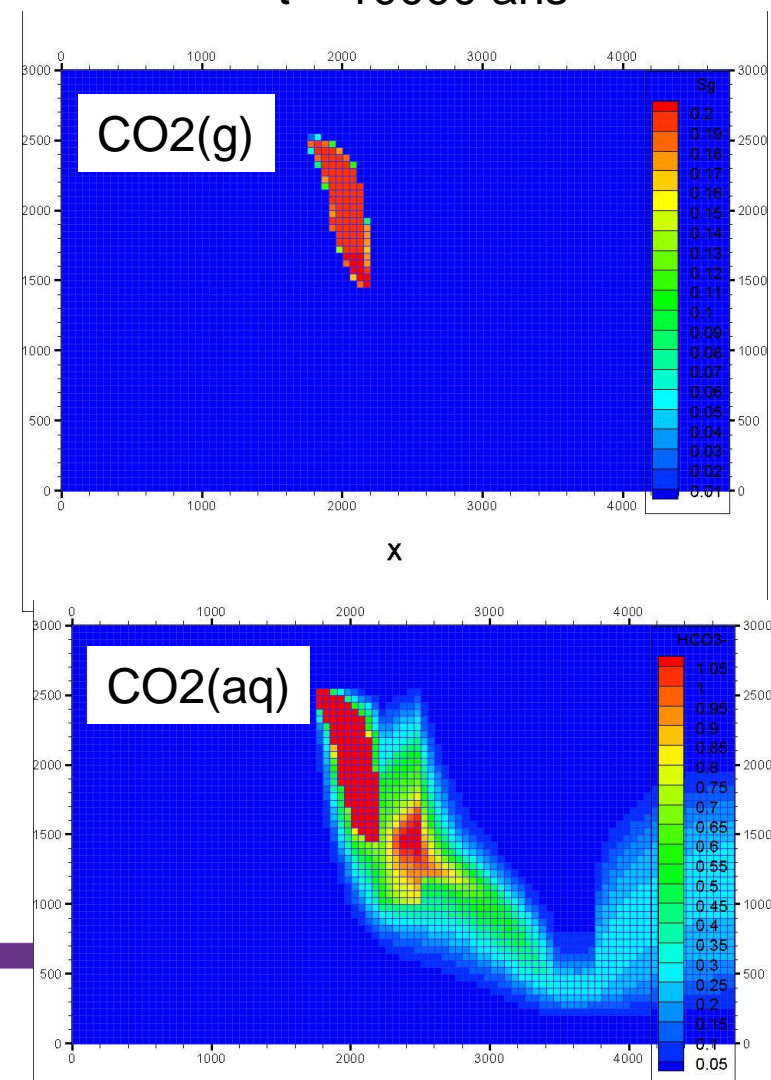
Exercice transport réactif SHPCO2

Validation : solution de référence à différents instants

t = 1000 ans

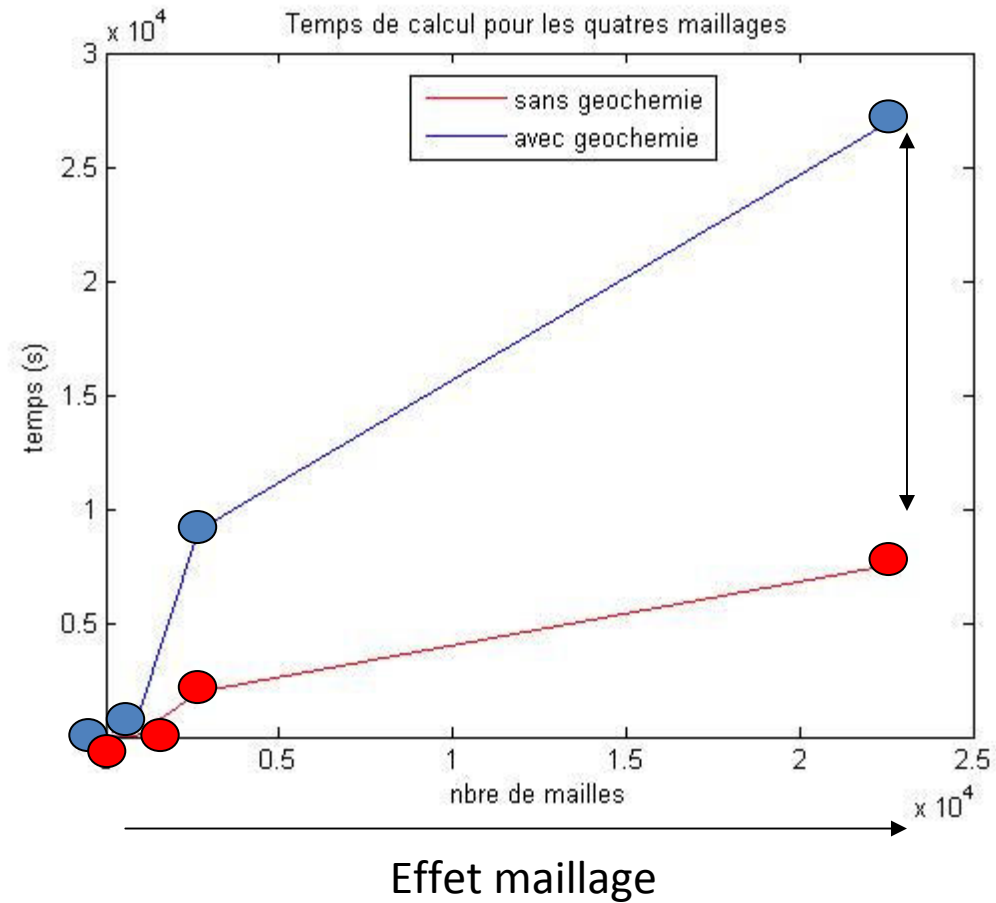


t = 10000 ans



Exercice transport réactif SHPCO2

Validation : effet maillage et couplage chimie



Effet couplage
avec la chimie



Perspectives



Perspectives

- Etudes mathématiques
 - Extensions des études théoriques aux problème multi-espèces
 - Mise en relation des travaux d'accélération par découplage-itération
- Codes de calcul
 - Intégration Finale Ecoulement – Transport Réactif
 - Etude avec Partitionnement Dynamique
- Cas d'étude
 - Simulation Bassin Parisien avec Transport Réactif
- Exercice transport réactif SHPCO2
 - Publication article commun partenaires SHPCO2
 - Présentation et ouverture à d'autres équipes