

Projet SHPCO2

Appel à projet ANR-CIS 2007

Anthony MICHEL
IFP énergies nouvelles

SHPCO2

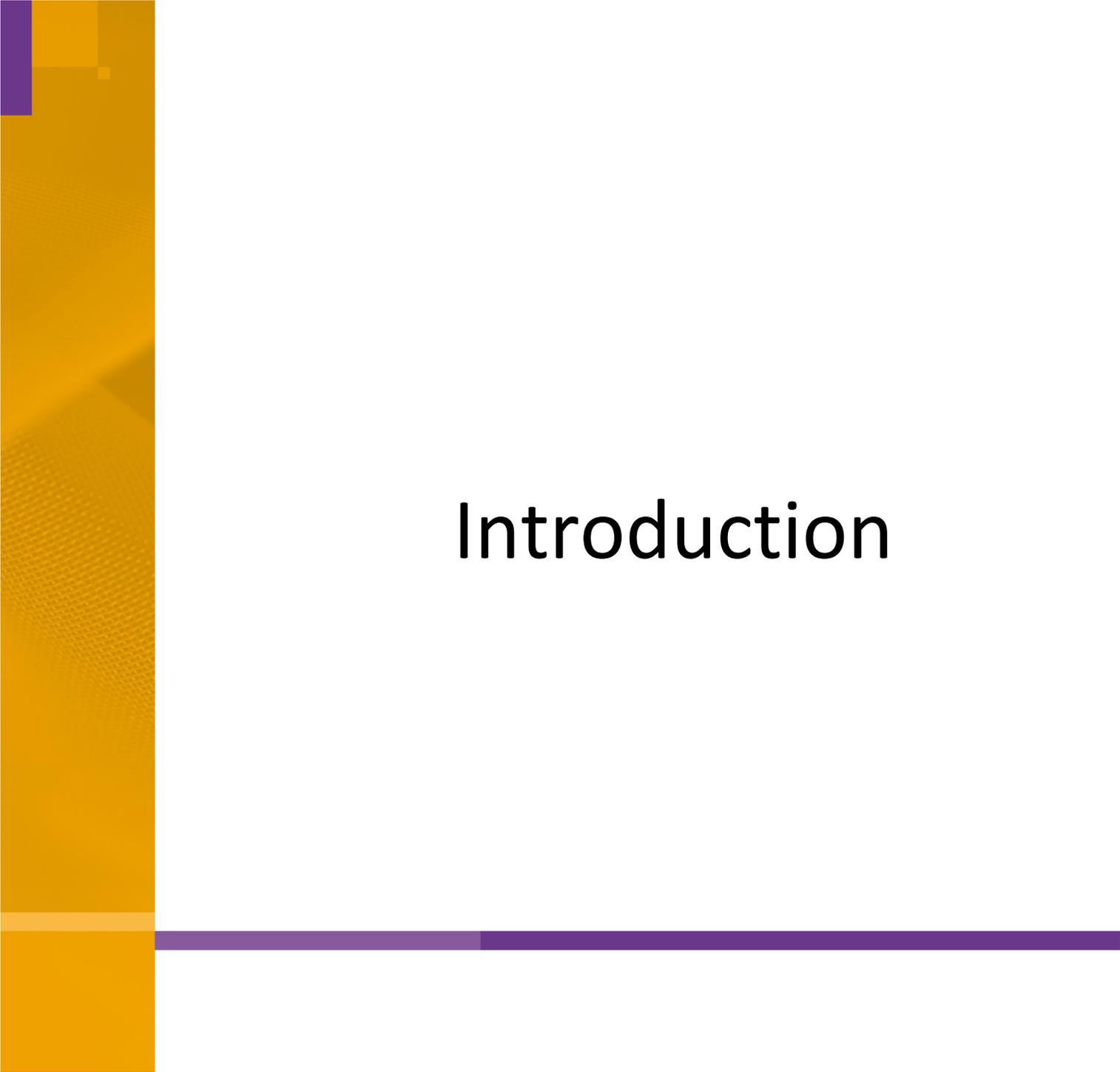
- Simulation Haute Performance du stockage géologique de CO2
- Appel d'offre - ANR Calcul Intensif et Simulation 2007
- Début du projet : 2008, Fin du projet : 2011 (extension 1 an)

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

- Label : Pôle de Compétitivité SYSTEMATIC Paris-Region

Plan de la présentation

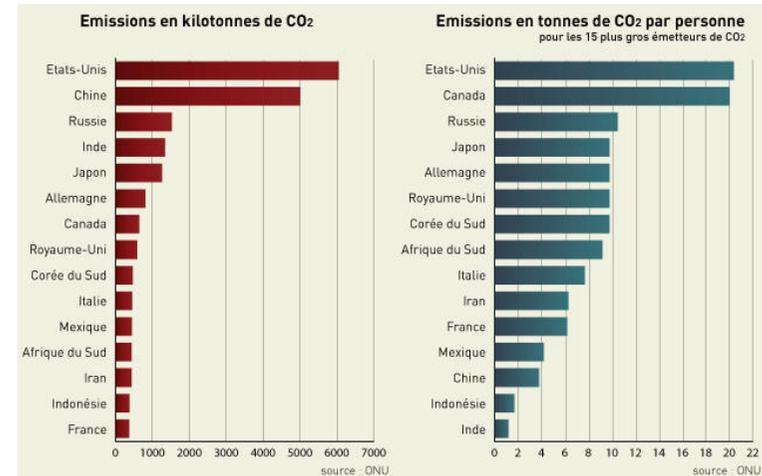
- Introduction
- Objectifs de simulation et cas d'étude
- Méthodes numériques et développements logiciels
- Calcul intensif et étude de performance
- Exercice de transport réactif SHPCO₂
- Perspectives



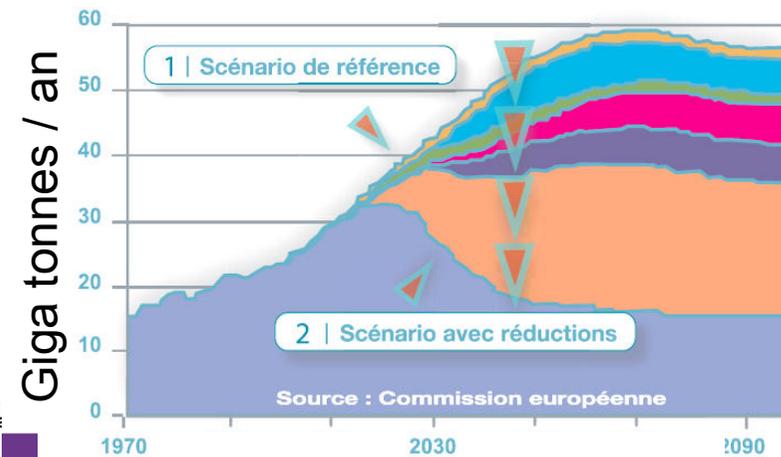
Introduction

Introduction

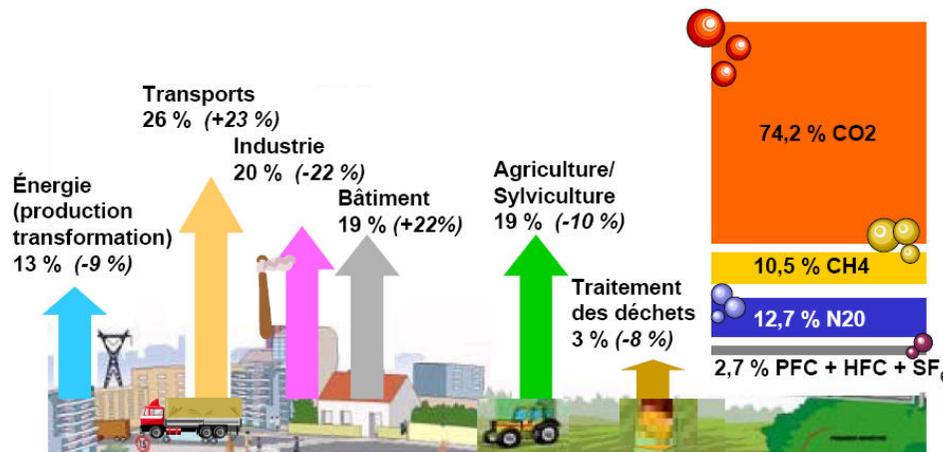
Enjeux de la réduction des émissions de CO2



Émissions de CO₂ (en milliards de tonnes de CO₂)



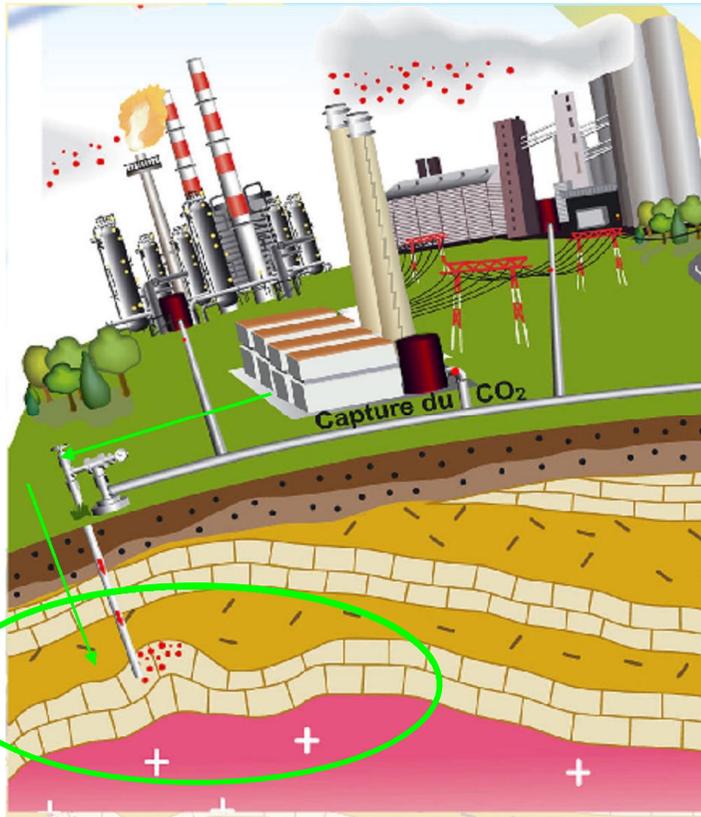
- Puits naturels
- Solaire, Eolien, Nucléaire
- Captage et stockage
- Biocarburants
- Carburant de substitution
- Efficacité Energétique



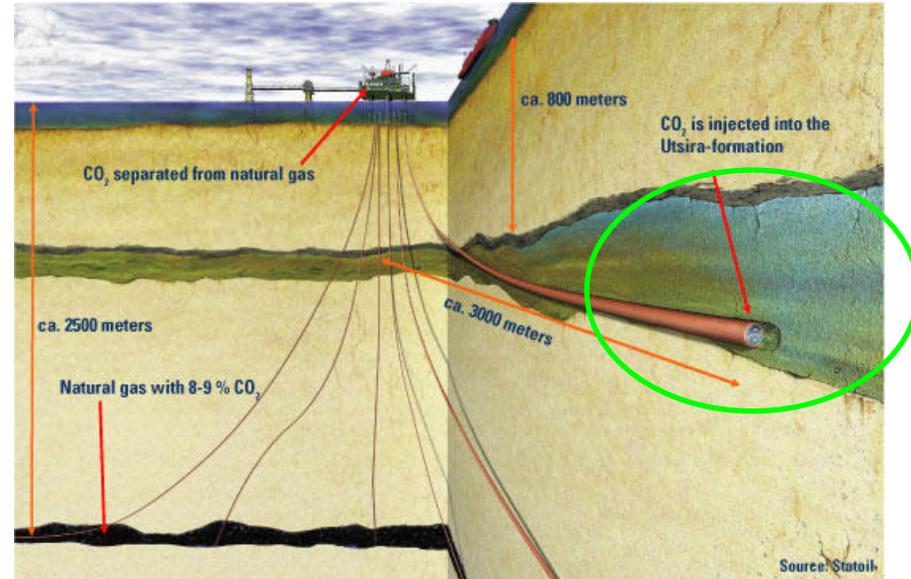
Émissions de GES² en France (y compris DOM/COM) en 2004, par secteur (hors UTCF³) (entre parenthèses, l'évolution depuis 1990 ; source : CITEPA/Inventaire SECTEN/Format PNLC, février 2006)

Introduction

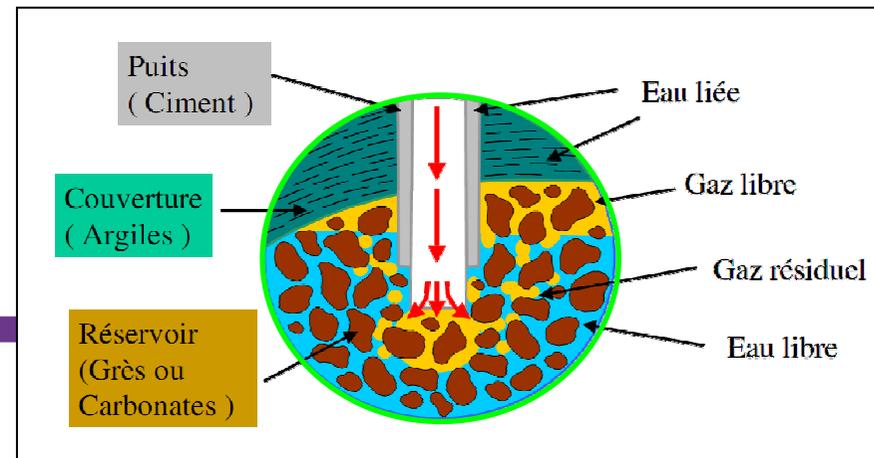
Principe du stockage géologique de CO2



Source BRGM / IFP

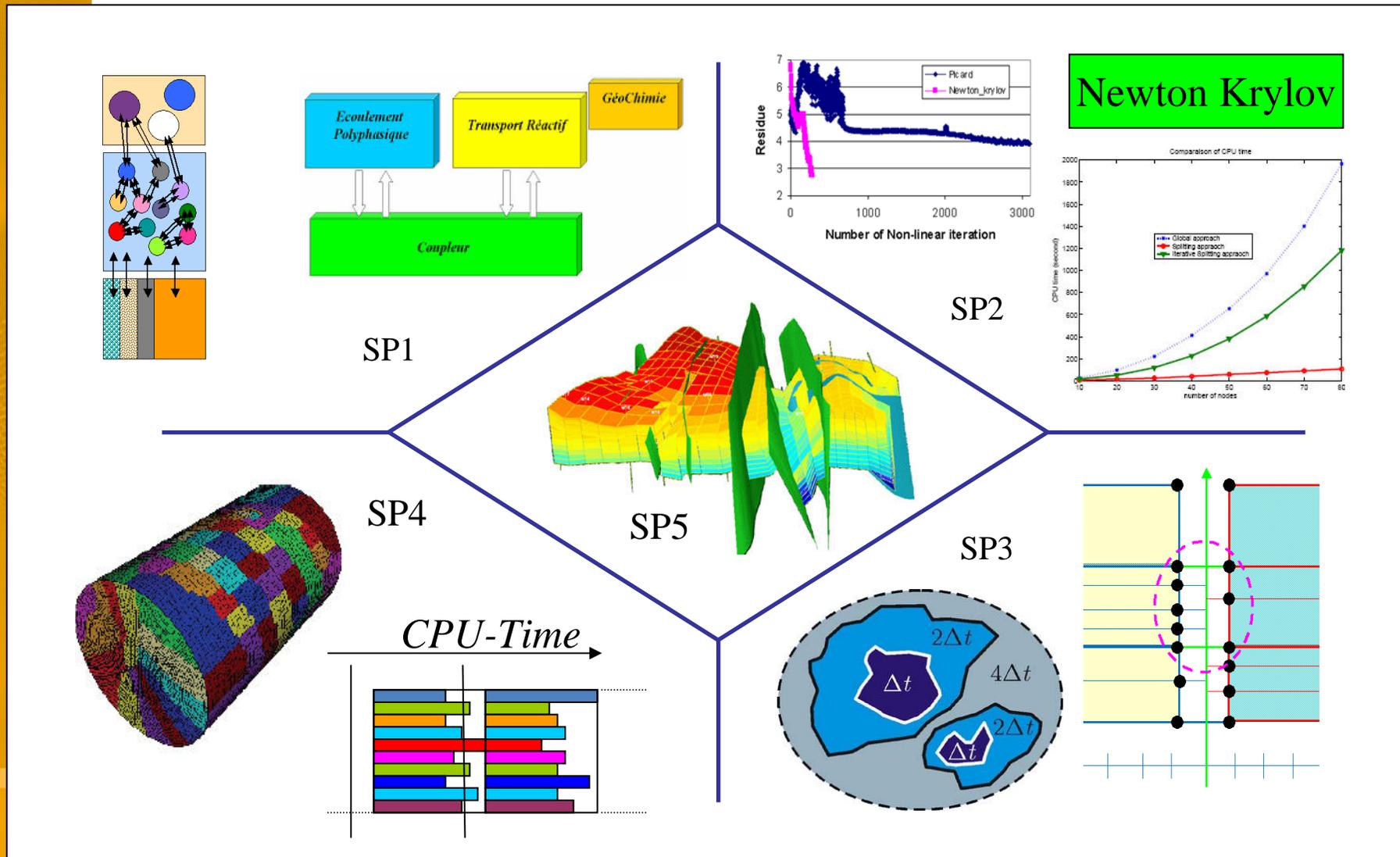


Source Statoil



Introduction

Structure du Projet ANR-SHPCO2



Introduction

Equipes et partenaires



- Anthony MICHEL
- Jean-Marc GRATIEN
- Ani ANCIAUX
- Laurent TRENTY
- Roland MASSON
- Sylvain DESROZIERS
- 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)



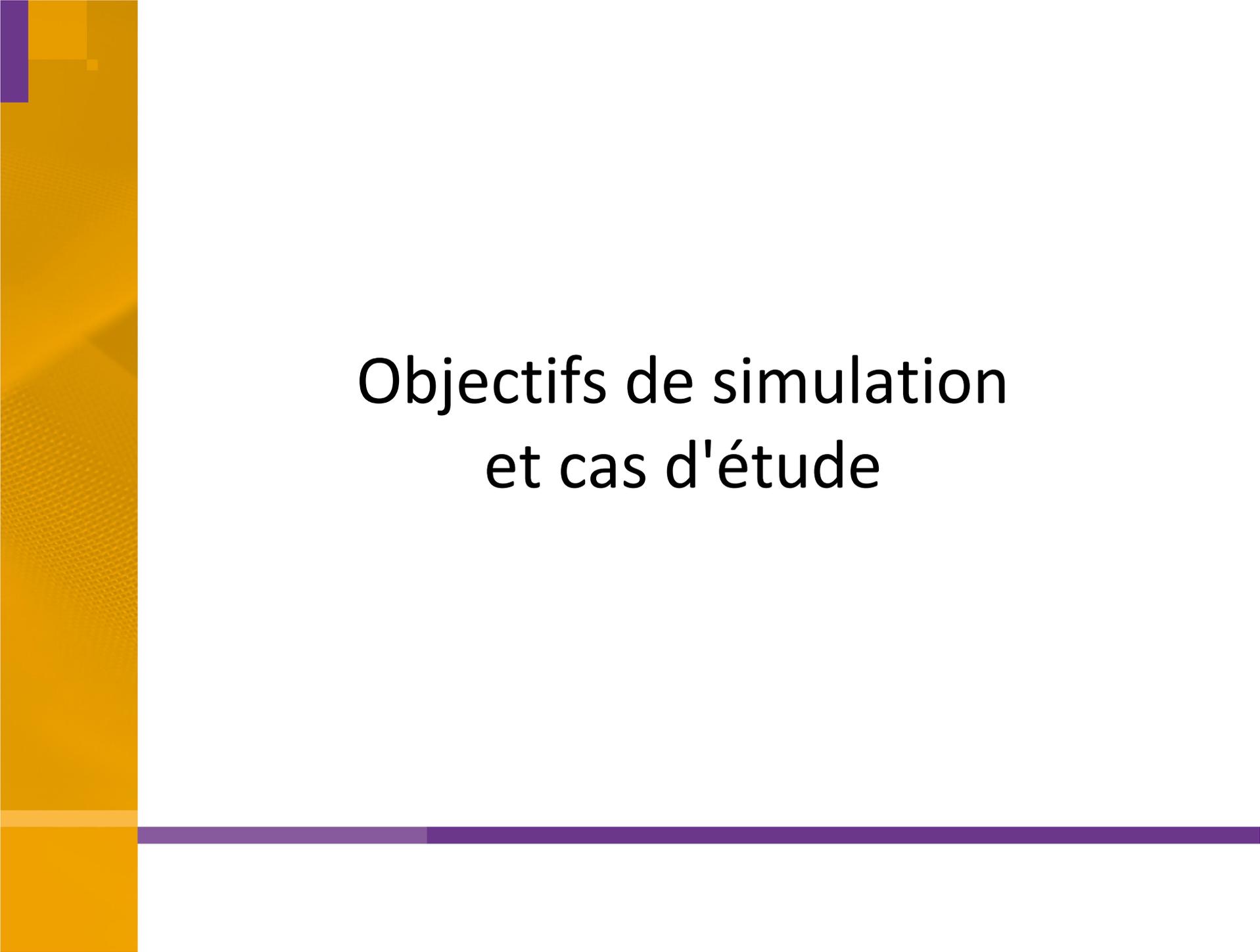
- Daniel GARCIA
- Bernard GUY
- Jacques MOUTTE
- Guillaume BATTIAA (Post Doc)



- 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

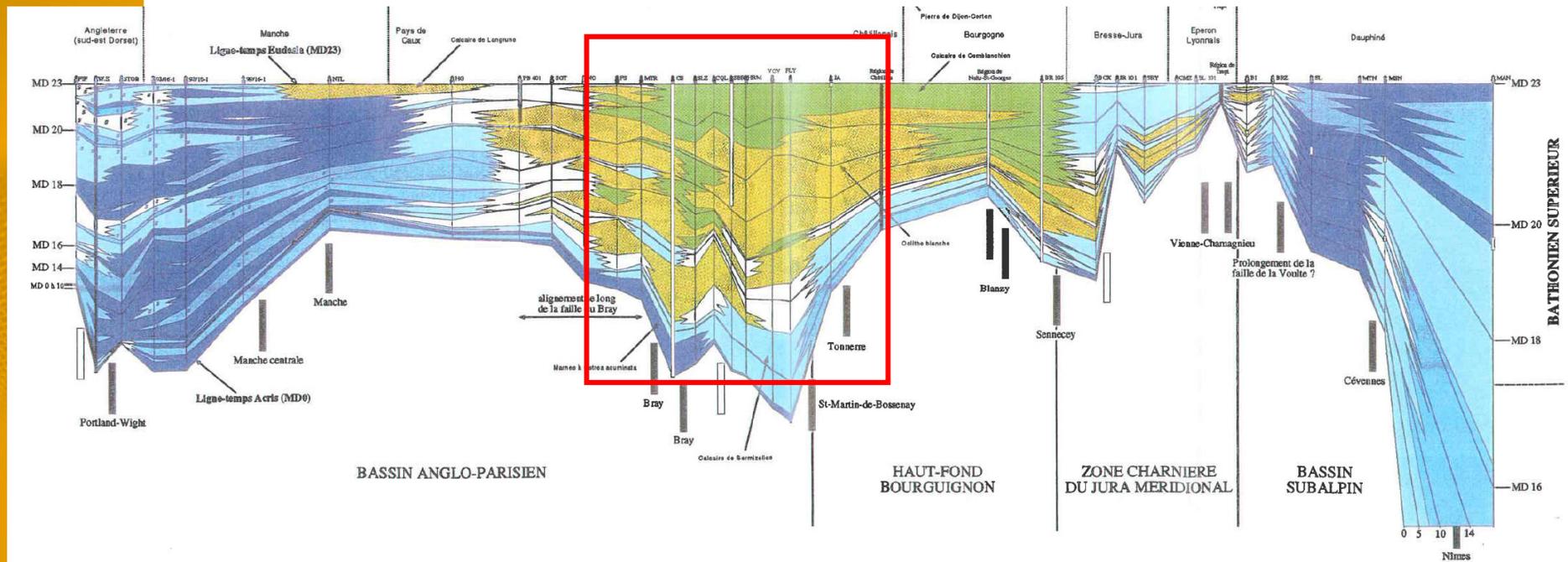
Objectifs de simulation et cas d'étude

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

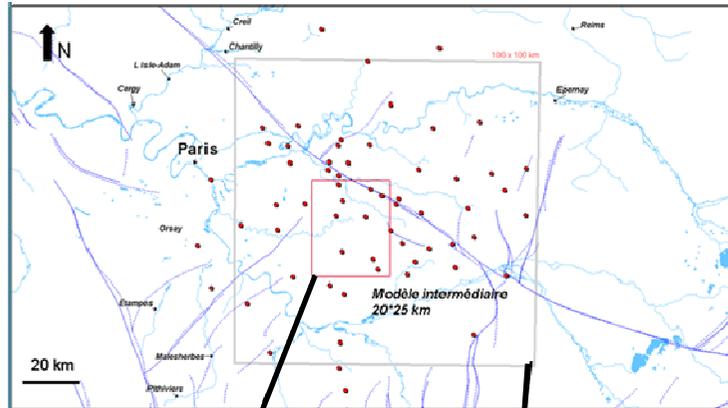
Stockage géologique Bassin Parisien



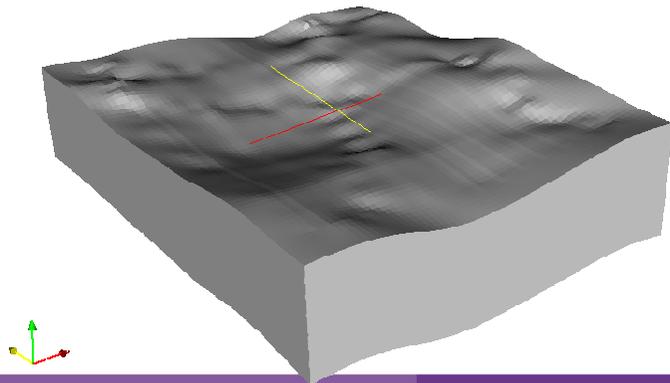
Caractérisation géologique du bassin parisien

Objectifs de simulation et cas d'étude

Stockage géologique Bassin Parisien

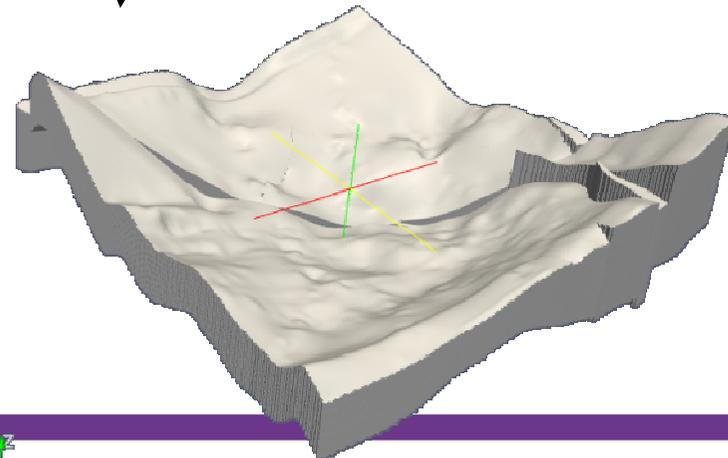


Modèle1 Local
20 km x 20 km



425 000 mailles sans faille
4 Millions de mailles sans faille

Modèle3 Régional
100 km x 100 km

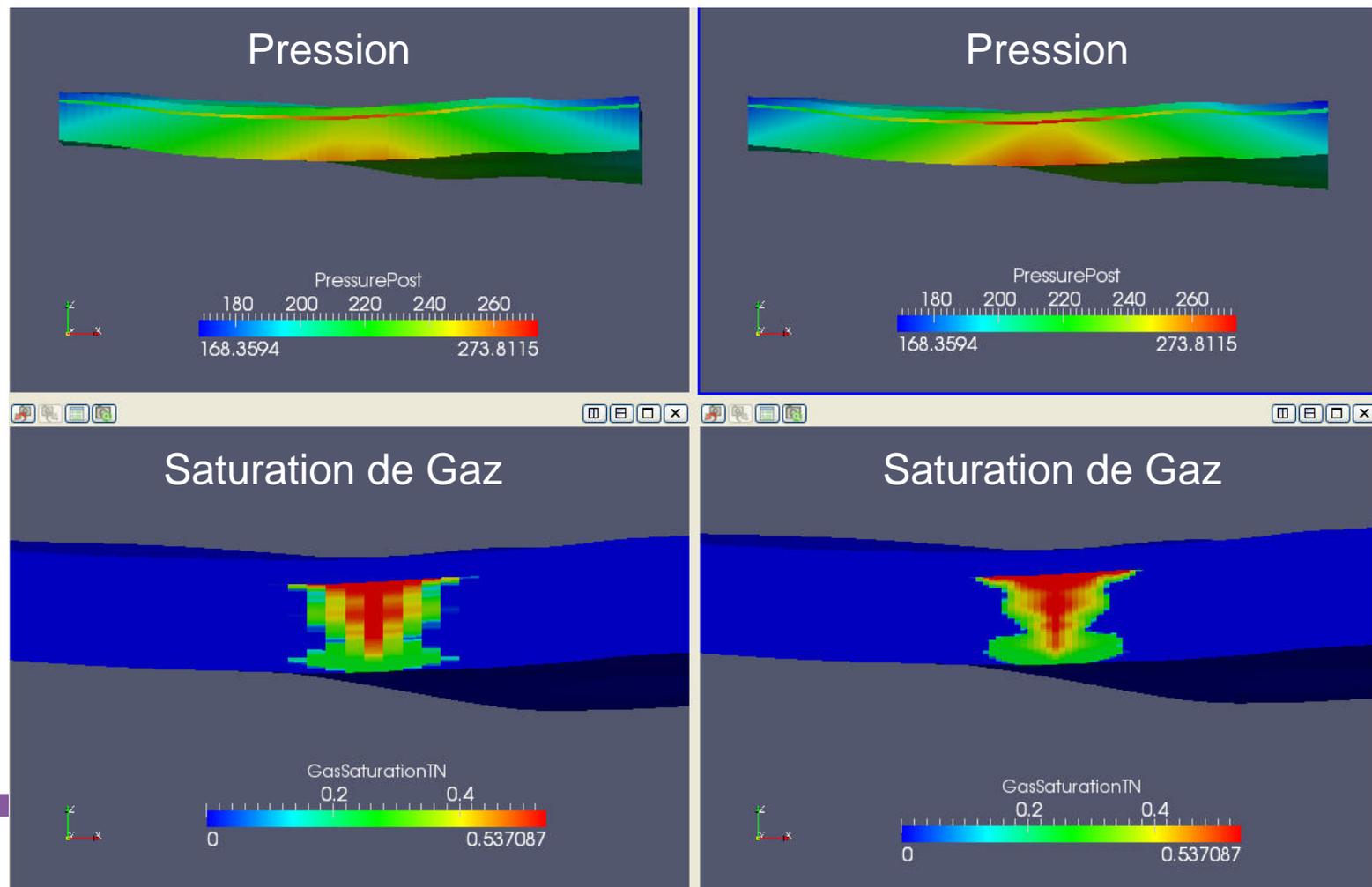


8 Millions de mailles avec failles

Objectifs de simulation et cas d'étude

Modèle Local avec Raffinement

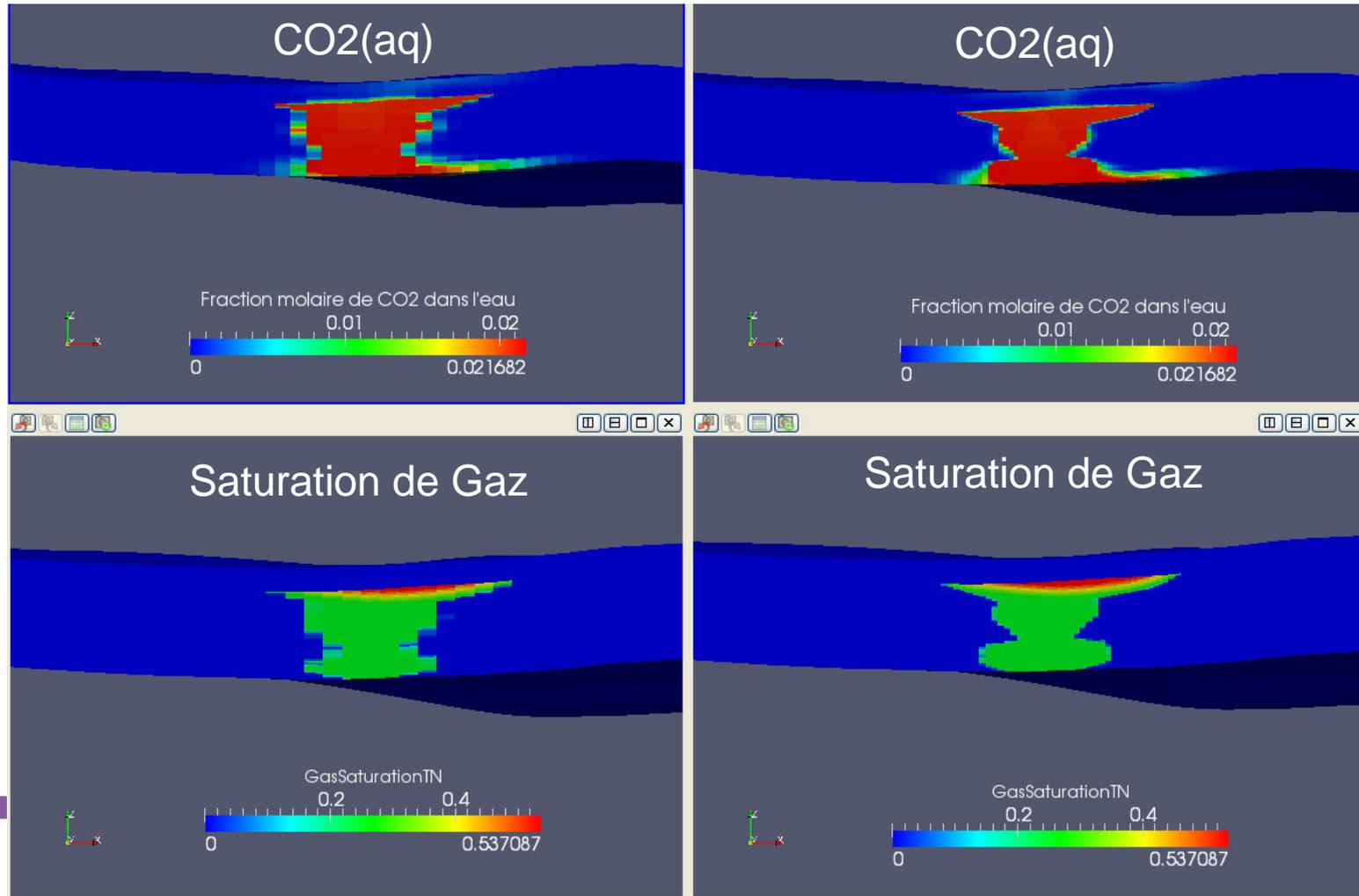
Résultat en fin de la période d'injection à $t = 3$ ans



Objectifs de simulation et cas d'étude

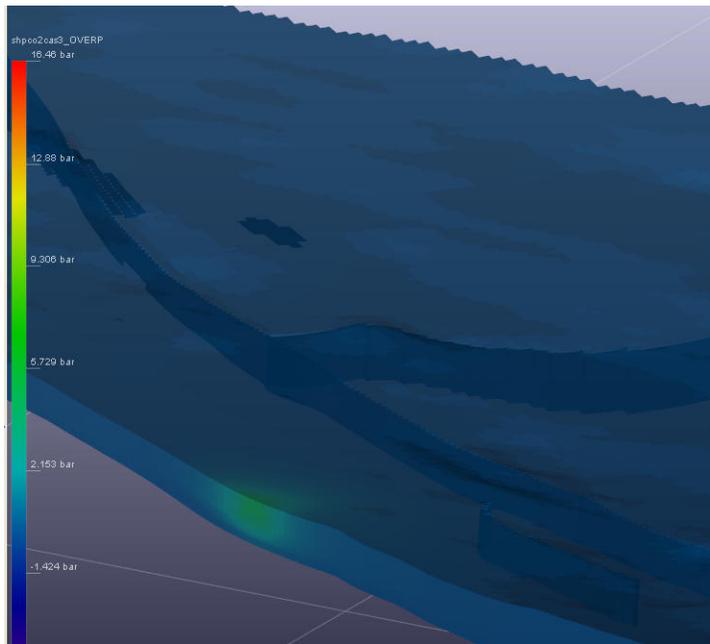
Modèle Local avec Raffinement

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

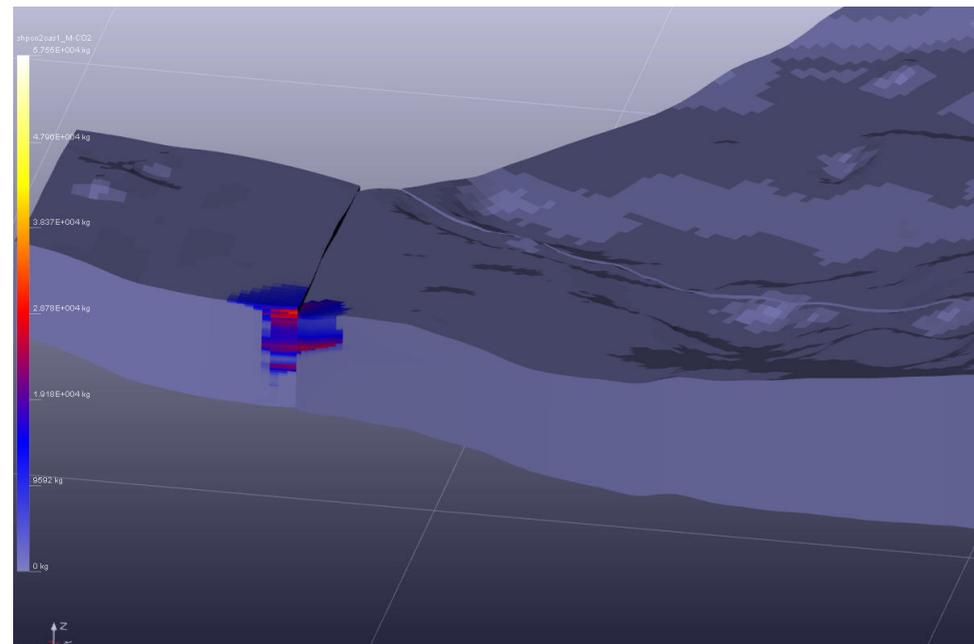


Objectifs de simulation et cas d'étude

Modèle Régional



Surpression
à la fin de la période d'injection



Masse de CO₂
à la date t = 1000 ans

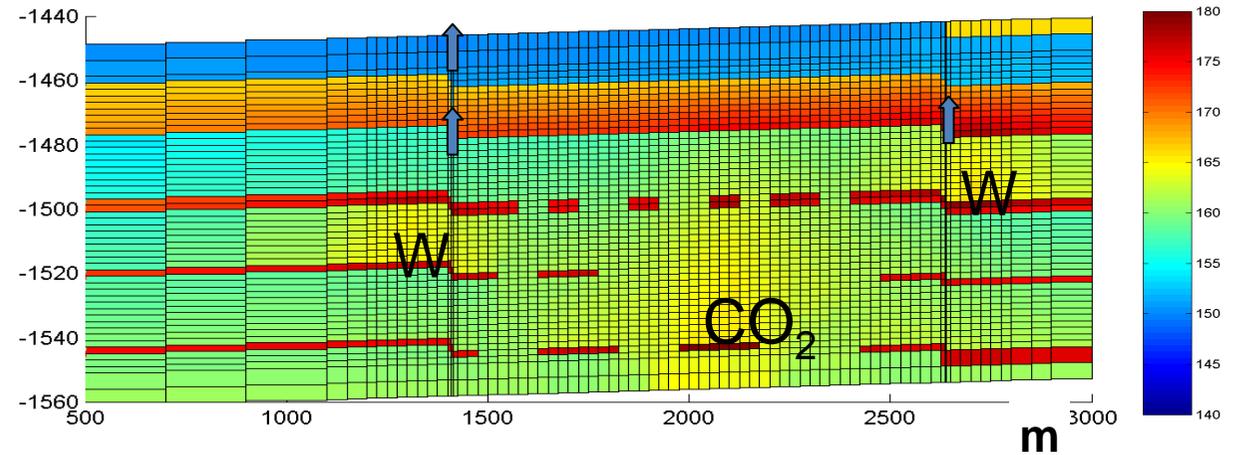
Objectifs de simulation et cas d'étude

Balayage Aquifère

Etape 1

Injection de CO₂

t = 0 → 5 ans

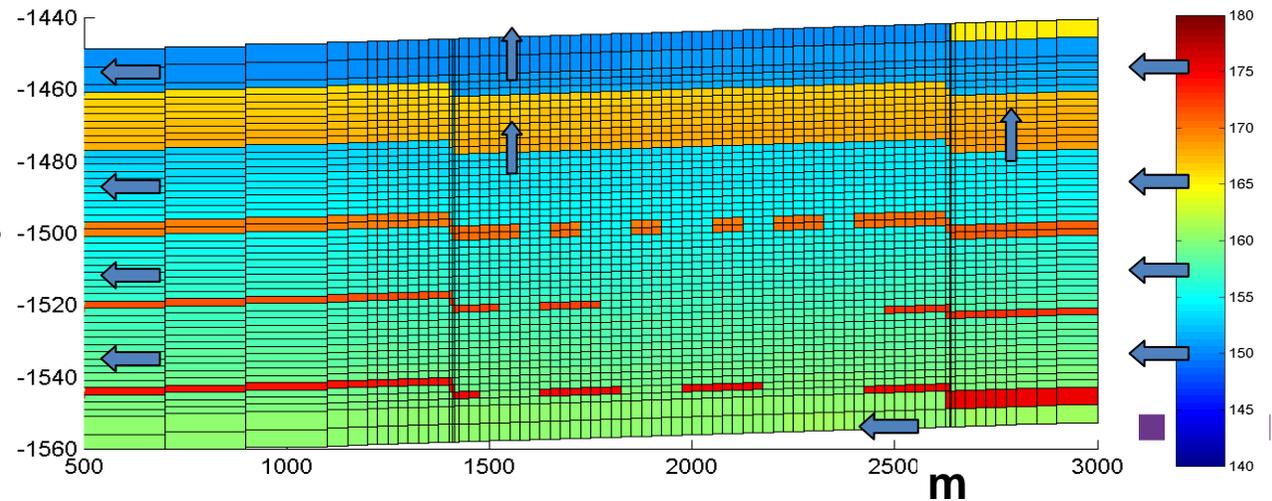


Etape 2

Balayage naturel

Aquifère régional

t = 5 ans → 3000 ans

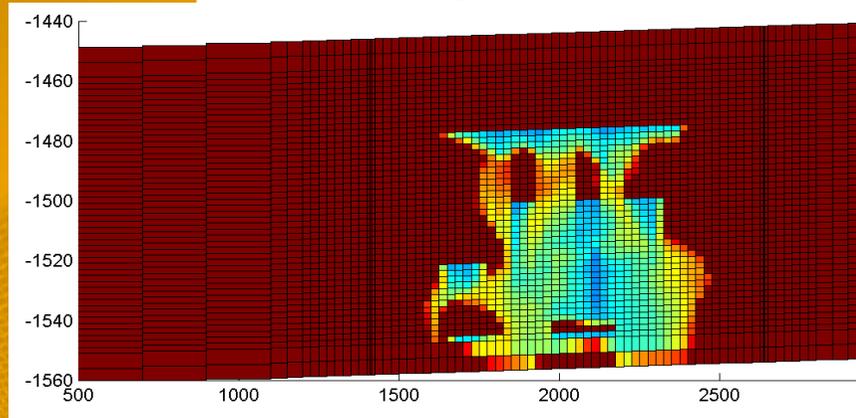


Objectifs de simulation et cas d'étude

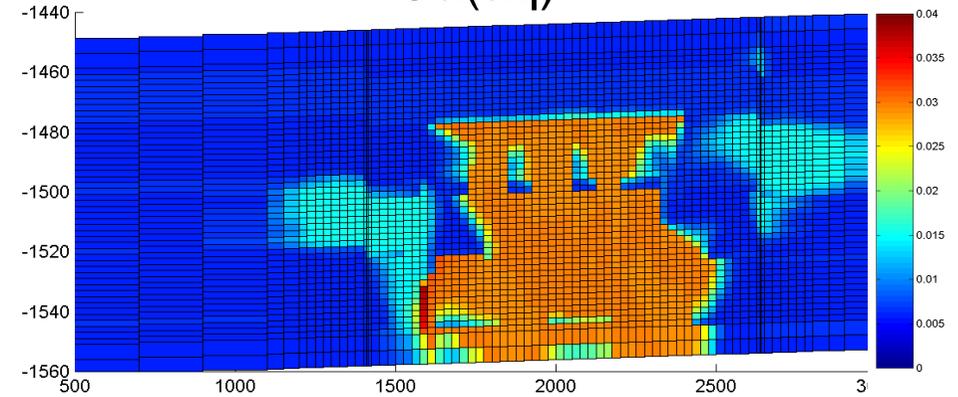
Balayage Aquifère

t = 5 ans

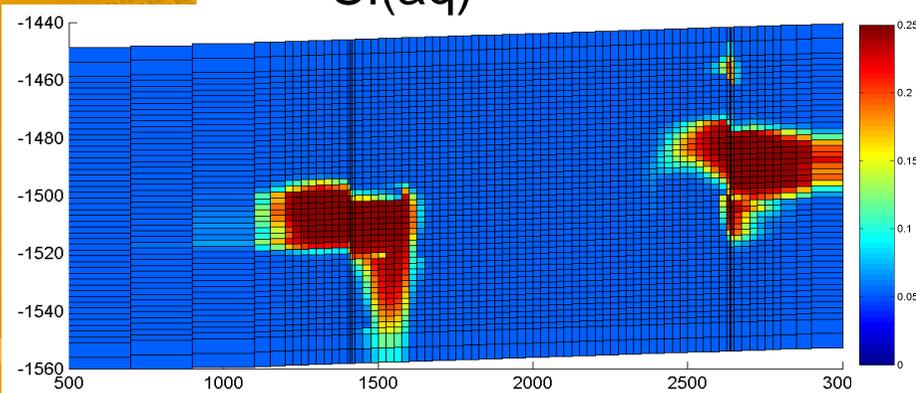
$S_w = 1 - S_g$



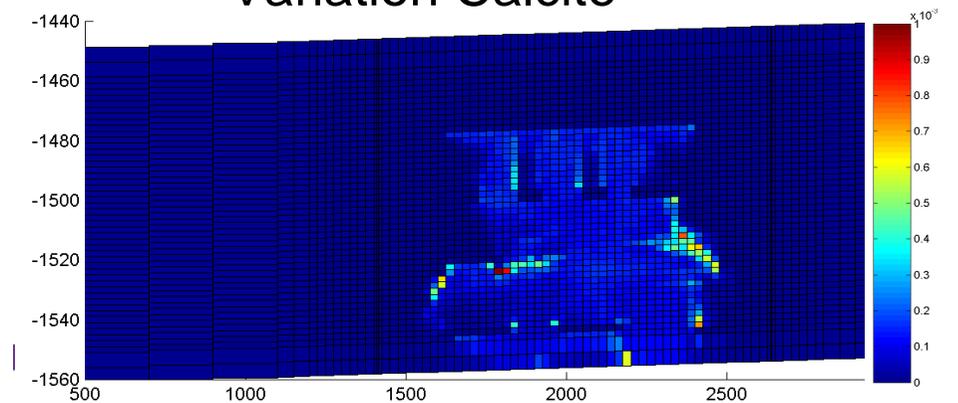
Ca(aq)



Cl(aq)



Variation Calcite

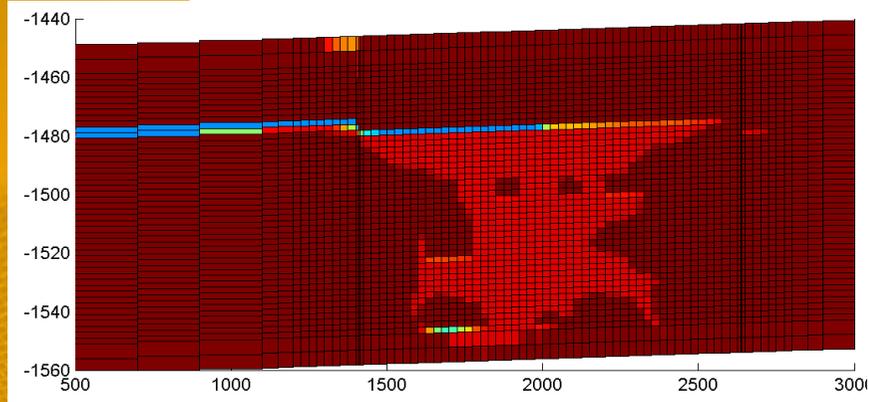


Objectifs de simulation et cas d'étude

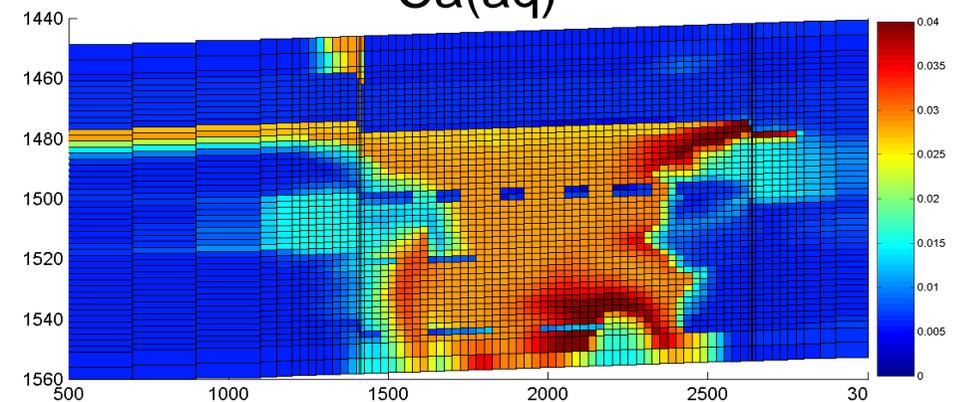
Balayage Aquifère

t = 100 ans

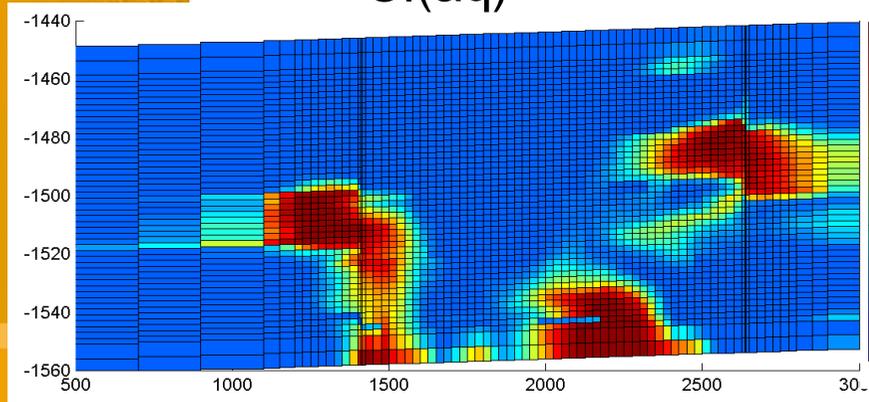
$S_w = 1 - S_g$



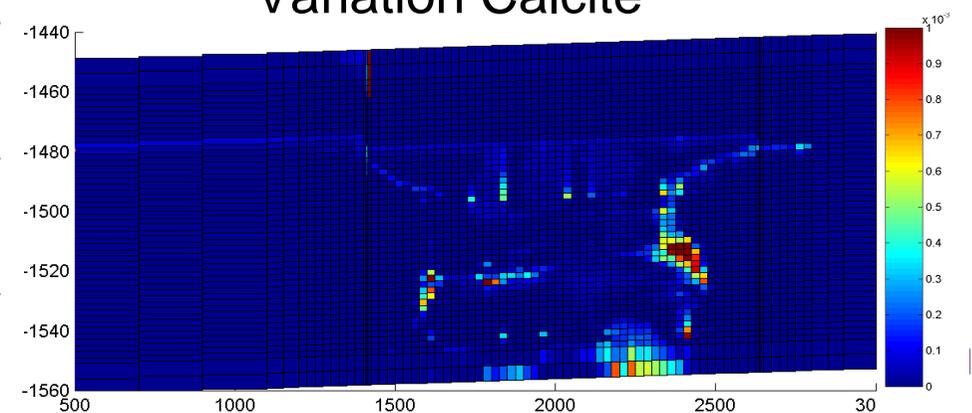
Ca(aq)



Cl(aq)



Variation Calcite

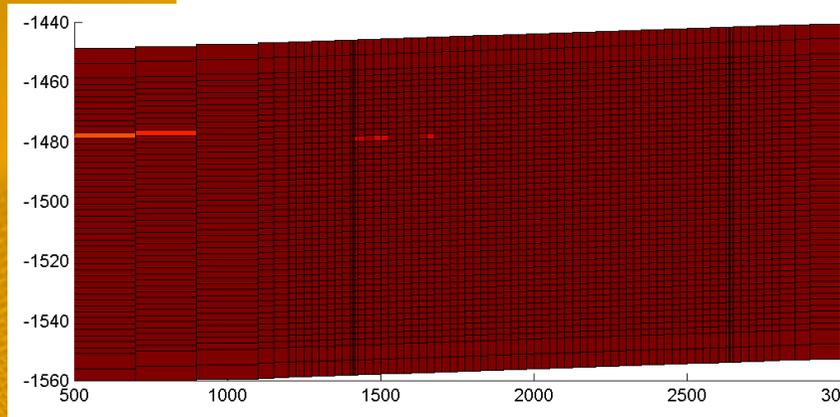


Objectifs de simulation et cas d'étude

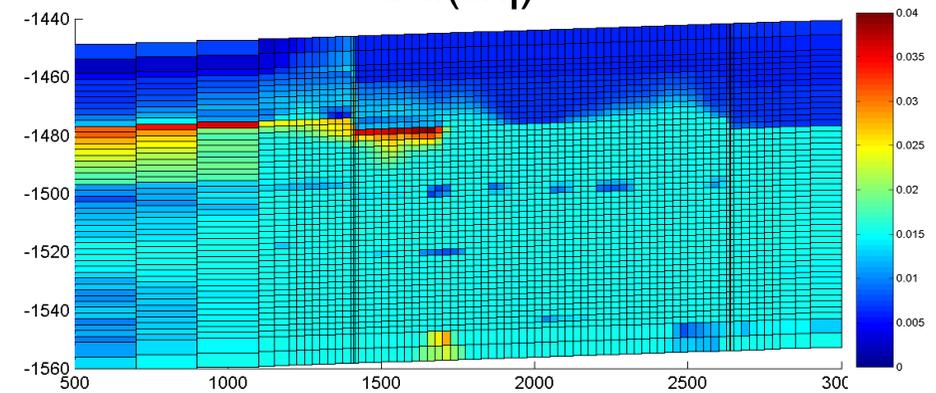
Balayage Aquifère

t = 3000 ans

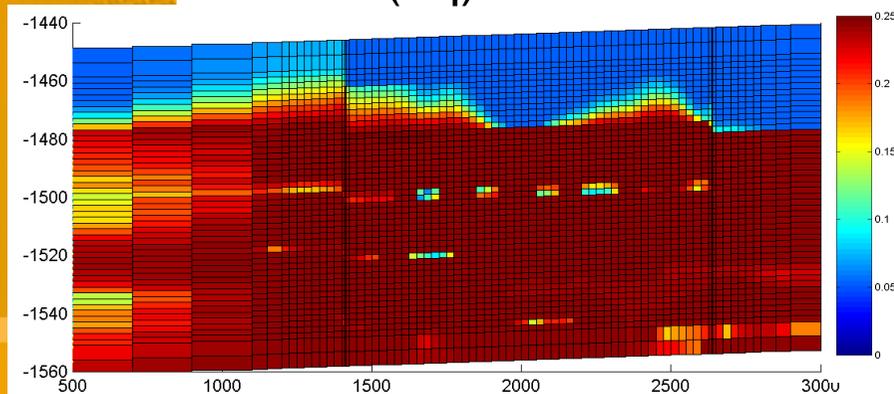
$S_w = 1 - S_g$



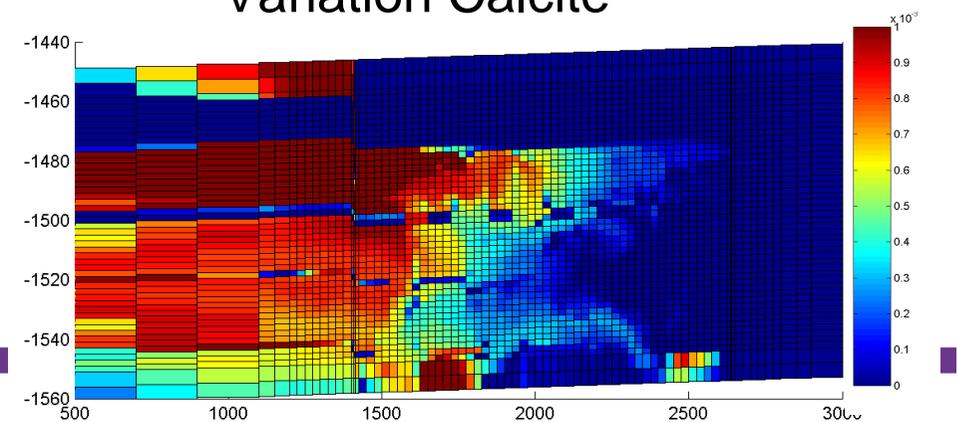
Ca(aq)



Cl(aq)

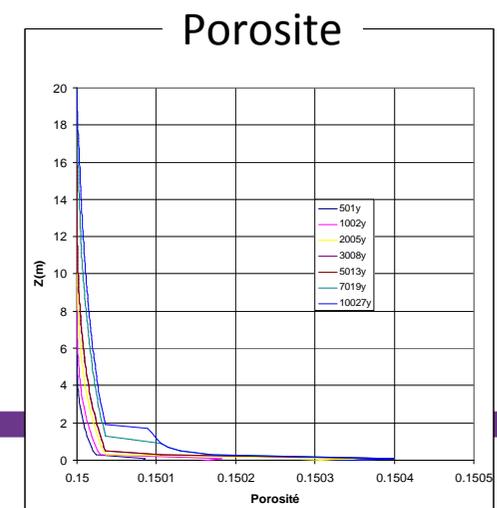
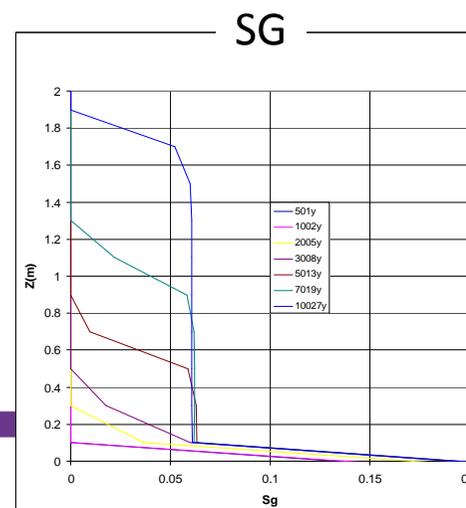
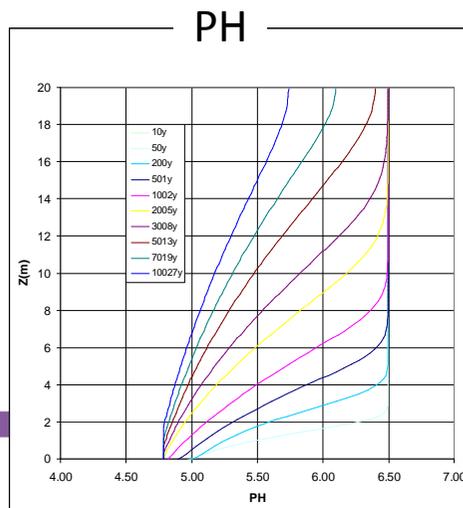
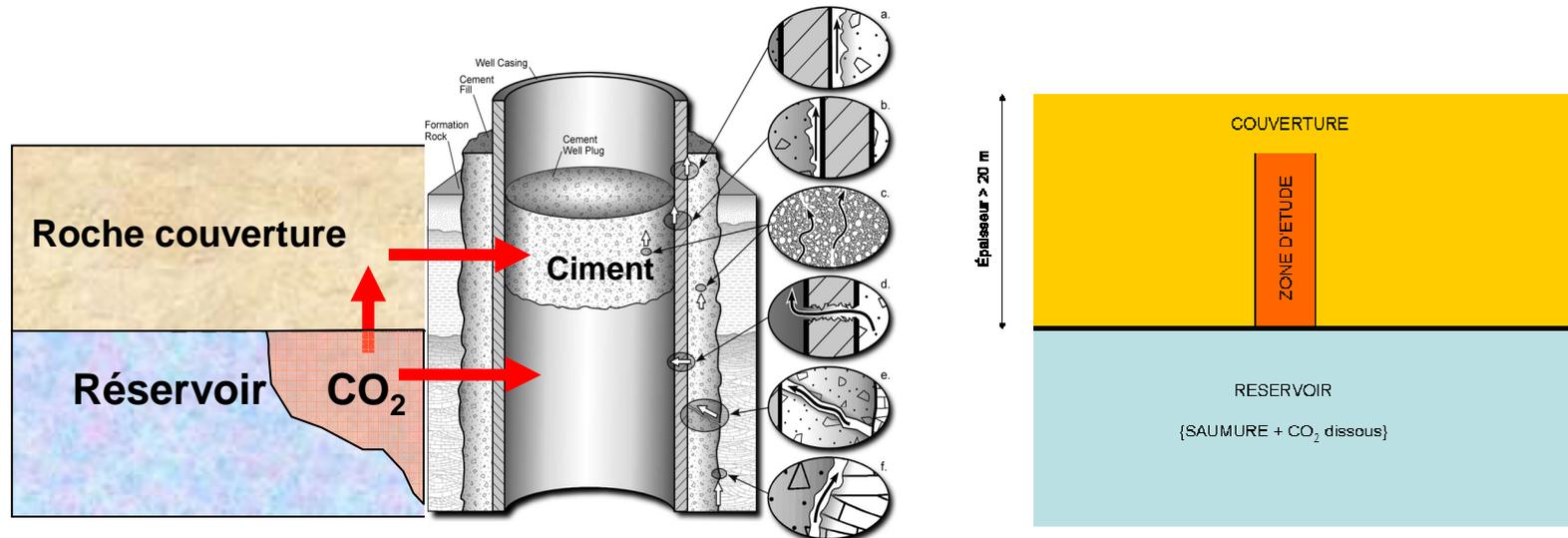


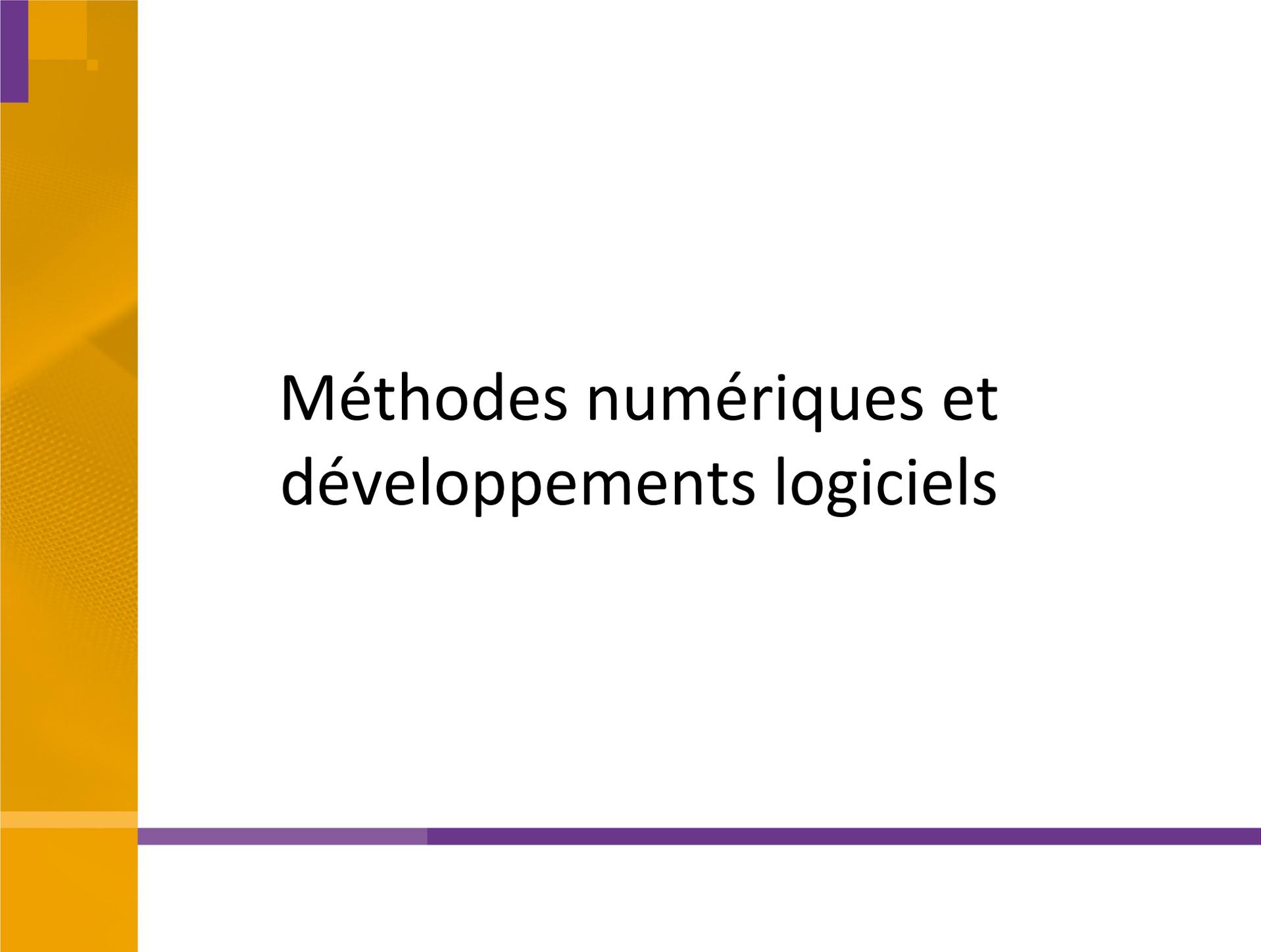
Variation Calcite



Objectifs de simulation et cas d'étude

Diffusion réaction dans la couverture



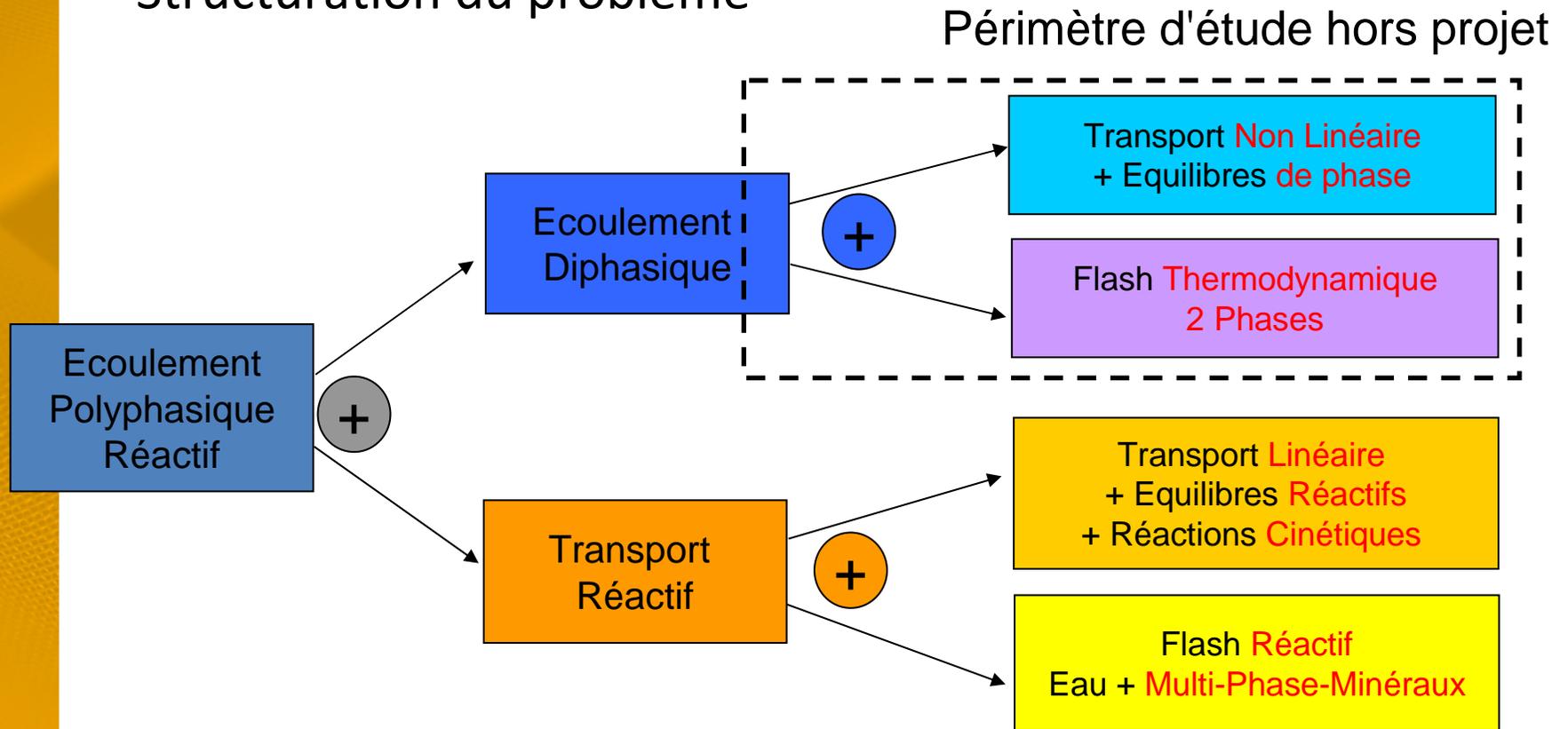


Méthodes numériques et développements logiciels

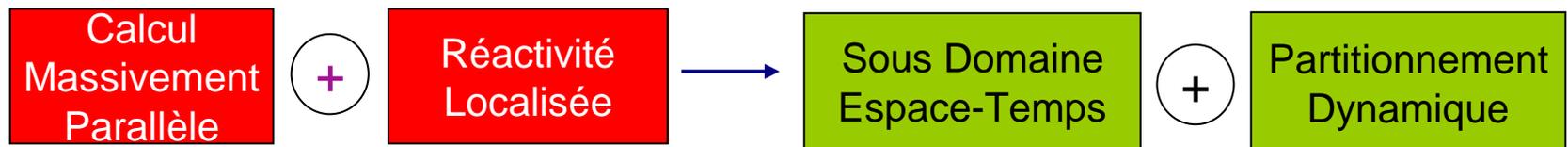
Méthodes numériques et développements logiciels

Organisation des développements

- Structuration du problème



- Contraintes imposées



Méthodes numériques et développements logiciels

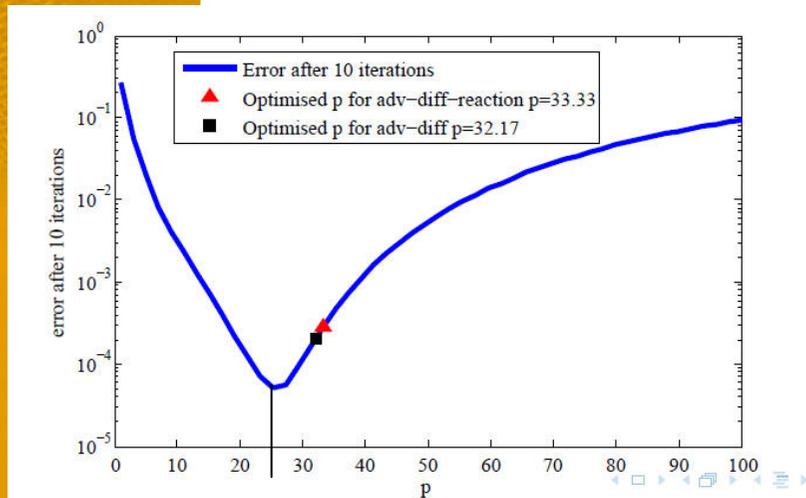
Synthèse des réalisations

- 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)

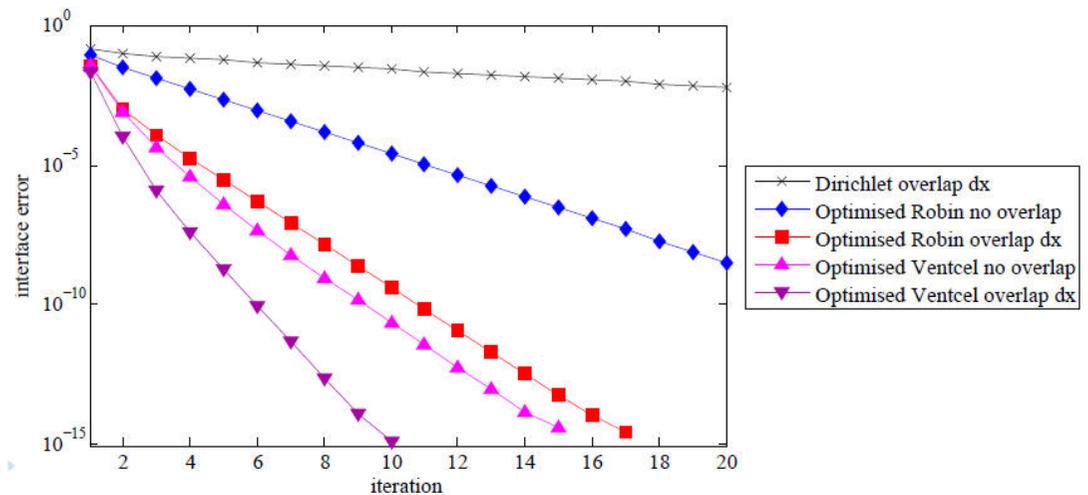
Méthodes numériques et développements logiciels

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.



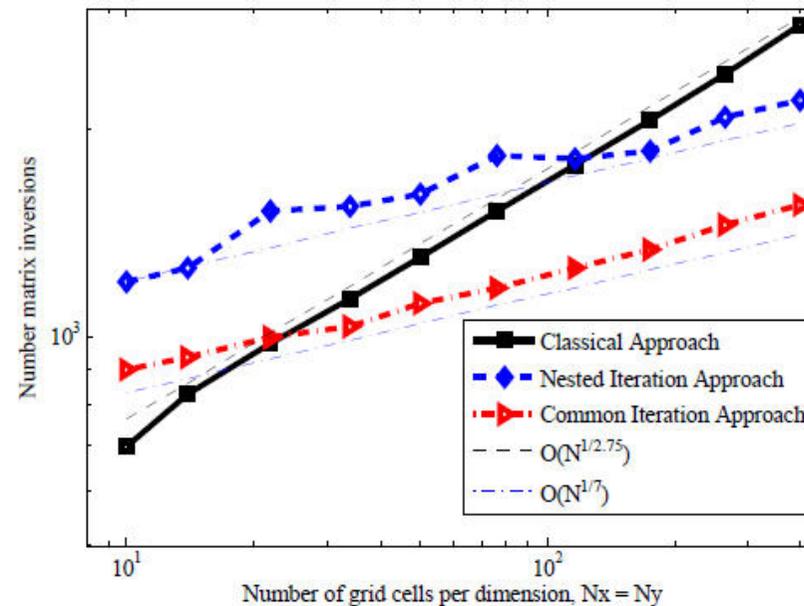
p^* optimal



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)



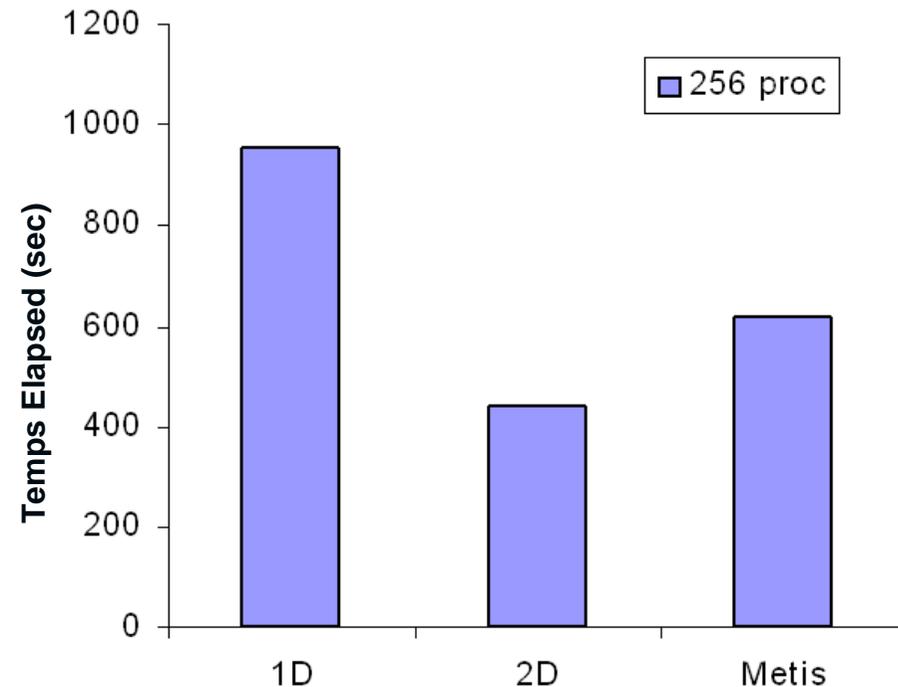
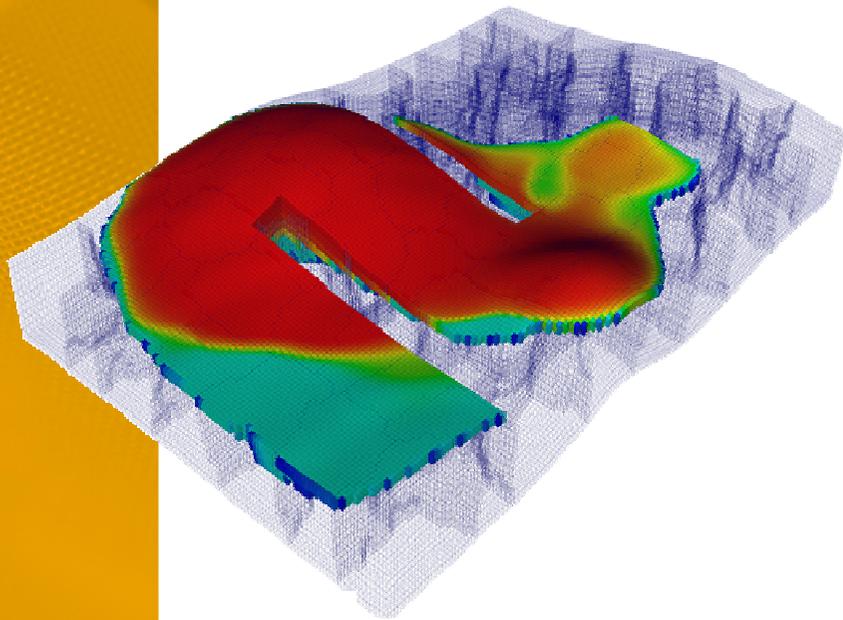
Calcul intensif et performances



Calcul intensif et performances

Cas Test SHPCO2 (Partitionneurs)

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

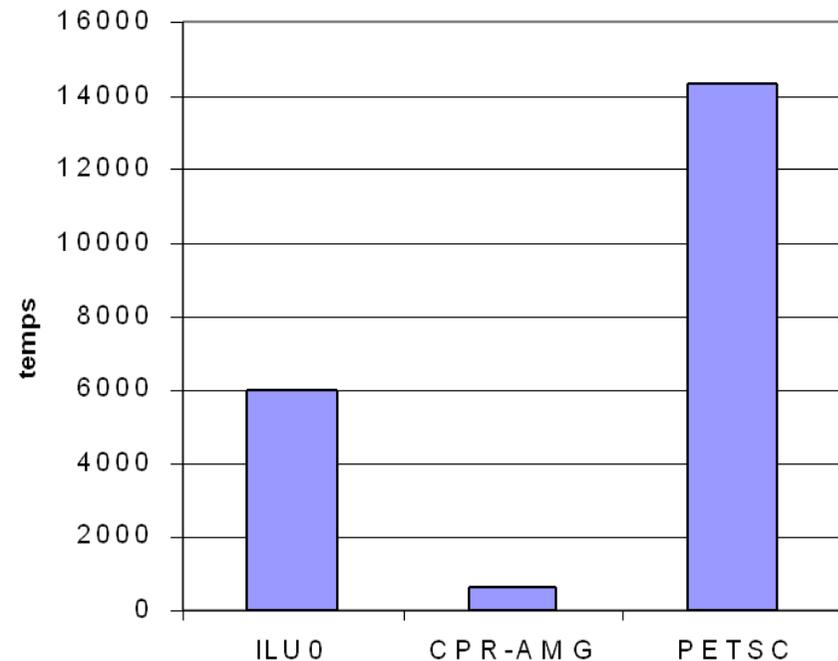
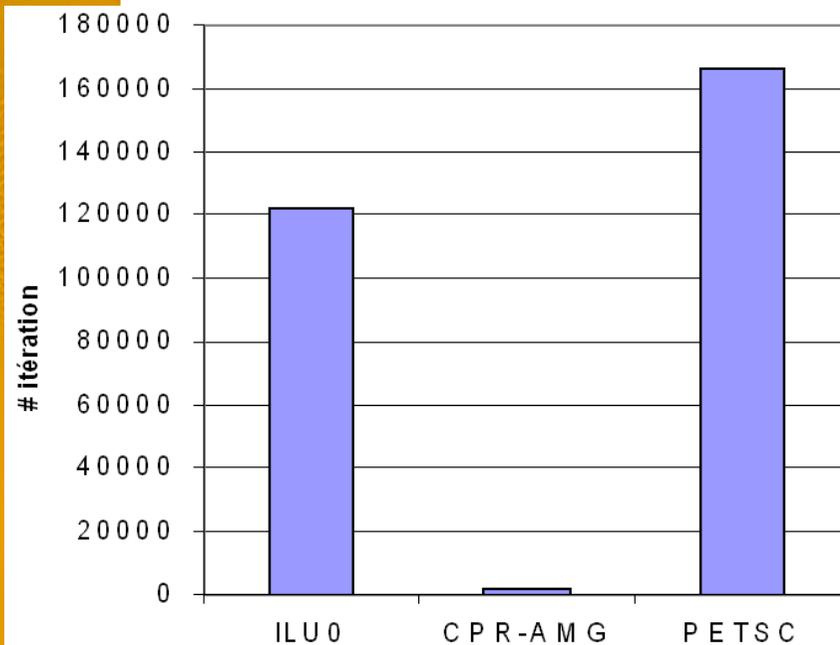


Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

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

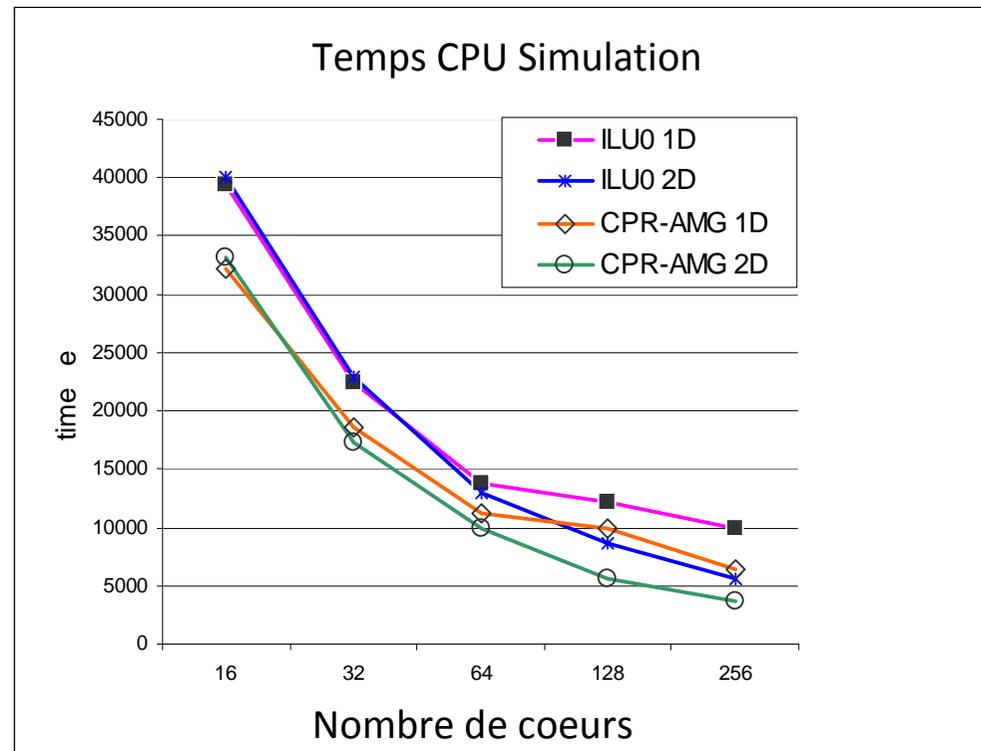
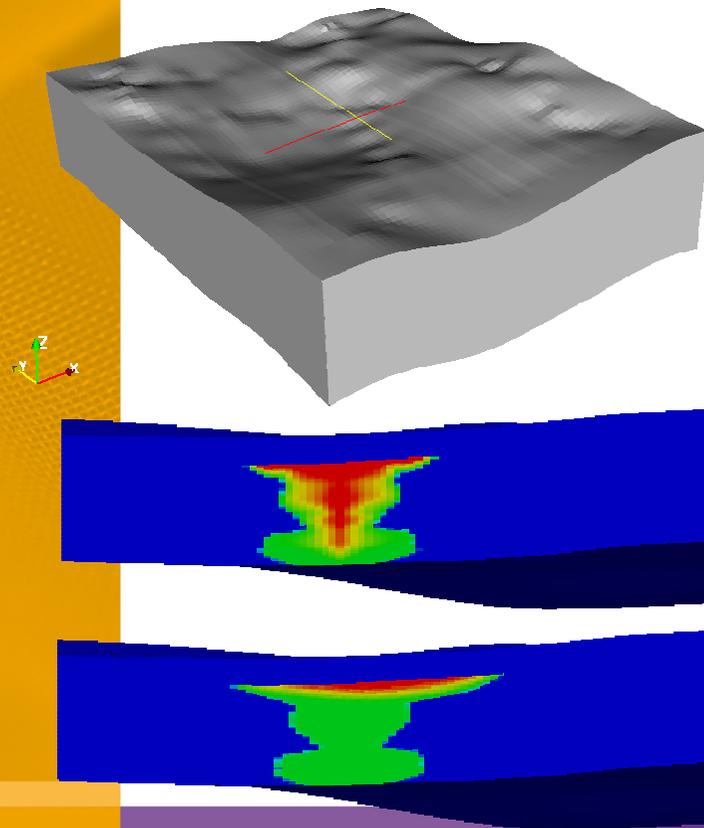


Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

Calcul intensif et performances

Cas Test Bassin Parisien (Effets d'échelle)

- Ecoulement Diphasique W-G

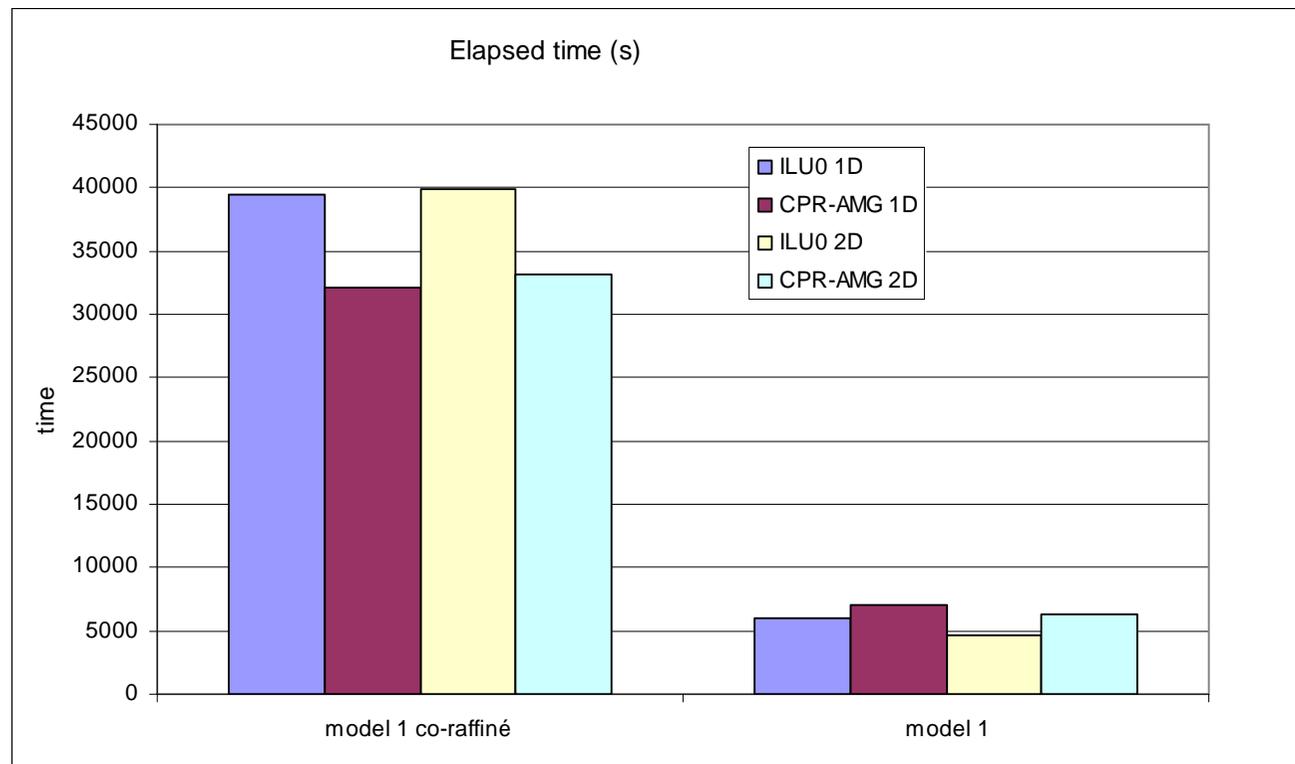


Ressources allouées par GENCI – Calculs sur Jade au CINES

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



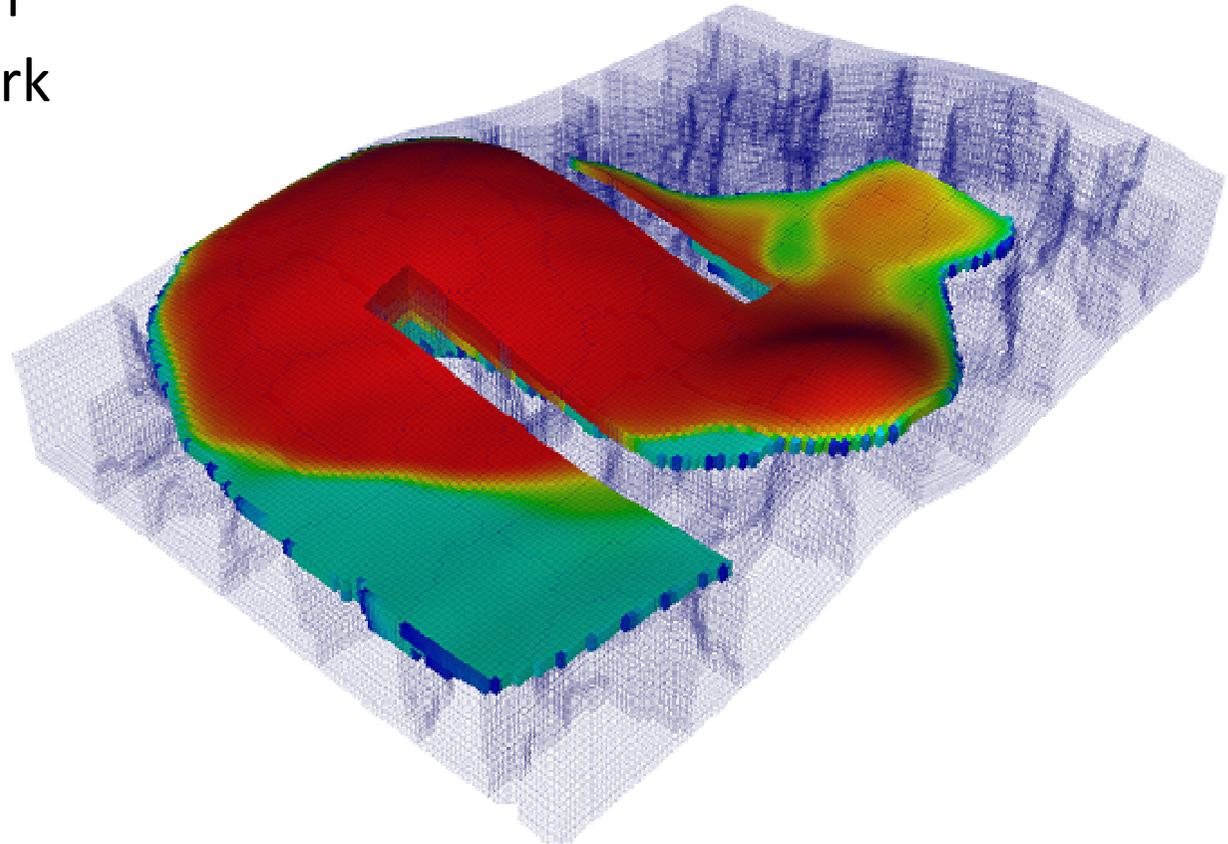
Exercice de transport réactif SHPCO₂



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

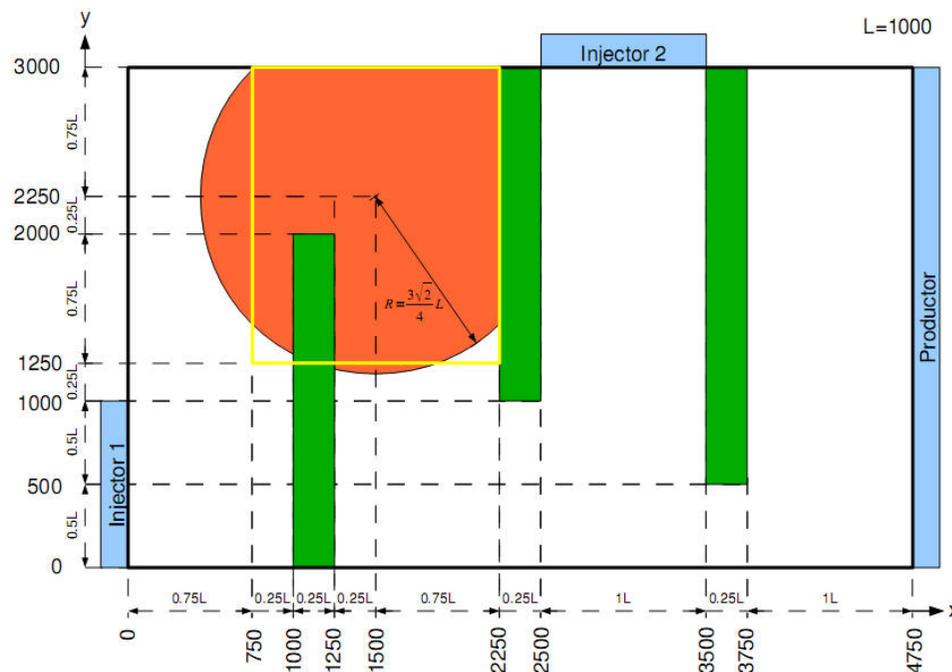


Illustration : Géométrie 2D

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

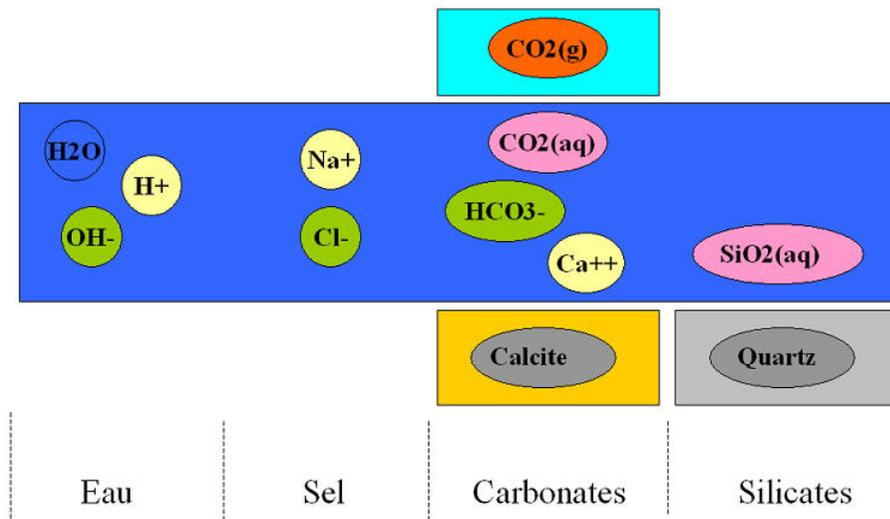
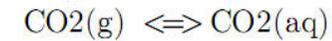


Illustration : Structure du système compositionnel

Req 1. Hydrolyse de l'eau



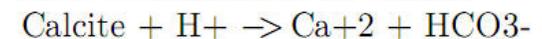
Req 2. Dissolution de CO₂(g) dans l'eau



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

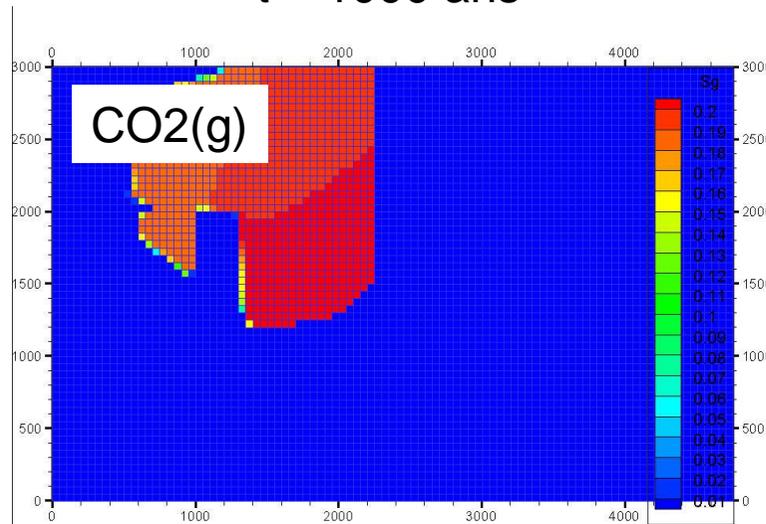
Contribution des équipes du projet

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

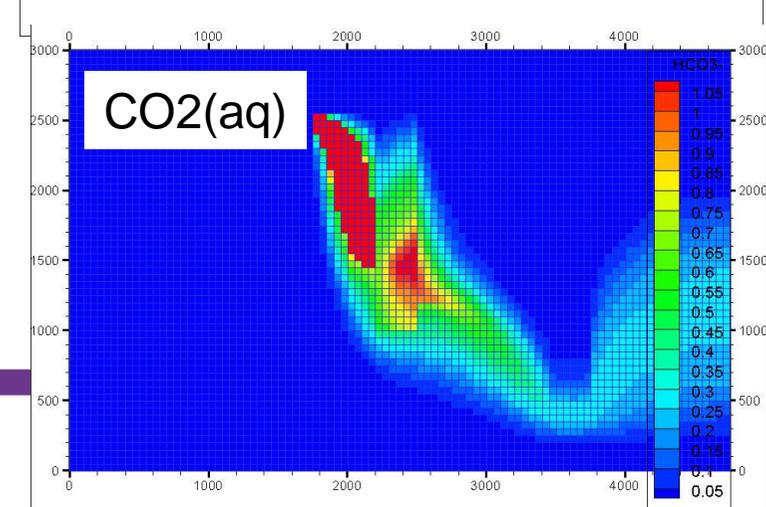
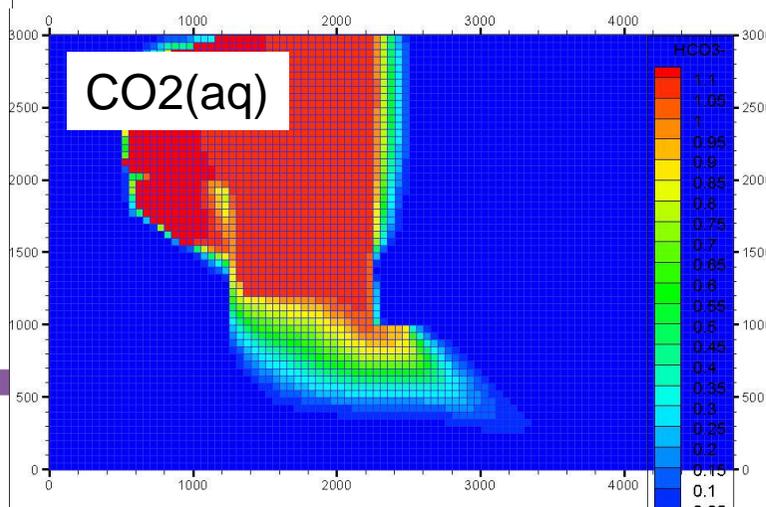
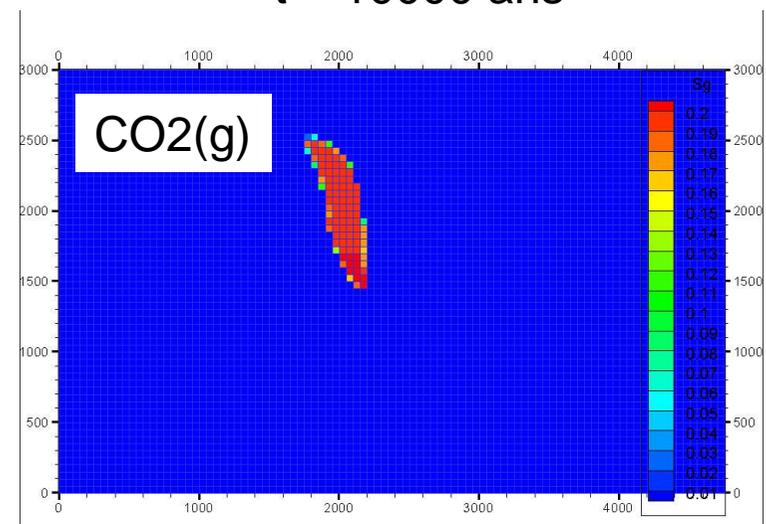
Exercice transport réactif SHPCO2

Validation : solution de référence à différents instants

t = 1000 ans

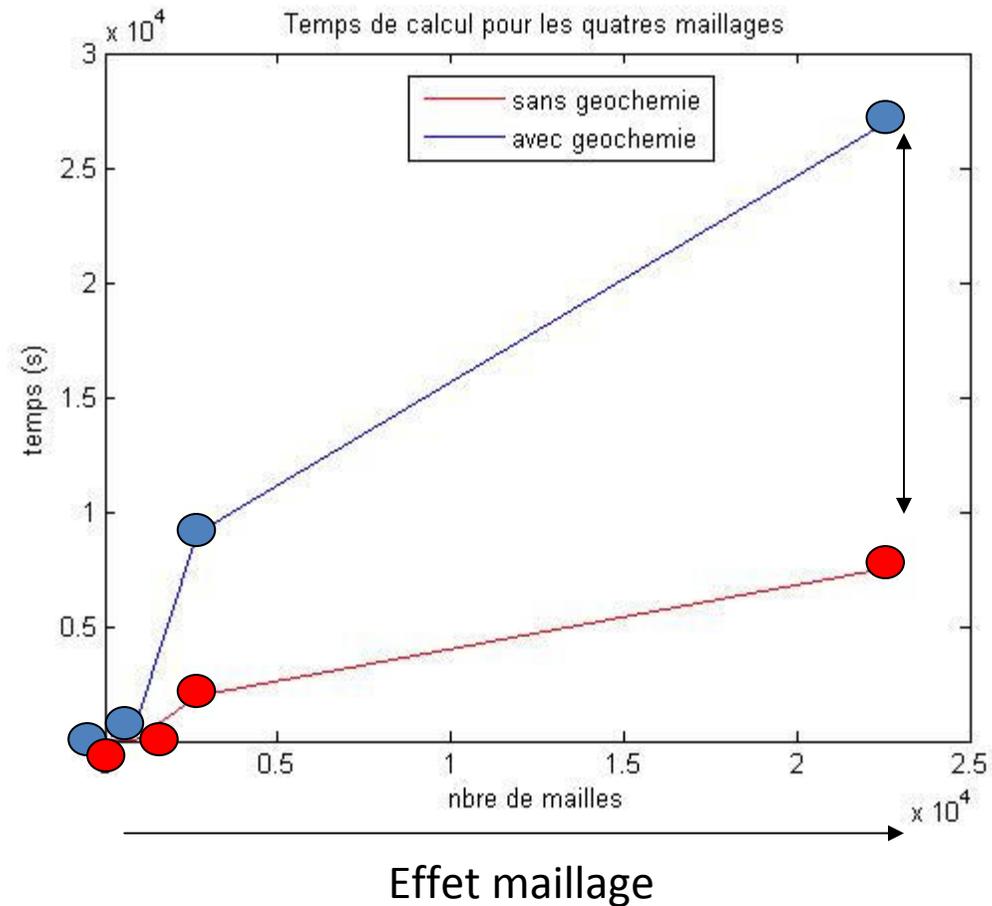


t = 10000 ans



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