

Regione Toscana  
Accordo di Programma Quadro Ricerca e trasferimento tecnologico per il sistema  
produttivo  
III Accordo integrativo



## Rapporto finale WP4

*Pacco di lavoro:*

WP.4- Modelli numerici  
Task 4.1 - Studio del problema numerico  
Task 4.2 - Analisi comparata con sw commerciale  
Task 4.3 - Scrittura del modello numerico  
Task 4.4 - Test di robustezza del codice

*A cura di:*

CINIGeo - Consorzio Interuniversitario Nazionale per l'Ingegneria  
delle Georisorse - Università di Bologna  
DIPMAT - Dipartimento di Matematica - Università di Firenze  
DSI - Dipartimento di Sistemi e Informatica - Università di Firenze  
MICC - Media Integration and Communication Center - Università di  
Firenze

*Data compilazione:* Dicembre 2010

## Indice

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1. Introduzione.....</b>   | <b>3</b>  |
| <b>2. Elementi di simulazione di bacini geotermici.....</b>                     | <b>3</b>  |
| <b>3. Stato dell' arte dei simulatori di bacini geotermici.....</b>             | <b>4</b>  |
| 3.1. Comparazione dei modelli.....  | 4         |
| 3.2. Innovazioni e sviluppi futuri.....   | 5         |
| 3.3. Panoramica dei principali simulatori geotermici.....                       | 5         |
| 3.3.1. TOUGH2.....  | 5         |
| 3.3.2. TETRAD.....  | 6         |
| 3.3.3. STAR.....  | 7         |
| 3.3.4. FEHM.....  | 7         |
| 3.3.5. HYDROTHERM.....  | 8         |
| 3.4. Schema di riepilogo.....   | 10        |
| 3.5. Simulatore geotermico adottato.....  | 10        |
| <b>4. Codice di simulazione utilizzato: iTOUGH2.....</b>                        | <b>12</b> |
| 4.1. File di input per TOUGH2.....  | 12        |
| 4.2. File di output di iTOUGH2.....   | 17        |
| <b>5. Sviluppo di un nuovo codice di calibrazione del modello numerico.....</b> | <b>17</b> |
| 5.1. Algoritmo di ottimizzazione per la simulazione inversa.....                | 17        |
| 5.2. Soluzione proposta.....  | 18        |
| 5.3. Il metodo delle basi radiali per l'ottimizzazione globale.....             | 18        |
| 5.4. Dettagli implementativi.....   | 19        |
| 5.5. Interfacciamento con iTOUGH2.....  | 20        |
| <b>6. La termodinamica dei fluidi geotermici.....</b>                           | <b>20</b> |
| 6.1. Un approccio rigoroso.....   | 21        |
| 6.2. Definizioni e relazioni termodinamiche.....                                | 21        |
| 6.3. Descrizione di metodo di calcolo del flash.....                            | 24        |
| 6.3.1. Analisi di stabilità.....  | 26        |
| 6.4. L'equazione di stato Peng-Robinson.....                                    | 27        |
| 6.5. Programma di attività.....   | 29        |
| <b>7. Pre &amp; Post Processing per iTOUGH2.....</b>                            | <b>30</b> |
| 7.1. Il problema della creazione e gestione della griglia.....                  | 30        |
| 7.2. GRASS.....   | 31        |
| 7.2.1. Introduzione al software.....  | 31        |
| 7.2.2. Applicazioni e sviluppo.....   | 31        |
| 7.2.3. Generazione del modello numerico.....                                    | 32        |
| 7.3. AMESH.....   | 36        |
| 7.3.1. File di input di AMESH.....  | 37        |

---

|   |           |
|---|-----------|
| 7.3.2. File di output di AMESH.....                                     | 37        |
| 7.4. Visualizzazione dell'output di TOUGH2.....                         | 37        |
| 7.5. iTough2Viewer.....   | 38        |
| <b>8. Procedura di simulazione.....</b>                                 | <b>42</b> |
| <b>9. Architettura server / client ed interfaccia grafica.....</b>      | <b>43</b> |
| <b>10. Casi studio per la verifica della robustezza dei codici.....</b> | <b>44</b> |
| 10.1. Modello 1D.....   | 45        |
| 10.2. Stato Naturale del bacino 3D di Larderello.....                   | 45        |
| 10.2.1. Risultati delle simulazioni.....                                | 47        |
| <b>11. Modello ENEL del bacino di Larderello e Travale.....</b>         | <b>47</b> |
| <b>12. Riferimenti Bibliografici.....</b>                               | <b>49</b> |

## 1. Introduzione

Questo documento espone le attività svolte nell'ambito del WP4.

Dopo una breve introduzione sui concetti della simulazione dei bacini geotermici, si esamina lo stato dell'arte dei simulatori di tali serbatoi. A seguire, si descrivono le caratteristiche principali del simulatore iTOUGH2, impiegato in questa ricerca, ed i relativi strumenti di Pre & Post Processing, creati e implementati ad hoc, e la procedura per la creazione e la gestione dei file necessari alla simulazione dei bacini.

Infine, sono trattati alcuni esempi pratici di simulazione, utilizzati per la verifica del corretto funzionamento del flusso di lavoro implementato.

## 2. Elementi di simulazione di bacini geotermici

Lo schema tipico di impiego dei modelli numerici può essere riassunto come segue:

- a) definizione del "*modello geologico*" del serbatoio (geometria, distribuzione spaziale delle caratteristiche petrofisiche, delle saturazioni iniziali,...);
- b) individuazione dei parametri termodinamici dei fluidi di serbatoio;
- c) definizione della grigliatura più appropriata per suddividere in blocchi il giacimento;
- d) "inizializzazione" del modello, e cioè assegnazione a ciascun blocco di modello dei valori locali iniziali dei parametri petrofisici, termodinamici e fluidodinamica della roccia e dei fluidi;
- e) simulazione inversa: calibrazione dei parametri del modello attraverso l'"History Matching". In tale fase il modello viene utilizzato allo scopo di riprodurre la storia passata, confrontando quindi il risultato del calcolo con i dati raccolti ai pozzi. L'obiettivo è di ottenere, attraverso opportune modifiche dei parametri, un modello di giacimento coerente con i dati di produzione noti; il modello che riproduce la storia passata viene definito "validato";
- f) previsione del comportamento del bacino geotermico in risposta ad uno o più programmi futuri di coltivazione (simulazione in "forward mode").

Un aspetto che deve essere evidenziato è che il modello validato ottenuto attraverso il processo di history matching non è necessariamente unico. In altre parole, possono esistere diversi modelli (e cioè distribuzioni spaziali di parametri)

che riproducono, entro i limiti degli errori da cui sono affette le misure di campo, la storia passata del serbatoio.

L'incertezza su alcuni parametri del serbatoio, la presenza e ubicazione di barriere impermeabili, comporta la necessità di valutare, mediante simulazioni, l'influenza che ipotesi diverse su tali parametri hanno sulla distribuzione delle grandezze simulate (sensitivity analysis). Questi "*studi di sensibilità*", sull'influenza dei parametri dotati di minor precisione conoscitiva, forniscono un quadro più completo del comportamento del serbatoio.

Nell'ambito della simulazione dei bacini geotermici, innanzitutto si calibra il modello con la simulazione dello stato naturale quindi, noti i parametri di produzione si passa all'history matching.

Successivamente, per la previsione della coltivazione, si ipotizza la realizzazione di nuovi pozzi ed una opportuna strategia di coltivazione, verificando che il trend previsto per il declino di pressione sia sempre compatibile con l'estrazione necessaria per lo sviluppo del progetto in esame. In questo caso vengono solitamente introdotte le curve caratteristiche tipiche per i nuovi pozzi, per prevederne la portata possibile in funzione del declino accettabile.

### **3. Stato dell' arte dei simulatori di bacini geotermici**

I simulatori più utilizzati per la realizzazione di modelli 3D complessi di bacini geotermici sono:

- STAR
- TETRAD
- TOUGH2
- FEHM
- HYDROTHERM

Tra i più diffusi, TETRAD e STAR utilizzano una mesh rettangolare regolare, mentre TOUGH2 può gestire mesh generiche non strutturate.

#### **3.1. Comparazione dei modelli**

Il confronto tra i simulatori finora sviluppati è relativamente difficile perché le previsioni dei modelli più complessi sono troppo recenti e poco documentati. Inoltre le previsioni dei primi modelli non sono verificabili a causa di variazioni nelle modalità di gestione dei campi geotermici studiati.

### **3.2. Innovazioni e sviluppi futuri**

Inizialmente, il fluido era idealizzato come acqua pura. Successivamente i modelli matematici dei simulatori sono stati raffinati introducendo la presenza di CO<sub>2</sub>, di sali disciolti, di fenomeni di interazioni tra specie chimiche disciolte e gassose, sistemi multifase e multicomponente.

La tecnica della simulazione inversa ha consentito di migliorare la calibrazione automatica dei parametri del modello (*history matching*), ed ha stimolato, parallelamente, lo sviluppo di codici per sistemi multiprocessore per soddisfare la maggior richiesta di potenza di calcolo.

Inoltre, si continuano a migliorare gli algoritmi numerici per aumentare l'efficienza dei modelli e la descrizione dei parametri caratteristici dei giacimenti indagati.

Interfacce sempre più intuitive consentono di integrare la simulazione e la creazione di griglie, la preparazione e visualizzazione degli input e degli output.

Una serie di database sono stati sviluppati appositamente per le applicazioni geotermiche.

### **3.3. Panoramica dei principali simulatori geotermici**

#### *3.3.1. TOUGH2*

È un programma di simulazione numerica multiuso per flusso di massa e calore multifase e multicomponente in mezzi porosi e fratturati, sviluppato al Laboratorio Nazionale Lawrence, Berkeley, California (Pruess, 1991).

È scritto in FORTRAN77 e può essere utilizzato su diverse piattaforme (Linux, Windows, MacIntosh). Il programma è composto da un core centrale e da vari moduli "EOS" ("*equation of state*"): ciascun modulo descrive condizioni termodinamiche per problemi di flusso nel sottosuolo di fluidi con diverse composizioni e sottoposti a condizioni termodinamiche differenti. Questo approccio, garantisce elevata flessibilità al programma che trova applicazioni in svariati campi della ricerca applicata per la soluzione di problemi di flusso nel sottosuolo.

La discretizzazione spaziale è realizzata direttamente dalla forma integrale delle equazioni caratteristiche (IFDM). Questo metodo evita qualsiasi riferimento a sistemi di coordinate globali e consente la discretizzazione irregolare (non ortogonale) del dominio considerato.

Questo codice consente la simulazione di geometrie 1D, 2D, 3D per mezzi porosi o fratturati. I processi di trasferimento di massa e calore sono perfettamente accoppiati.

Una delle caratteristiche principali di TOUGH2 è l'uso del metodo MINC (Multiple Interactive Continua), che consente il partizionamento sequenziale della matrice rocciosa e permette di simulare il transitorio di temperatura e pressione tra la roccia incassante ed il fluido iniettato (in presenza di elevati gradienti di temperatura tra roccia e fluido).

Le equazioni utilizzate in TOUGH2 sono:

- bilancio di massa e calore:

$$\frac{d}{dt} \int_V M^{(k)} dV = \int_{\Gamma} \bar{F}^{(k)} \cdot \bar{n} d\Gamma + \int_V q^{(k)} dV \quad (3.1)$$

- flusso di massa (Legge di Darcy):

$$F_{\beta} = -k \frac{k_{r\beta}}{\mu_{\beta}} \rho_{\beta} (\nabla P_{\beta} - \rho_{\beta} \bar{g}) \quad (3.2)$$

- flusso diffusivo:

$$f_{\beta}^k = -\phi \tau_{\beta} \rho_{\beta} \tau_{\beta} d_{\beta}^k \nabla X_{\beta}^k \quad (3.3)$$

È sicuramente lo strumento più utilizzato per la simulazione di reservoir geotermici.

Un'interfaccia tra TOUGH2 e Fracman (Golder Associates) consente di generare una mesh di fratture discretizzate, che sono rappresentate da elementi triangolari 2D che intersecano la griglia 3D della matrice rocciosa.

Non vengono considerati gli effetti di canalizzazione del flusso né gli effetti delle sollecitazioni sulle fratture

### 3.3.2. TETRAD

È un simulatore numerico alle differenze finite inizialmente progettato per applicazioni oil & gas, e successivamente modificato per la modellazione di reservoir geotermici, sviluppato da Vinsome e Shook.

Può usare modelli 1D, 2D, 3D di flusso di massa e calore in un mezzo poroso o fratturato e consente di partizionare il dominio in un sistema a doppia porosità/permeabilità (fratture e matrice rocciosa), specificando le fratture nel sistema.

L'interazione tra matrice e fratture è descritta dalla formulazione di Warren e Root (1963).

Con il “raffittimento locale della griglia” è possibile partizionare il dominio in aree più e meno definite, per migliorare la discretizzazione. Diversamente dal MINC, non consente di modellare il transitorio delle pressioni e delle temperature.

Non esiste una diretta correlazione tra l'apertura delle fratture e le sollecitazioni, e nemmeno una relazione tra l'apertura delle fratture e la loro conduttività.

Applicazioni tipiche sono i modelli di reservoir geotermici.

### 3.3.3. *STAR*

È un simulatore alle differenze finite 1D, 2D, 3D di serbatoi geotermici sviluppato dalla Maxwell Technologies di San Diego, California.

Contiene tutte le funzioni tipiche dei simulatori di serbatoi geotermici e fornisce tre differenti descrizioni del flusso di massa e calore:

- mezzo poroso;
- matrice impermeabile (per simulare il transitorio del flusso di calore);
- matrice permeabile (per simulare il transitorio del flusso di massa e calore tra fratture e matrice rocciosa);

In entrambe le rappresentazioni della matrice (permeabile ed impermeabile), i blocchi sono descritti da una sfera rocciosa equivalente suddivisa in elementi concentrici per rappresentare il transitorio dei flussi di massa e calore. La configurazione matrice permeabile può essere paragonata al metodo MINC di TOUGH2.

Applicazioni tipiche di STAR sono le simulazioni dei progetti di recupero di reservoir idrotermali, gas naturale, olio pesante.

Analogamente agli altri simulatori, non vengono considerati gli effetti di canalizzazione del flusso né gli effetti delle sollecitazioni sulle fratture.

### 3.3.4. *FEHM*

Il codice agli elementi finiti del trasporto di massa e calore (Finite Elements Heat and Mass transfer code) è un programma per la simulazione di flussi multi-componente, multi-fase, non isotermici in mezzi porosi. (Dash et al., 1997; Zyvoloski et al., 1997).

Le equazioni del trasporto di massa e calore per flusso multi-fase in mezzi porosi e permeabili vengono risolti utilizzando il metodo agli elementi finiti. La



permeabilità e la porosità del mezzo sono funzioni della pressione e della temperatura.

Si possono simulare geometrie 2D, 2D radiali, 3D, e gestire gli effetti accoppiati del trasporto di massa e calore.

Attraverso modelli doppia porosità/permeabilità o doppia porosità si può simulare il flusso dipendente dal sistema di fratture. La scelta del modello è legata alla natura del transitorio tipico del sistema studiato (flusso per fratture dominante sul flusso per porosità della matrice o ugual contributo dei due fenomeni).

L'equazione del flusso di massa e della conduzione del calore utilizzata è:

$$-\nabla(\bar{K}P) + q + \frac{\partial A_e}{\partial t} = 0 \quad (3.4)$$

e le equazioni di conservazione della massa e del calore utilizzate sono le seguenti:

$$-\nabla \cdot (D_{mv} \nabla P_v) - \nabla \cdot (D_{ml} \nabla P_l) + q_m + \frac{\partial}{\partial z} g (D_{mv} \rho_v + D_{ml} \rho_l) + \frac{\partial A_m}{\partial t} = 0 \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot \bar{L} (D_{el} \nabla P_l) - \nabla \cdot \bar{L} (K \nabla T) + q_e + \frac{\partial}{\partial z} g (D_{ev} \rho_v + D_{el} \rho_l) + \frac{\partial A_e}{\partial t} = 0 \quad (3.6)$$

Un'applicazione tipica di FEHM è l'analisi di un reservoir 2D con flusso multi-fase per il DOE Comparison Project. Il problema del trasporto di massa e calore in un sistema a due fasi (acqua/acqua e vapore) è caratterizzato da un contorno mobile a due fasi.

Come TOUGH2, è interfacciabile con Fracman per la discretizzazione delle fratture.

### 3.3.5. HYDROTHERM

Utilizza il metodo delle differenze finite per simulare il flusso multi-fase di acqua pura e calore a temperature comprese tra 0 e 1200°C e a pressioni comprese tra 0,05 e 1000 MPa.

Le equazioni di conservazione della massa e del calore sono espresse in termini di pressione ed entalpia:

$$\frac{\partial [n(S_w \rho_w + S_s \rho_s)]}{\partial t} - \nabla \cdot \left[ \frac{kk_{rs} \rho_s}{\mu_s} \cdot (\nabla P - \rho_s g \nabla D) \right] -$$

$$\nabla \cdot \left[ \frac{kk_{rw}\rho_w}{\mu_w} \cdot (\nabla P - \rho_w g \nabla D) \right] - R_m = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial [n(S_w \rho_w H_w + S_s \rho_s H_s) + (1 - n) \rho_r H_r]}{\partial t} - \nabla \cdot \left[ \frac{kk_{rs}\rho_s H_s}{\mu_s} \cdot (\nabla P - \rho_s g \nabla D) \right] -$$

$$\nabla \cdot \left[ \frac{kk_{rw}\rho_w H_w}{\mu_w} \cdot (\nabla P - \rho_w g \nabla D) \right] - \nabla \cdot K_m \nabla T - R_H = 0 \quad (3.8)$$

In queste equazioni si assume implicitamente che:

- sia valida una formulazione bi-fase della legge di Darcy;
- la roccia e l'acqua sono in equilibrio termico;
- gli effetti della pressione capillare e del trasporto di calore per dispersione trascurabile.

Le equazioni di stato utilizzate sono perfettamente accoppiate ed altamente non lineari. Il simulatore utilizza l'iterazione di Newton - Raphson per determinare i coefficienti non lineari.

### 3.4. Schema di riepilogo

| Caratteristiche | Descrizione      |                 |                 | Discretizzazione |                   |                        | Geometria |    |            |    | Discretizzazione fratture |               | Studio del transitorio fratture - matrice |                       |                    |  |
|-----------------|------------------|-----------------|-----------------|------------------|-------------------|------------------------|-----------|----|------------|----|---------------------------|---------------|---|-----------------------|--------------------|--|
| Simulatore      | Sede di sviluppo | Anno di nascita | Ultima versione | Elementi finiti  | Differenze finite | Diff. finite integrali | 1D        | 2D | 2D radiale | 3D | Fracman*                  | Warren e Root | MINC                                      | Local Grid Refinement | Matrice permeabile | porositàModello doppia permeabilità doppia |
|                 |                  |                 |                 |                  |                   |                        |           |    |            |    |                           |               |   |                       |                    |  |
|                 | TOUGH2           | 1               | 1991            | 1999             |                   |                        | X         | X  | X          | X  | X                         |               | X   | X                     |                    |  |
|                 | TETRAD           | 2               |                 |                  |                   | X                      |           | X  | X          |    | X                         |               | X   | X                     |                    |  |
|                 | STAR             | 3               |                 |                  |                   | X                      |           | X  | X          |    | X                         |               |   |                       | X                  |  |
|                 | FEHM             | 4               |                 |                  | X                 |                        |           |    | X          | X  | X                         | X             |   |                       |                    |  |
| HYDROTHERM      | 5                | 1994            |                 |                  | X                 |                        | X         | X  | X          | X  |                           |               |   |                       |                    |  |

1. Laboratorio Nazionale Lawrence Berkeley
2. ADA International Consulting, Calgary, Canada (commercializzazione)
3. Maxwell Technologies di San Diego, California
4. Los Alamos National Laboratory
5. U.S. Geological Survey

\* interfaccia con applicazione Golder Associates

### 3.5. Simulatore geotermico adottato

La ricerca, la coltivazione di sistemi geotermici è un problema molto complesso la cui realizzazione implica la cooperazione di diverse professionalità che adottano differenti procedure operative che implicano talora procedimenti apparentemente contraddittori. Ovviamente cercare di approntare uno

strumento software (il simulatore) di supporto alla ricerca e coltivazione/gestione di serbatoi geotermici risente implicitamente di tali contraddizioni.

Anche la sola analisi fisico – matematica del problema è estremamente complessa, poiché coinvolge processi di trasporto di calore e di massa in un ambiente caratterizzato da interazioni non banali tra solido (sali e roccia), liquido (normalmente miscele di acqua, gas e sali disciolti) e gas ed è pesantemente limitata dalla scarsità e ambiguità (metodi di misura adottati) dei dati petrofisici disponibili.

In bacini geotermici caratterizzati da dimensioni medio grandi, quali quelli di interesse per il presente progetto, la corretta caratterizzazione dei parametri petrofisici (porosità, permeabilità, ecc.) comporta onerose (in termini di tempo di calcolo) e complesse operazioni di sintonizzazione del modello mediante tecniche inverse (history matching). Questa considerazione comporta che lo strumento adottato debba gestire in modo automatico il problema inverso e suggerisce l'utilizzazione di un codice che sia predisposto a lavorare in modo parallelo.

Negli anni si è sviluppato un ampio settore di ricerca scientifica in questo campo, che ha visto la nascita di numerosi modelli e relativi software di simulazione.

Sarebbe, pertanto, oltremodo gravoso e fortemente limitante in termini di tempo a disposizione del presente progetto, implementare ex-novo algoritmi risolutivi e codici di discretizzazione, quando sono disponibili sul mercato sw ampiamente testati e utilizzati.

Si è scelto di utilizzare il codice iTough2 in considerazione delle seguenti caratteristiche:

- è il software di simulazione geotermica maggiormente impiegato dalla comunità scientifica negli ultimi 20 anni (oltre il 50 % delle simulazioni);
- ha un'ampia comunità di ricercatori presso l'Università di Berkeley, dove il sw è stato sviluppato, che garantisce la manutenzione e ne cura lo sviluppo, e ricercatori italiani che hanno collaborato all'implementazione di alcuni suoi moduli;
- è un sw open source ben documentato, per cui le modifiche dedicate risultano relativamente facili da realizzare;
- esiste una versione specifica, iTough2, che implementa diversi algoritmi di inversione ed è già predisposta per il calcolo parallelo mediante l'utilizzo della libreria PVM, libreria che è open source e free;
- 
- adotta una struttura modulare molto flessibile che permette di adattarlo a nuovi sistemi/scenari modificando il modulo EOS che si occupa specificamente del bilancio termodinamico senza dover intervenire sull'intero codice

- ha un costo di licenza assolutamente competitivo se paragonato ad equivalenti programmi in commercio;

## 4. Codice di simulazione utilizzato: iTOUGH2

CINIGeo ha acquistato iTOUGH2, che è il software di simulazione inversa creato per TOUGH2.

iTOUGH2 integra come subroutine TOUGH2 e questo permette di eseguire, sullo stesso modello, sia le simulazioni in forward mode, che le simulazioni inverse. L'unico accorgimento particolare nelle simulazioni mediante TOUGH2 in forward mode, è l'utilizzo di un apposito file di input, come sarà spiegato successivamente.

La struttura a moduli "EOS" di iTOUGH2 è la medesima di TOUGH2.

Per lo studio dei bacini geotermici, sono stati utilizzati i moduli "EOS1" ed "EWASG":

- EOS1 permette di gestire sistemi monocomponente bifasici;
- EWASG ("Water, Salt, Gas) descrive il comportamento di bacini geotermici caratterizzati da fluidi salini e gas non condensabili.

Come detto precedentemente, allo stato attuale, le simulazioni effettuate si riferiscono alla ricostruzione dello stato naturale mediante il solo TOUGH2 in forward mode, in quanto, solo di recente sono pervenuti dati di produzioni storiche sufficienti per effettuare la simulazione inversa. Pertanto, lo studio dei bacini di Larderello/Travale e Monte Amiata, si è svolto nella sola fase di simulazione di riproduzione dello stato naturale.

### 4.1. File di input per TOUGH2

L'input di TOUGH2 è costituito da diversi file in formato ASCII:

- **nomefile.mes**: contiene i dati geometrici elaborati da AMESH;
- **nomefile.inp**: contiene le informazioni sui materiali (fluidi e rocce) e sulle loro condizioni iniziali, i parametri di simulazione (intervallo di tempo simulato, criteri di convergenza, etc);
- **nomefile.gen**: contiene le informazioni relative ai blocchi tra i quali avvengono scambi di energia e/o di massa. ;
- **nomefile.ini**: contiene le condizioni iniziali per determinati blocchi. ;

- **idir.in**: contiene i parametri necessari per la simulazione in avanti, ovvero per eseguire la sola simulazione in forward mode mediante TOUGH2

I nomi dei file sopraccitati si riferiscono alla versione di TOUGH2 per Linux. Il simulatore funziona alla stessa maniera anche nel S.O. Windows: alcuni file, pur avendo la medesima struttura e il medesimo formato, hanno nomi differenti (Linux→Windows):

- **nomefile.mes→MESH**
- **nomefile.gen→GENER**
- **nomefile.ini→INCON**

Di seguito (Figura 4.1. Schema riassuntivo del file nomefile.inp di TOUGH2), si riporta lo schema del file “nomefile.inp” (nome valido sia in Linux che Windows). Per una trattazione dettagliata si rimanda al manuale di TOUGH2.

| TOUGH2 INPUT FORMATS                                 |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|--|-----|---------|------|----------------|------|---------|------|-----------------|----|---------|--|--------|--|--------|--|---------|--|------------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| <b>TITLE</b>   |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>ROCKS</b>   |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| MAT  | NAD | DROK    |      | POR            |      | PER (1) |      | PER (2)         |    | PER (3) |  | CWET   |  | SPHT   |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| COM  |     | EXPAN   |      | CDRY           |      | TORTX   |      | GK              |    | XKD3    |  | XKD4   |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| IRP  |     | RP (1)  |      | RP (2)         |      | RP (3)  |      | RP (4)          |    | RP (5)  |  | RP (6) |  | RP (7) |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| ICP  |     | CP (1)  |      | CP (2)         |      | CP (3)  |      | CP (4)          |    | CP (5)  |  | CP (6) |  | CP (7) |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>MULTI</b> (optional)                              |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| NK   | NEQ | NPH     |      | NB             |      | NKIN    |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>START</b> (optional)                              |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| MOP: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4 |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>PARAM</b>   |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| KDATA  |     | MCYC    |      | MSEC           |      | MCYPR   |      | MOP (I), I=1,24 |    |         |  | TEXP   |  | BE     |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| TSTART   |     | TIMAX   |      | DELLEN or NDLT |      | DELTMX  |      | ELST            |    |         |  | GF     |  | REDLT  |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| DLT (1)  |     | DLT (2) |      | DLT (3)        |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  | DLT (M) |  | (M≤8*NDLT) |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| RE1  |     | RE2     |      | U              |      | WUP     |      | WNR             |    | DFAC    |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| DEP (1)  |     | DEP (2) |      | DEP (3)        |      | DEP (4) |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>SOLVR</b> (optional)                              |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| VATS   |     | ZPROCS  |      | JPROCS         |      | RITMAX  |      | CLOSUR          |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>RPCAP</b> (optional)                              |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| IRP  |     | RP (1)  |      | RP (2)         |      | RP (3)  |      | RP (4)          |    | RP (5)  |  | RP (6) |  | RP (7) |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| ICP  |     | CP (1)  |      | CP (2)         |      | CP (3)  |      | CP (4)          |    | CP (5)  |  | CP (6) |  | CP (7) |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>E L E M E</b>                                     |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| EL   | NE  | NSEQ    | NADD | MA1            | MA2  | VOLX    |      | AHTX            |    | PMX     |  | X      |  | Y      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>CONNE</b>   |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| EL1  | NE1 | EL2     | NE2  | NSEQ           | NADD | NAD2    | ISOT | D1              |    | D2      |  | AREAX  |  | BETAX  |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>GENER</b>   |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| EL   | NE  | SL      | NS   | NSEQ           | NADD | NADS    | LTAB | TYPE            | GX | EX      |  | HX     |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| F1(1)  |     | F1(2)   |      | F1(LTAB)       |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| F2(1)  |     | F2(2)   |      | F2(LTAB)       |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| F3(1)  |     | F3(2)   |      | F3(LTAB)       |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| <b>INCON</b>   |     |         |      |                |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1  |     | 2       |      | 3              |      | 4       |      | 5               |    | 6       |  | 7      |  | 8      |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| EL   | NE  | NSEQ    | NADD | PORX           |      |         |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| X1   |     | X2      |      | X3             |      | X4      |      |                 |    |         |  |        |  |        |  |         |  |            |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

| TOUGH2 INPUT FORMATS (continued) |            |                       |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
|----------------------------------|------------|-----------------------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-----------|--------|--------|--------|--------|-------------|
| INDOM                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| MAT                              |            |                       |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
|                                  |            | X1                    | X2     | X3     | X4     |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
| DIFFU                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
|                                  |            | FDDIAG(I,1), I=1, NPH |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
|                                  |            | FDDIAG(I,2), I=1, NPH |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
| SELEC                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| IE(1)                            | IE(2)      | IE(3)                 | IE(4)  | IE(5)  | IE(6)  | IE(7)  | IE(8)  | IE(9) | IE(10) | IE(11)    | IE(12) | IE(13) | IE(14) | IE(15) | IE(16)      |
| FE(1)                            | FE(2)      | FE(3)                 | FE(4)  | FE(5)  | FE(6)  | FE(7)  | FE(8)  |       |        |           |        |        |        |        |             |
| FE(9)                            | FE(10)     | FE(11)                | FE(12) | FE(13) | FE(14) | FE(15) | FE(16) |       |        |           |        |        |        |        |             |
| FE(17)                           |            |                       |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        | FE(8*IE(1)) |
| TIMES                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| ITI                              | ITE        | DELAF                 | TINTER |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
| TIS (1)                          | TIS (2)    | TIS (3)               |        |        |        |        |        |       |        | TIS (ITI) |        |        |        |        |             |
| MESHM                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| FOFT                             | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| EOFT                             |            |                       |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
| COFT                             | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| ECOFT                            |            |                       |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
| GOFI                             | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| EGOFI                            |            |                       |        |        |        |        |        |       |        |           |        |        |        |        |             |
| NOVER                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| ENDFI                            | (optional) | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |
| ENDCY                            |            | 1                     | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      | 7     | 8      |           |        |        |        |        |             |

Figura 4.1. Schema riassuntivo del file nomefile.inp di TOUGH2

Di seguito (Figura 4.2. Campo ELEME del file nomefile.mes e Figura 4.3. Campo CONNE del file nomefile.mes), vengono riportate due parti del file **nomefile.mes**, che contiene tutte le informazioni geometriche della griglia.

In questo file sono presenti i campi denominati con le keyword **ELEME** e **CONNE**. Sotto al campo ELEME sono riportati, a partire da sinistra, tutte le informazioni relative a tutti i blocchi della griglia, ovvero:

- nomi dei blocchi



- materiale di ciascun blocco
- volume del blocco ( $m^3$ )
- area di scambio termico ( $m^2$ )
- coordinate X, Y, Z del nodo rappresentativo di ciascun blocco
- strato di appartenenza del blocco (a partire dall'alto)

| ELEME |       |           |           |           |           |           |   |
|-------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|---|
| 2     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 3     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 7.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 4     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 1.250e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 5     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 1.750e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 6     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.250e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 7     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.750e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 8     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 3.250e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 9     | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 3.750e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 10    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 4.250e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 11    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 4.750e+03 | 2.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 12    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.500e+02 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 13    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 7.500e+02 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 14    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 1.250e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 15    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 1.750e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 16    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.250e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 17    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.750e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 18    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 3.250e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 19    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 3.750e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 20    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 4.250e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 21    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 4.750e+03 | 7.500e+02 | 5.000e+02 | 1 |
| 22    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.500e+02 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |
| 23    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 7.500e+02 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |
| 24    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 1.250e+03 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |
| 25    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 1.750e+03 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |
| 26    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.250e+03 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |
| 27    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 2.750e+03 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |
| 28    | ROC01 | 2.500e+52 | 2.500e+05 | 3.250e+03 | 1.250e+03 | 5.000e+02 | 1 |

Figura 4.2. Campo ELEME del file *nomefile.mes*

Il campo ELEME si chiude con una riga bianca e, successivamente, si ha il campo CONNE il quale contiene le informazioni relative alle interfacce di connessione tra i vari blocchi, ovvero:

- nomi dei blocchi interessati da una determinata connessione;
- coefficiente numerico che definisce la direzione della connessione, e che assume valore pari a:
  - 1** se la perpendicolare ha una componente maggiore lungo l'asse X;
  - 2** se la perpendicolare ha una componente maggiore lungo l'asse Y;
  - 3** se la perpendicolare è diretta lungo l'asse Z;
- distanza del nodo del primo blocco dall'interfaccia (m);
- distanza del nodo del secondo blocco dall'interfaccia (m);
- area dell'interfaccia ( $m^2$ );

- coseno dell' angolo tra la direzione dell'accelerazione di gravità e la congiungente i nodi dei blocchi.

|       |       |           |           |           |                     |        |
|-------|-------|-----------|-----------|-----------|---------------------|--------|
| 3632  | ROC04 | 2.500e+07 | 2.500e+05 | 2.750e+03 | 4.750e+03-2.950e+03 | 36     |
| 3633  | ROC04 | 2.500e+07 | 2.500e+05 | 3.250e+03 | 4.750e+03-2.950e+03 | 36     |
| 3634  | ROC04 | 2.500e+07 | 2.500e+05 | 3.750e+03 | 4.750e+03-2.950e+03 | 36     |
| 3635  | ROC04 | 2.500e+07 | 2.500e+05 | 4.250e+03 | 4.750e+03-2.950e+03 | 36     |
| 3636  | ROC04 | 2.500e+07 | 2.500e+05 | 4.750e+03 | 4.750e+03-2.950e+03 | 36     |
| CONNE |       |           |           |           |                     |        |
| 2     | 12    | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e-01           |        |
| 2     | 3     | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e-01           |        |
| 3     | 13    | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e-01           |        |
| 3     | 4     | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e-01           |        |
| 99    | 100   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e-01           |        |
| 100   | 101   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e-01           |        |
| 103   | 113   | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 103   | 104   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 103   | 2     | 3         | 5.000e+01 | 5.000e-04 | 2.500e+05           | -1.000 |
| 104   | 114   | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 104   | 105   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 104   | 3     | 3         | 5.000e+01 | 5.000e-04 | 2.500e+05           | -1.000 |
| 105   | 115   | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 105   | 106   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 105   | 4     | 3         | 5.000e+01 | 5.000e-04 | 2.500e+05           | -1.000 |
| 106   | 116   | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 106   | 107   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 106   | 5     | 3         | 5.000e+01 | 5.000e-04 | 2.500e+05           | -1.000 |
| 107   | 117   | 2         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 107   | 108   | 1         | 2.500e+02 | 2.500e+02 | 5.000e+04           |        |
| 107   | 6     | 3         | 5.000e+01 | 5.000e-04 | 2.500e+05           | -1.000 |

Figura 4.3. Campo CONNE del file *nomefile.mes*

## 4.2. File di output di iTOUGH2

Al termine della simulazione, che può avere durata anche dell'ordine di qualche ora, iTOUGH2 crea un file ASCII denominato **nomefile.out** (stesso nome sia sotto Windows che sotto Linux) che contiene un riassunto di tutti i parametri di simulazione imposti in input, e tutti i valori delle grandezze fisiche, relative ad ogni blocco ed a tutti gli scambi di massa ed energia attraverso le superfici di connessione. Tali informazioni vengono fornite per ciascun istante temporale del quale si è deciso di visualizzare i risultati.

## 5. Sviluppo di un nuovo codice di calibrazione del modello numerico

### 5.1. Algoritmo di ottimizzazione per la simulazione inversa

Nell'ambito del progetto MAC-GEO, una delle tematiche di studio riguarda la possibilità di sviluppare algoritmi per la calibrazione automatica dei parametri del simulatore utilizzato nello studio dei campi geotermici di Larderello e Monte Amiata. Il problema risulta essere un tipico problema di ottimizzazione di una funzione di errore fra i dati simulati e quelli disponibili sperimentalmente. Questa funzione, le cui variabili sono i parametri del simulatore (o un loro sottoinsieme),

non ha espressione nota e non sono disponibili informazioni di ordine superiore (come il gradiente). Inoltre va tenuto conto che i tempi di valutazione della funzione obiettivo sono molto grandi, essendo necessaria una intera simulazione.

## **5.2. Soluzione proposta**

Dopo l'analisi dei metodi già presenti in letteratura (si veda la relazione intermedia del WP3) e valutando il contesto applicativo, la soluzione individuata è quella di sviluppare una versione ad-hoc dell'algoritmo basato su funzioni a base radiale (di seguito funzioni rbf). Questa soluzione presenta i seguenti vantaggi:

1. il metodo scelto non richiede il calcolo esplicito del gradiente;
2. la sua implementazione può essere adattata al particolare problema in esame;
3. la metodologia basata su funzioni rbf è di recente introduzione ed è un campo di ricerca molto attivo;

Gli algoritmi basati su approssimanti costruite con basi radiali sono pensati per esplorare globalmente la regione ammissibile e sono in genere adatti a problemi in cui la funzione obiettivo sia molto costosa.

E' stato deciso di interfacciare direttamente il nuovo modulo (denominato di seguito RBFOPT) con il simulatore iTOUGH2 adottato nell'ambito del progetto MAC-GEO, in quanto questo ne facilita l'utilizzo e permette di sfruttare direttamente le routine di iTOUGH2 in modo assolutamente analogo agli altri moduli di ottimizzazione già presenti.

Per quanto riguarda questi ultimi, si tratta di algoritmi di ottimizzazione ben noti in letteratura ma non ritenuti adatti a problemi in cui il calcolo della funzione obiettivo (ed a maggior ragione del gradiente stimato con differenze finite) sia particolarmente onerosa, come appunto nel caso di un simulatore.

Inoltre, è in corso una progressiva integrazione in modo da poter configurare RBFOPT direttamente dal file di configurazione di iTOUGH2 (al momento, i parametri di settaggio sono forniti in file separato).

## **5.3. Il metodo delle basi radiali per l'ottimizzazione globale**

L'uso di basi radiali per l'ottimizzazione globale prevede, dato un insieme di valutazioni della funzione obiettivo, la costruzione di una interpolante tramite funzioni a base radiale (RBF in seguito) da usare come surrogato della funzione obiettivo ed aggiornabile ad ogni nuova valutazione.

Una volta costruita l'approssimante si aprono due diverse strade di utilizzo:

1. si può analizzare la rbf per decidere in quale punto campionare di nuovo la funzione obiettivo: questo di solito si effettua minimizzando una funzione ausiliaria (detta bumpiness) che misura di quanto la rbf va modificata per farle assumere un certo valore target;
2. in alternativa, ottimizzare direttamente il modello surrogato della funzione obiettivo, riservandosi di ricalcolare la funzione ed aggiornare la rbf negli ottimi del modello surrogato;

In entrambi i casi, la composizione della rbf passa per la risoluzione di un sistema lineare simmetrico e denso che ne rappresenta il principale costo e criticità computazionale.

#### **5.4. Dettagli implementativi**

Il modulo RBFOPT è stato implementato utilizzando una libreria per lo sviluppo di algoritmi di ottimizzazione globale denominata gol++, sviluppata presso il GOL-DSI dell'Università degli Studi di Firenze.

La libreria gol++ è per la maggior parte sviluppata in C++, con eccezione di alcune parti in FORTRAN che implementano algoritmi di ottimizzazione locale sviluppati da soggetti terzi. Nel complesso comunque gol++ risulta open-source. Per quanto riguarda lo specifico progetto MAC-GEO, è stata sviluppata una estensione di gol++, denominata rbf\_toolkit, che permette di definire algoritmi di tipo RBF. In questo modo il codice potrà essere riutilizzato in futuro essendo stato sviluppato in modo generico.

Nell'rbf\_toolkit troviamo implementati la funzione a base radiale (rbf) ed i componenti di base che la definiscono, ovvero la coda polinomiale e le funzioni di base (thin spline, spline cubiche).

Per quanto riguarda il calcolo dei coefficienti della rbf, particolare attenzione è stata fatta per quanto riguarda la risoluzione del sistema lineare, adottando la routine lapack sytrs per sistemi indefiniti simmetrici.

Nel caso si voglia utilizzare il metodo nella sua forma standard vengono forniti anche la funzione di bumpiness, la routine per il suo aggiornamento e le regole per effettuarlo più comuni in letteratura.

Il calcolo della bumpiness risulta piuttosto oneroso per la necessità di calcolare anche la rbf e di risolvere sistemi analoghi a quelli necessari per creare la rbf stessa. Per migliorare l'efficienza, si è deciso di precalcolare la fattorizzazione della matrice del sistema in modo da invocare il risolutore sytrs con la matrice già fattorizzata, risparmiando considerevolmente.

L'algoritmo del modulo RBFOPT, ancora in fase di sperimentazione, viene poi ottenuto utilizzando i componenti di gol++. La strategia risolutiva è ancora in fase di definizione e gli esperimenti effettuati fino ad ora sono serviti solo a validare l'implementazione dei componenti.

### **5.5. Interfacciamento con iTOUGH2**

Per interfacciare il modulo RBFOPT con iTOUGH2 si è reso necessario lo sviluppo di alcuni moduli di interfaccia in modo da realizzare un dialogo bidirezionale:

1. iTOUGH2 deve poter invocare direttamente RBFOPT e passargli i parametri di interesse;
2. il modulo RBFOPT deve poter eseguire le simulazioni per calibrare il modello; in pratica, integrando i due software, si è potuto usufruire direttamente della stessa funzione obiettivo utilizzata dagli ottimizzatori di iTOUGH2 e quindi una assoluta uniformità di utilizzo;

L'implementazione ha quindi riguardato:

1. una procedura FORTRAN che venga chiamata da iTOUGH2, in modo che essa riceva i parametri di lavoro in modo analogo a come accade per gli altri algoritmi di ottimizzazione di iTOUGH2;
2. una interfaccia C++ fra gol++ e iTOUGH2 che incapsula la funzione obiettivo;
3. una serie di aggiunte ai moduli di iTOUGH2 per la gestione del file di parametri, in modo da poter specificare RBFOPT come algoritmo di ottimizzazione;

Gli sviluppi futuri riguarderanno, oltre ad un'ulteriore integrazione di RBFOPT con iTOUGH2, la definizione di strategie basate su basi radiali specifiche per il problema in esame. In particolare si potranno confrontare i risultati ottenuti con gli altri algoritmi presenti in iTOUGH2.

## **6. La termodinamica dei fluidi geotermici**

Come più volte ricordato nei documenti precedenti, la soluzione dell'equilibrio termodinamico, con un qualunque metodo più o meno approssimato rappresenta un punto fondamentale della strategia di simulazione di un bacino geotermico.

La presenza contemporanea di una varietà di componenti nella miscela di fluidi geotermici, in condizioni standard allo stato liquido (principalmente acqua), gassoso (principalmente anidride carbonica, acido solforico, azoto e idrocarburi) e

cristallina (principalmente sali e minerali disciolti), obbliga infatti a modellare il sistema termodinamico almeno come una miscela di acqua con un gas non condensabile (normalmente  $\text{CO}_2$ ) e un sale (normalmente  $\text{NaCl}$ ) [1, 2, 12, 22]. Come si è più volte ricordato tuttavia, la scelta sulla modalità di soluzione dell'equilibrio termodinamico non è univoca. La letteratura si divide sulla scelta di equazione di stato da utilizzare per la modellazione del comportamento non ideale del fluido in questione [2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 13, 20, 25], e sulla scelta del metodo per la soluzione dell'equilibrio termodinamico. Su questo secondo aspetto in particolare, la letteratura è generalmente divisa tra chi sostiene la bontà dell'utilizzo di metodi approssimati (tipo o derivati da la legge di Henry) [2, 10, 12, 22, 28] e chi, al contrario, sostiene maggiormente l'utilizzo di un approccio più rigoroso alla soluzione dell'equilibrio di fase, basato sulla minimizzazione diretta dell'energia libera [9, 17, 19, 15] o su un calcolo diretto dell'equilibrio di fase [16, 33, 23] o su una combinazione dei due [26].

### **6.1. Un approccio rigoroso**

Sulla base della analisi di letteratura recente sull'argomento [3, 16, 21, 27], e su considerazioni più generali relative alle numerose approssimazioni fatte altrove nel modello, la nostra scelta è stata quella di procedere ad una implementazione abbastanza rigorosa dell'equilibrio di fase.

Seguendo infatti gli argomenti di Soreide e Whitson [27] e di Michelsen [16], oltre alle valutazioni generali di Müller e Marquardt [19], la nostra convinzione è che l'equilibrio di fase di una miscela relativamente semplice possa essere risolto a partire dalla soluzione completa del flash isobaro e isoterma attraverso la soluzione di un Rachford-Rice [23] accoppiato con l'uguaglianza dei potenziali chimici (o delle fugacità). La nostra scelta di equazione di stato, da cui derivare le funzioni di stato e i potenziali è caduta pertanto, con naturalezza, sulla Peng-Robinson [20], già ampiamente utilizzata in altri contesti, adattata secondo le indicazioni di Soreide e Whitson [27] per includere la pseudo-componente "brine" ottenuta da una soluzione di acqua e cloruro di sodio equivalente. In questo modo, l'equilibrio trifase gas-liquido-solido si riduce più semplicemente ad un flash liquido-vapore, accoppiato ad una soluzione quasi ideale liquido-sale [21].

### **6.2. Definizioni e relazioni termodinamiche**

Il metodo di soluzione del flash isobaro e isoterma si basa sull'accoppiamento di un Rachford-Rice con l'uguaglianza dei potenziali chimici. In dettaglio, si impone infatti l'uguaglianza dei potenziali chimici per ciascuna specie e si accoppia la

soluzione del sistema di equazioni algebriche risultante, con la conservazione del numero totale di particelle per ciascuna specie.

A partire dalla energia libera di Helmholtz  $F(N_i, V, T)$  si definisce, attraverso una trasformazione di Legendre, l'energia libera di Gibbs  $G(N_i, P, T) = F(N_i, V, T) + PV$ , dove  $P = -\partial F / \partial V$  è la pressione a cui si trova il sistema [11]. Prima di proseguire, passiamo da grandezze estensive, come le precedenti, a grandezze intensive. Definiamo prima di tutto una densità di energia libera di Helmholtz  $f(\rho_i, T) = F(N_i, V, T)/V$ , che risulti essere funzione della densità numerica della specie  $i$ -esima  $\rho_i = N_i/V$ . Corrispondentemente, definiamo una energia libera di Gibbs per particella  $g(x_i, P, T) = G(N_i, P, T)/N$ , funzione delle concentrazioni di particelle  $x_i = N_i/N$ . Definiamo inoltre  $\beta = 1/\kappa_B T$  dove  $\kappa_B$  è la costante di Boltzmann. Otteniamo pertanto

$$\beta g = \beta \frac{F}{N} + \beta \frac{PV}{N} \quad (1)$$

Sfruttando la scomposizione dell'energia libera di Helmholtz in parte ideale parte di eccesso risulta (vd. prodotti del WP 3 e sezione 6.4)

$$\beta F = \beta F_{id} + \beta \tilde{F} = \sum_i N_i \left( \ln \frac{N_i}{V} - 1 \right) + \beta \tilde{F}$$

Sostituendo in (1) e sfruttando la definizione delle  $x_i$  e di  $\rho = N/V$ , densità numerica totale di particelle, si ottiene quindi

$$\beta g = \sum_i x_i \ln x_i + \ln \rho + \frac{\beta P}{\rho} + \frac{\beta \tilde{f}}{\rho} - 1 \quad (2)$$

Dalla precedente, si possono identificare la parte ideale e di eccesso dell'energia libera di Gibbs, ad esempio definendo:

$$\beta g_{id} = \sum_i x_i \ln x_i + \ln \beta P \quad (3)$$

$$\beta \tilde{g} = \frac{\beta \tilde{f}}{\rho} - \ln \frac{\beta P}{\rho} + \frac{\beta P}{\rho} - 1 \quad (4)$$

L'equilibrio di fase multicomponente, come più volte ricordato, è normalmente definito attraverso l'uguaglianza dei potenziali chimici  $\mu_i = \partial G / \partial N_i$ . In altre parole, due fasi, ad esempio gas e liquido, sono in equilibrio se e solo se i

potenziali chimici di ciascuna specie si eguagliano, ovvero, supponendo una miscela di  $m$  specie:

$$\mu_i^L = \mu_i^G \quad i=1, \dots, m \quad (5)$$

A partire dalla energia libera di Gibbs per particella  $g$ , è possibile ridefinire i potenziali chimici osservando che  $\partial G / \partial N_i = \partial (Ng) / \partial N_i = g + N \partial g / \partial N_i$  sfruttando il fatto che  $g$  è in realtà funzione delle  $x_i$  e non delle  $N_i$ , si ottiene

$$\mu_i = \frac{\partial G}{\partial N_i} = g + N \frac{\sum_j \frac{\partial g}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial N_i}}{\quad} \quad (6)$$

e, inserendo la definizione delle concentrazioni  $x_j = N_j / N = N_j / \sum_k N_k$ , si ottiene:

$$\mu_i = g + \frac{\partial g}{\partial x_i} - \sum_j x_j \frac{\partial g}{\partial x_j} \quad (7)$$

Ricordando ora la scomposizione dell'energia libera di Gibbs in parte ideale e di eccesso (3,4), otteniamo infine

$$\beta \mu_i = \ln x_i + \beta \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_i} + \ln \beta P + \beta \tilde{g} - \beta \sum_j x_j \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_j} \quad (8)$$

D'altra parte, a partire dall'energia libera di Helmholtz si ottiene

$$\beta \mu_i = \ln \rho_i + \beta \tilde{\mu}_i = \ln \rho + \ln x_i + \beta \tilde{\mu}_i \quad (9)$$

dove  $\tilde{\mu}_i = \partial \tilde{f} / \partial \rho_i$ , con  $\tilde{f} = \tilde{F} / V$  e si è sfruttato il fatto che  $\rho_i = \rho x_i$ . Confrontando le (8,9), si ottiene infine

$$\beta \mu_i^{id} = \ln x_i \quad (10)$$

$$\beta \tilde{\mu}_i = \beta \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_i} \quad (11)$$

$$\ln \frac{\beta P}{\rho} = \beta \tilde{g} + \beta \sum_j x_j \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_j} \quad (12)$$



Dove la (12) rappresenta essenzialmente l'equazione di stato e viene utilizzata per il calcolo della densità della fase, come funzione delle variabili principali del sistema  $x_i, P, T$ .

Sostituendo infine la (12) in (8) si ottiene quindi:

$$\beta \mu_i = \ln x_i + \beta \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_i} + \ln \rho \quad (13)$$

### 6.3. Descrizione di metodo di calcolo del flash

Il sistema di equazioni da risolvere, nel caso si volesse risolvere l'equilibrio di fase liquido-gas, è, come detto, il seguente

$$\beta \mu_i^G = \beta \mu_i^L \quad (14)$$

Sfruttando ora la scomposizione dei potenziali chimici (13), e definendo una nuova parte di eccesso del potenziale chimico  $\beta \bar{\mu}_i = \beta \tilde{\mu}_i + \ln \rho$ , il sistema (14) può essere riscritto, definendo i coefficienti di equilibrio  $K_i = x_i^G / x_i^L$  come

$$\ln K_i + \beta (\bar{\mu}_i^G - \bar{\mu}_i^L) = 0 \quad (15)$$

ovvero [16]

$$\ln K_i = \beta (\bar{\mu}_i^L - \bar{\mu}_i^G) \quad (16)$$

Ovviamente, l'equazione precedente (16) dovrà essere accoppiata alla usuale conservazione totale del numero di particelle, ovvero, definita  $\phi^\alpha = N^\alpha / N$  la frazione molare di particelle nella fase  $\alpha$ , deve valere la seguente equazione

$$(1 - \phi^G) x_i^L + \phi^G x_i^G = x_i^{(0)} \quad (17)$$

Inoltre, per definizione, dovrà risultare

$$\sum_i x_i^G = \sum_i x_i^L = 1 \quad (18)$$

Dalla conservazione del numero di particelle (17), utilizzando la definizione dei coefficienti di equilibrio  $K_i$ , otteniamo

$$x_i^L = \frac{x_i^{(0)}}{\phi^G (K_i - 1) + 1} \quad (19)$$

e, ovviamente

$$x_i^G = \frac{K_i x_i^{(0)}}{\phi^G (K_i - 1) + 1} \quad (20)$$

Dall'equazione (18) abbiamo inoltre che

$$\sum_i (x_i^G - x_i^L) = 0 \quad (21)$$

Sostituendo nella precedente le Eqq. (19,20), otteniamo l'equazione di Rachford-Rice (R-R) [23]

$$\sum_i \frac{x_i^{(0)} (K_i - 1)}{1 + \phi^G (K_i - 1)} = 0 \quad (22)$$

Dato un set di coefficienti di equilibrio  $K_i$ , l'equazione precedente permette di calcolare  $\phi^G$ . Ovviamente, il set di coefficienti di equilibrio deve soddisfare l'uguaglianza dei potenziali chimici (15), affinché la soluzione trovata rappresenti effettivamente la frazione di particelle in equilibrio con il liquido.

La procedura di calcolo adottata, già definita ed adottata da Michelsen [16] è pertanto implementata nella maniera seguente:

1. Si verifica, attraverso il controllo dei valori della pressione del sistema con il valore della pressione di saturazione [2], che ci troviamo in una regione di coesistenza
2. Si inizializzano i coefficienti di equilibrio attraverso le funzioni di Wilson [34], come

$$K_i = p_{ri} \exp[5.37(1 + \omega_i)(1 - T_{ri}^{-1})] \quad (23)$$

dove  $p_{ri}$  e  $T_{ri}$  sono i valori di pressione e temperatura ridotti. Una forma alternativa ai precedenti può essere ottenuta dalla legge di Raoult, per cui si ottiene che

$$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P} \quad (24)$$

dove la pressione di vapore saturo della componente i-esima è data da

$$\ln P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{C_i + T} \quad (25)$$

dove i valori dei coefficienti  $A_i, B_i$  e  $C_i$  sono ottenibili in letteratura per molti materiali [24].

3. Si utilizzano questi valori di  $K_i$  per risolvere il Rachford-Rice (22)
4. Si calcolano le concentrazioni di gas  $x_i^G$  e liquido  $x_i^L$  attraverso le (19,20)
5. Si calcola il valore di  $\rho$  da (12)
6. Si calcolano i nuovi valori dei coefficienti di equilibrio  $K_i$  sostituendo in (16)
7. Se la differenza tra i vecchi valori dei coefficienti e i nuovi ha raggiunto la tolleranza voluta, stop, altrimenti torna al punto 3

Questo semplice algoritmo, senza cioè l'utilizzo di nessuna accelerazione [15, 16], dai test effettuati, converge, a partire dalla semplice inizializzazione con i coefficienti alla Wilson (23), in meno di 10 iterazioni. La performance è decisamente migliore quando si inizializzano, i coefficienti di equilibrio con la soluzione ottenuta al passo precedente (o nella cella immediatamente vicina). Ipotizzando infatti di fare passi abbastanza piccoli, il sistema converge in alcune (tre, quattro) iterazioni, anche imponendo valori molto piccoli della tolleranza. Questo ci conferma che l'algoritmo utilizzato può essere adatto ad essere utilizzato in un sistema di calcolo che richieda la soluzione del flash molte volte (una per ogni cella spaziale) ad ogni passo temporale. Trovata infatti la soluzione in un punto  $(x,t)$ , la soluzione nelle celle limitrofe può essere calcolata utilizzando la soluzione trovata come valore di inizializzazione.

### 6.3.1. *Analisi di stabilità*

Come già riportato da Michelsen [15], il metodo appena esposto, basato sull'update dei coefficienti di equilibrio (16) possiede alcune proprietà di rilievo per quanto riguarda l'analisi di stabilità della soluzione dell'equilibrio di fase trovato. Si può infatti dimostrare, che, nel caso di convergenza ad una soluzione valida, ovvero con  $\phi^G$  tra 0 e 1, le soluzioni trovate rappresentano altrettanti minimi dell'energia libera di Gibbs. Come tali, le soluzioni rappresentano quindi fasi effettive del sistema termodinamico e sono quindi localmente stabili.

La verifica della stabilità globale della soluzione trovata, come già riportato da Michelsen [15] richiederebbe una analisi della TPD al fine di trovare la soluzione, tra le tante possibili, che minimizza l'energia libera globale del sistema. Tuttavia, per sistemi semplici come questo, in cui la coesistenza di fase è ridotta al massimo a due fasi coesistenti, il "negative flash" [33] offre alcune informazioni aggiuntive. La procedura del negative flash presuppone un rilassamento del vincolo per cui  $\phi^G$ , essendo una frazione molare, deve rimanere

obbligatoriamente tra 0 e 1. In realtà, si verifica che l'equazione di Rarford-Rice ammette soluzioni per  $\phi^G$  compreso tra un valore massimo maggiore di 1 e un valore minimo minore di 0 [33]. La procedura che si basa sul calcolo del negative flash procede quindi esattamente come descritto nella sezione precedente, tuttavia, si accettano soluzioni del R-R anche al di fuori dell'intervallo fisico [0, 1], purché la soluzione trovata rientri tra i due valori  $\phi_{min}^G$  e  $\phi_{Max}^G$ . Nel caso in cui il R-R converga ad una soluzione nell'intervallo  $[\phi_{min}^G, \phi_{Max}^G]$ , ma al di fuori dell'intervallo [0, 1], questo implica che la coesistenza bifase rappresenta già una soluzione valida dell'uguaglianza dei potenziali chimici, e quindi le due fasi sono effettivamente in equilibrio, ma non è ancora la soluzione stabile. In particolare, se  $\phi_{min}^G < \phi^G < 0$ , si può concludere che la soluzione stabile è ancora rappresentata dal monofase liquido. Nel caso in cui, viceversa, risulti  $\phi_{Max}^G > \phi^G > 1$ , la soluzione monofase gas è ancora la soluzione stabile e il liquido non è ancora comparso. Senza ricorrere al calcolo dell'energia libera, il negative flash permette quindi di connettere con continuità il sistema monofase al sistema bifase e viceversa, facilitando le zone di transizione ed eliminando le discontinuità che derivano dall'insorgenza della coesistenza di fase. Con questo metodo, Whitson e Michelsen [33] argomentano che si possono facilmente risolvere anche sistemi estremamente complessi senza incorrere nelle criticità di calcolo solitamente derivanti anche nelle zone vicine ai punti critici.

#### 6.4. L'equazione di stato Peng-Robinson

Come detto in precedenza, per l'ampia diffusione e provata affidabilità, l'equazione di stato scelta per la derivazione dei potenziali termodinamici è la Peng-Robinson [20], nella estensione fattane da Søreide e Whitson [27] per includere l'effetto della salinità [3]. Vediamo quindi la forma dei potenziali chimici (13) e delle funzioni di stato principali, ottenuti a partire dall'equazione Peng-Robinson.

Seguendo il metodo illustrato da Mollerup e Michelsen [18], si definisce l'energia libera di Helmholtz di eccesso  $\tilde{F}(N_i, V, T)$ , come

$$\tilde{F}(N_i, V, T) = - \int_{\infty}^V \left( P - \frac{N \kappa_{BT}}{\xi} \right) d\xi \quad (26)$$

Nel caso specifico dell'equazione P-R, la pressione è data da

$$P = \frac{N \kappa_B T}{V-B} - \frac{D}{V(V+B)+B(V-B)} \quad (27)$$

dove

$$B = \sum_i b_i N_i \quad (28)$$

$$D = \sum_{ij} a_{ij} N_i N_j \quad (29)$$

Sostituendo nella precedente e svolgendo l'integrale, si ottiene

$$\tilde{F}(N_i, V, T) = N \kappa_B T \ln \frac{V}{V-B} + \frac{\sqrt{2}}{4} \frac{D}{BV} \ln \left( \frac{V+(1-\sqrt{2})B}{V+(1+\sqrt{2})B} \right) \quad (30)$$

La densità di energia libera  $\tilde{f} = \tilde{F}/V$ , risulta quindi

$$\beta \tilde{f}(\rho_i, T) = -\rho \ln(1-\rho B') + \frac{\sqrt{2}}{4} \frac{\rho D'}{B'} \ln \left( \frac{1+(1-\sqrt{2})\rho B'}{1+(1+\sqrt{2})\rho B'} \right) \quad (31)$$

dove

$$B' = \sum_i b_i x_i \quad (32)$$

$$D' = \sum_{ij} \tilde{a}_{ij} x_i x_j \quad (33)$$

$$\tilde{a}_{ij} = \beta a_{ij} \quad (34)$$

Utilizzando la (4), uno ottiene quindi l'energia di Gibbs di eccesso per particella,

$$\beta \tilde{g}(x_i, P, T) = -\ln(1-\rho B') + \frac{\sqrt{2}}{4} \frac{D'}{B'} \ln \left( \frac{1+(1-\sqrt{2})\rho B'}{1+(1+\sqrt{2})\rho B'} \right) - \ln \frac{\beta P}{\rho} + \frac{\beta P}{\rho} - 1 \quad (35)$$

A questo punto, sfruttando la (11), è facile derivare la forma dei potenziali chimici di eccesso, dall'energia libera di Gibbs (35) come

$$\beta \tilde{\mu}_i = -\ln(1-\rho B') + \frac{\rho b_i}{1-\rho B'} - \frac{D' \rho b_i}{(1+2\rho B'-(\rho B')^2)B'} +$$

$$+ \frac{\sqrt{2}}{4} \left( \frac{2 \sum_j a_{ij} x_j}{B'} - \frac{b_i D'}{(B')^2} \right) \ln \left[ \frac{1 + (1 - \sqrt{2}) \rho B'}{1 + (1 + \sqrt{2}) \rho B'} \right] \quad (36)$$

Da cui, applicando la (13)

$$\begin{aligned} \beta \mu_i = & \ln x_i + \ln \frac{\rho}{1 - \rho B'} + \frac{\rho b_i}{1 - \rho B'} - \frac{D' \rho b_i}{(1 + 2 \rho B' - (\rho B')^2) B'} + \\ & + \frac{\sqrt{2}}{4} \left( \frac{2 \sum_j a_{ij} x_j}{B'} - \frac{b_i D'}{(B')^2} \right) \ln \left[ \frac{1 + (1 - \sqrt{2}) \rho B'}{1 + (1 + \sqrt{2}) \rho B'} \right] \quad (37) \end{aligned}$$

### 6.5. Programma di attività

Allo stato attuale, come descritto in precedenza, il sistema permette di risolvere l'equilibrio di fase gas-liquido. Ad oggi, il sistema è stato implementato utilizzando l'acqua H<sub>2</sub>O come componente. La salinità dell'acqua non è cioè ancora stata implementata.

Tuttavia, come mostrato da Soreide e Whitson [27] e più recentemente da Perez e Heidemann [21], l'effetto della salinità può essere trattato accoppiando all'equilibrio di fase un problema di solubilità di sali in acqua, e sostituendo una nuova pseudo-componente "brine" nell'equilibrio di fase gas-liquido. In questo modo, commetteremmo certamente una approssimazione maggiore rispetto alla soluzione completa dell'equilibrio trifase gas-liquido-solido, ma avremmo da gestire un sistema decisamente più semplice. Inoltre, in una situazione come quella che abbiamo in studio, si deve osservare che la percentuale di sali eventualmente presenti in fase gas e di gas non condensabili (CO<sub>2</sub> o altri) in fase solida è certamente trascurabile per i nostri scopi. D'altra parte, non avendo a disposizione nessuna valutazione o stima diretta sulla composizione dei fluidi reali, né stime dirette locali dell'effetto della formazione di sedimenti salini ed eventuali modifiche dei valori di porosità e permeabilità dovuti ad essi, anche la soluzione del problema accoppiato di solubilizzazione di sale in acqua appare, per i nostri scopi, pleonastico.

A partire da queste considerazioni, il programma delle attività previste per il secondo anno di progetto, potrebbe essere il seguente:

- Implementazione del sistema tenendo conto dell'effetto della salinità, ovvero modificando i coefficienti dell'equazione di stato ed in particolare dei termini binari (cfr. [27]), per tenere conto della concentrazione di sale in acqua, considerando però la concentrazione di sali come costante.

- Verifica dell'effettiva performance del sistema ed eventuale ricerca di sistemi ed algoritmi di accelerazione per la soluzione.
- Verifica della bontà delle approssimazioni, con dati pubblicati.
- Implementazione, se ritenuto necessario, dell'accoppiamento tra solubilità del sale in acqua ed equilibrio gas-liquido. In questo modo, si possono includere le variazioni di salinità del brine dovuti alle variazioni di temperatura e l'eventuale interazione fluido-roccia di adsorbimento o sedimentazione di sali e altri minerali.
- Valutazione delle quantità di solido formato/disciolto per effetto della soluzione in acqua e locale modifica del brine ed eventuale implementazione di variazione locale della porosità.
- Valutazione della possibilità di implementazione di questo sistema di calcolo termodinamico all'interno del software generale di simulazione Tough2 utilizzato per la soluzione delle equazioni di bilancio del bacino

## 7. Pre & Post Processing per iTOUGH2

### 7.1. Il problema della creazione e gestione della griglia

TOUGH2 ha al suo interno un modulo denominato "Meshmaker" che genera griglie 1D, 2D, 3D regolari, o griglie cilindriche. Gli svantaggi di tale modulo sono due:

- richiede un'onerosa rielaborazione manuale dell'output affinché possa essere utilizzato come file input geometrico per iTOUGH2.
- non è in grado di creare griglie irregolari.

I limiti di questo modulo di pre - processing hanno portato alla ricerca ed allo sviluppo di nuovi strumenti che consentissero di generare, gestire e visualizzare più rapidamente ed intuitivamente il modello numerico. L'obiettivo è stato perseguito attraverso l'uso di codici open source robusti ed affidabili, quali AMESH e GRASS GIS, opportunamente sviluppati da CINIGeo. Inoltre, è stato sviluppato ex novo un visualizzatore 3D del modello numerico e dei risultati della simulazione, basato su librerie Java.

## **7.2. GRASS**

### *7.2.1. Introduzione al software*

GRASS (Geographic Resources Analysis Support System) è un Sistema Informativo Geografico (GIS) utilizzato per la gestione, l'elaborazione, il modellamento spaziale e la visualizzazione di dati geografici.

Originariamente scritto, sviluppato, gestito e diffuso dall'U.S. Army Construction Engineering Research Laboratories (USA-CERL, 1982-1995), sezione dell' US Army Corp of Engineers, come strumento per la gestione del territorio e la pianificazione ambientale per scopi militari, GRASS si è evoluto divenendo rapidamente un potente strumento in un ampio campo di applicazioni in molte differenti aree della ricerca scientifica. GRASS è attualmente utilizzato in tutto il mondo in ambienti accademici e commerciali, in molti settori governativi, che includono NASA, NOAA, USDA, DLR, CSIRO, il National Park Service, l' U.S. Census Bureau, USGS, e in molte compagnie di consulenza ambientale.

È un software gratuito che può essere acquisito, modificato e ridistribuito nei termini del GNU General Public License come pubblicato dalla Free Software Foundation, e dal 1997 è sviluppato da una rete mondiale di operatori che continuano a rilasciare con regolarità nuove versioni.

### *7.2.2. Applicazioni e sviluppo*

La distribuzione utilizzata per la discretizzazione di domini 2D e 3D e per la creazione dei file di input al simulatore iTOUGH2 è GRASS 6.4 svn, compilato su sistema operativo Linux, distribuzione UBUNTU 8.10 – Hardy Heron. Sono stati inoltre compilati e installati moduli GRASS forniti dalla comunità degli utilizzatori e verificati dal GRASS development team, necessari od utili alla realizzazione delle griglie 3D ed alla rappresentazione dei dati disponibili / elaborati.

La versione di GRASS sviluppata da CINIGeo per la realizzazione del modello numerico da inserire in iTOUGH2 (file di input con tutti i dati necessari al programma) trae origine dalla constatazione che le attività legate alla simulazione richiedono di poter modificare la griglia di discretizzazione (con i corrispondenti dati associati) del continuo geologico in modo semplice ed il più possibile automatizzato.

L'esigenza di sviluppare strumenti in ambiente FOSGIS per il pre-processing del simulatore geotermico iTOUGH2 nasce dalla difficoltà di gestire modelli numerici a maglia irregolare; maglia che, peraltro, consente di affinare la simulazione con raffittimenti in corrispondenza e all'intorno dei punti critici.



Escludendo Wingridder, ad oggi non risulta esserci un software per la generazione di griglie irregolari dedicato al pre-processing di iTOUGH2, pertanto è necessario ricorrere ai software sviluppati per i modelli ad elementi finiti (FEM) o creare codici appositi.

La versione di GRASS implementata da CINIGeo consente di realizzare griglie 3D regolari ed irregolari idonee alla simulazione di modelli alle differenze finite, oltre all'immediata georeferenziazione del modello numerico generato ed alla visualizzazione grafica dei parametri utilizzati nella simulazione. Il database generato insieme alla griglia consente di archiviare tutte le informazioni associate ai vari blocchi che costituiscono il modello numerico.

La creazione di opportuni scripts ha consentito l'utilizzo delle informazioni disponibili per la generazione del file di input di iTOUGH2. Il codice che consente di generare tale input a partire dal database di GRASS è AMESH (Haukwa, 1999). La grande flessibilità di un GIS nell'attribuzione di diverse informazioni ai blocchi del dominio indagato consente di ridurre sensibilmente i tempi di elaborazione e modifica del modello numerico.

Infine, qualora fosse già disponibile un modello numerico del dominio studiato, è possibile utilizzare GRASS per la semplice creazione del database associato e per la gestione dell'input di iTOUGH2.

### *7.2.3. Generazione del modello numerico*

La versione di sviluppo (integrata con moduli aggiuntivi forniti dalla comunità e sviluppati all'interno del progetto) è stata utilizzata e testata positivamente su piattaforma Linux.

I tre scripts in linguaggio bash consentono di generare, gestire e modificare il modello numerico in input al simulatore in tempi sensibilmente ridotti rispetto a quelli attualmente richiesti.

Il pre - processing del modello numerico prevede le seguenti operazioni:

- viene caricato il progetto di lavoro contenente i dati informativi di base, ovvero:
  - mappe vettoriali, contenenti oggetti topologici di vario tipo (punti, linee, aree, centroidi), a cui sono associate informazioni archiviate in vari database dbf;
  - mappe raster, relative ad informazioni morfologiche (es. dem della topografia o degli orizzonti geologici / geotermici) o rappresentative di parametri di interesse geotermico;

- vengono caricate le mappe di interesse su cui si perimetra il dominio che si vuole studiare. Queste possono rappresentare la collocazione dei pozzi, le linee di faglia, i punti di misura o altre informazioni ritenute utili dall'esperto in simulazione;
- determinati i punti di interesse, nell'intorno dei quali realizzare la più opportuna discretizzazione, si definiscono i confini del dominio indagato e le aree di addensamento della discretizzazione (con digitalizzazione manuale tramite strumenti CAD integrati nel GIS o con la realizzazione di buffer);
- la mappa vettoriale creata al punto precedente costituisce l'input dello script di generazione del modello numerico. Il risultato dell'elaborazione è:
  - n. 1 mappa vettoriale che rappresenta la discretizzazione 2D del dominio indagato, costituita da una griglia a poligoni di Thiessen / regioni di Voronoi;
  - n. 1 mappa vettoriale costituita dai soli nodi della discretizzazione 3D del dominio indagato;
  - n. 1 database in formato dbf, associato alla mappa vettoriale descritta al punto precedente, contenente le informazioni richieste da AMESH per la generazione dell'input geometrico di iTOUGH2;

Qualora fosse già disponibile una discretizzazione 2D del dominio indagato, è possibile generare il modello numerico 3D (ovvero la mappa vettoriale 3D ed il database associato). Se invece si dispone di un modello numerico 3D completo, è possibile generare il solo database per la gestione delle informazioni associate ai nodi.

- utilizzando gli strumenti di aggiornamento delle informazioni associate alla mappa (eventualmente tramite interrogazioni in linguaggio SQL), l'esperto in simulazione aggiorna i campi relativi ai materiali associati ai nodi e, laddove necessario, lo spessore degli strati;
- il modello numerico (griglia 3D costituita dai nodi dei blocchi del dominio discreto) viene esportato in formato csv ed utilizzato da AMESH, che genera parte del file di input per TOUGH2.

The screenshot shows the 'v.intough2' window with the '2D Grid editing' tab selected. The window title is 'v.intough2' and it contains a description: '"Creates a regular 3D mesh for TOUGH2 source code. All fields must be filled."'.

The '2D Grid editing' tab contains the following fields:

- 2D grid name: (map: string, required)
- Rows' number (n-s): (ygrid: multiple integer, required)
- Columns' number (w-e): (xgrid: multiple integer, required)
- Grid starting x coordinate: (xcoor: multiple float, required)
- Grid starting y coordinate: (ycoor: multiple float, required)
- Block width in x direction: (xwidth: multiple float, required)
- Block width in y direction: (ywidth: multiple float, required)
- Grid rotation angle: (angle: float, required)

At the bottom, a status bar shows the command: `v.intough2 map=griglia2D ygrid=10 xgrid=10 xcoor=0 ycoor=0 xwidth=500 ywidth=500 angle=0 topedge=600 bottomedge=-3000 layer=36 grid3D=griglia3D`. Below the status bar are three buttons: 'Run', 'Help', and 'Close'.

Figura 7.4. Maschera del modulo v.intough2, che genera il modello numerico 3D a maglia regolare

The screenshot shows the 'v.intough2' window with the '3D Grid editing' tab selected. The window title is 'v.intough2' and it contains a description: '"Creates a regular 3D mesh for TOUGH2 source code. All fields must be filled."'.

The '3D Grid editing' tab contains the following fields:

- 3D grid top edge z coor: (topedge: multiple float, required)
- 3D grid bottom edge z coor: (bottomedge: multiple float, required)
- Number of layers for 3D grid: (layer: integer, required)
- 3D grid name: (grid3D: string, required)

At the bottom, a status bar shows the command: `v.intough2 map=griglia2D ygrid=10 xgrid=10 xcoor=0 ycoor=0 xwidth=500 ywidth=500 angle=0 topedge=600 bottomedge=-3000 layer=36 grid3D=griglia3D`. Below the status bar are three buttons: 'Run', 'Help', and 'Close'.

Figura 7.5. Maschera del modulo v.intough2, che genera il modello numerico 3D a maglia regolare

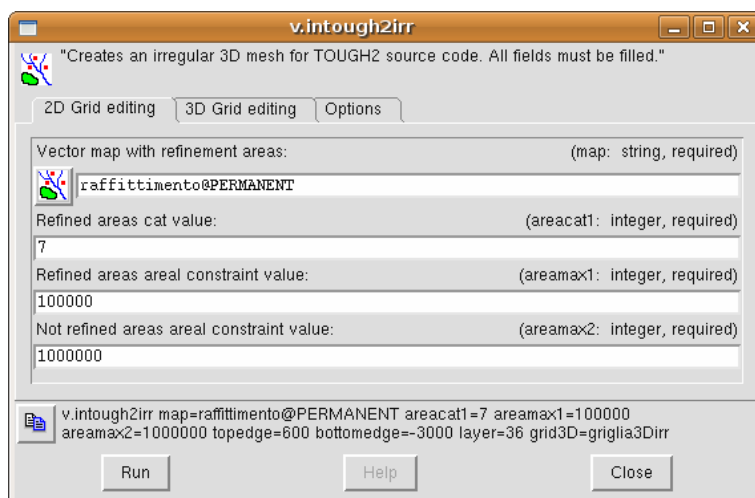


Figura 7.6. Maschera del modulo v.intough2irr, che genera il modello numerico 3D a maglia irregolare

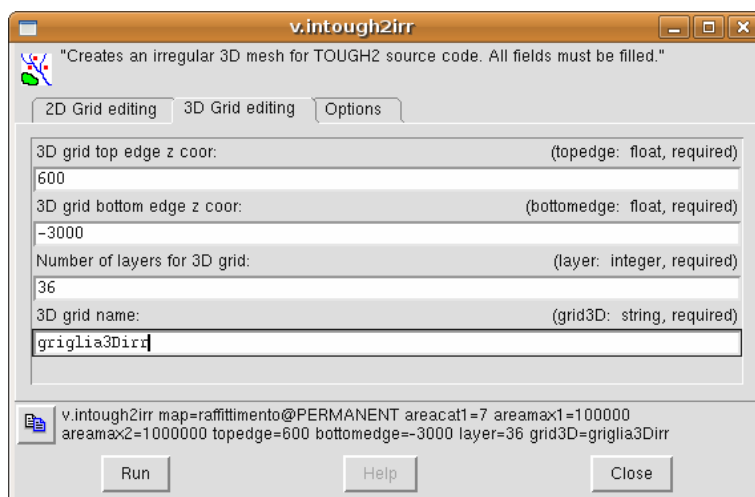


Figura 7.7. Maschera del modulo v.intough2irr, che genera il modello numerico 3D a maglia irregolare

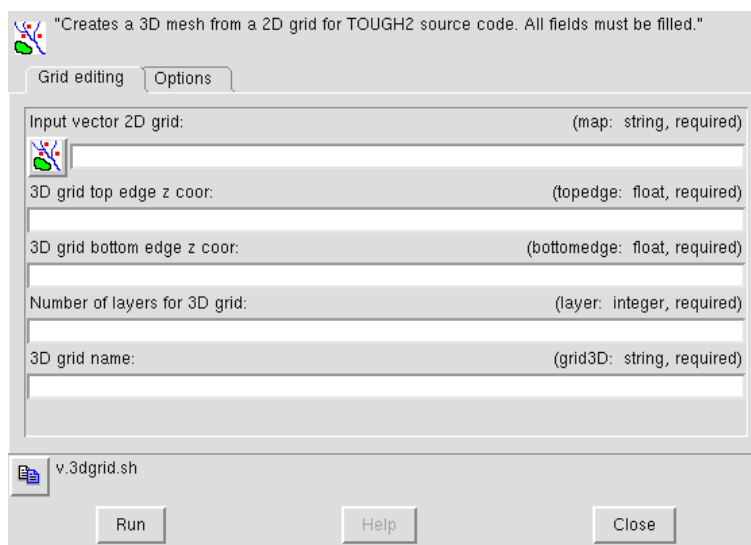


Figura 7.8. Maschera del modulo 3Dgrid, che genera il modello numerico a partire da una griglia 2D esistente

### 7.3. AMESH

AMESH (Haukwa, 1999) è un codice scritto in linguaggio C, in grado di generare griglie discrete basate sul metodo delle differenze finite integrali (IFDM), utilizzato anche da iTOUGH2, a partire da un file contenente le coordinate dei nodi di poliedri di VORONOI.

AMESH è in grado di gestire griglie regolari e irregolari in 1, 2 o 3 dimensioni. La generazione della griglia a partire dai nodi dei blocchi rispetta le condizioni geometriche richieste dal metodo IFDM (il segmento congiungente due blocchi adiacenti è ortogonale all'interfaccia tra i blocchi, ovvero generazione di poligoni di Thiessen / regioni di Voronoi). Pertanto, la geometria dei blocchi dipende dalla disposizione dei nodi (poliedri ad "n" lati, con  $n > 2$ ).

Inoltre, AMESH fornisce un file di output che contiene gran parte delle informazioni geometriche necessarie alla simulazione in iTOUGH2.

L'ulteriore vantaggio nell'utilizzo di questo codice, consiste nel fatto che il file di input di AMESH ha lo stesso formato del file di output di GRASS, mentre il file di output di AMESH ha lo stesso formato del file di input geometrico di iTOUGH2.

Nel corso del WP4, è stato modificato il codice sorgente di AMESH in modo da:

- leggere correttamente il file di output fornito da GRASS (csv);
- riportare nei file di output tutte le informazioni sul modello numerico richieste da TOUGH2.

Alcune di queste operazioni sono state automatizzate, altre sono attualmente eseguite manualmente ed in corso di automatizzazione.

### 7.3.1. *File di input di AMESH*

Il file csv generato da GRASS viene modificato manualmente in formato ASCII e viene rinominato **"in"** come richiesto da AMESH. La struttura del file è la

seguente:

```
locat
elenco dei blocchi e delle informazioni ad essi associate contenute nel file
csv
riga bianca
toler
valore di tolleranza sulle aree di interfaccia tra blocchi adiacenti
riga bianca
bound
coordinate dei vertici del confine del dominio indagato (rectangle o convex
hull), elencati in senso orario;
riga bianca
zdir
-1 (convenzione sul segno della coordinata z, ovvero l'asse verticale ha
verso positivo dal basso verso l'alto)
riga bianca
```

### 7.3.2. *File di output di AMESH*

AMESH genera 4 file **ASCII** a campo fisso: **conne**, **conne\_asterisk**, **eleme**, **segmt**;

iTOUGH2 utilizza i file **eleme** e **conne**, dai quali si crea un file unico rinominato **"nomefile.mes"**, e realizzato come segue:

```
contenuto del file "eleme"
riga bianca
contenuto del file "conne"
riga bianca
riga bianca
```

## 7.4. Visualizzazione dell'output di TOUGH2

Il file contenente i risultati della simulazione di iTOUGH2 è un file ASCII che, in base alle dimensioni del dominio studiato, al numero di blocchi della griglia, alle condizioni poste in fase di simulazione, può occupare anche qualche decina di Megabyte di memoria ed essere costituito da migliaia di righe.

In queste condizioni, è assai difficile interpretare i risultati della simulazione. D'altra parte, per una migliore comprensione dei risultati ottenuti è necessario poter visualizzare i risultati ottenuti in modo facile ed intuitivo. Da queste

esigenze è nato iTough2Viewer, un visualizzatore 3D appositamente creato da CINIGeo.

## 7.5. iTough2Viewer

Per questo motivo, è stato sviluppato ad hoc questo visualizzatore per la rappresentazione grafica del modello numerico e dei risultati della simulazione. Questo software è in grado di leggere e visualizzare in modo comprensibile tutte le informazioni ottenute dal programma di simulazione.

Il software di visualizzazione è stato sviluppato in Java per consentire la massima portabilità fra sistemi operativi nonché l'utilizzo come Java Applet per un uso on-line e l'inserimento in pagine web.

Il visualizzatore è in grado di gestire diverse tipologie di griglie mediante tre diverse maschere:

- **Regular grid:** è in grado di leggere i dati ottenuti con una simulazione in cui è stato usato Meshmaker.
- **Voronoi grid:** è quello maggiormente sviluppato, consente di leggere i risultati ottenuti da una simulazione in cui è stato utilizzato AMESH per la creazione di griglie irregolari attraverso poligoni di Voronoi (ogni blocco risulta avere una faccia perpendicolare alla congiungente due blocchi contigui).
- **Cilindric grid:** consente la lettura del file di output creato con Meshmaker per un modello a geometria cilindrica, per EOS1.

A seconda della geometria del problema, occorre caricare nel visualizzatore file differenti. Per esempio, per la maschera Voronoi grid, occorre caricare il file di output di iTOUGH2, ed i file **segmt** ed **in** di AMESH.

Il visualizzatore consente di:

- visualizzare e graficare l'andamento spazio-temporale delle grandezze simulate (valori delle grandezze relative ai blocchi e alle connessioni tra di essi);
- visualizzare sezioni verticali ed orizzontali del modello numerico;
- calcolare grandezze statistiche elementari.

Di seguito vengono riportate alcune maschere del visualizzatore (Figura 7.9, Figura 7.10, Figura 7.11, Figura 7.12, Figura 7.13, Figura 7.14).

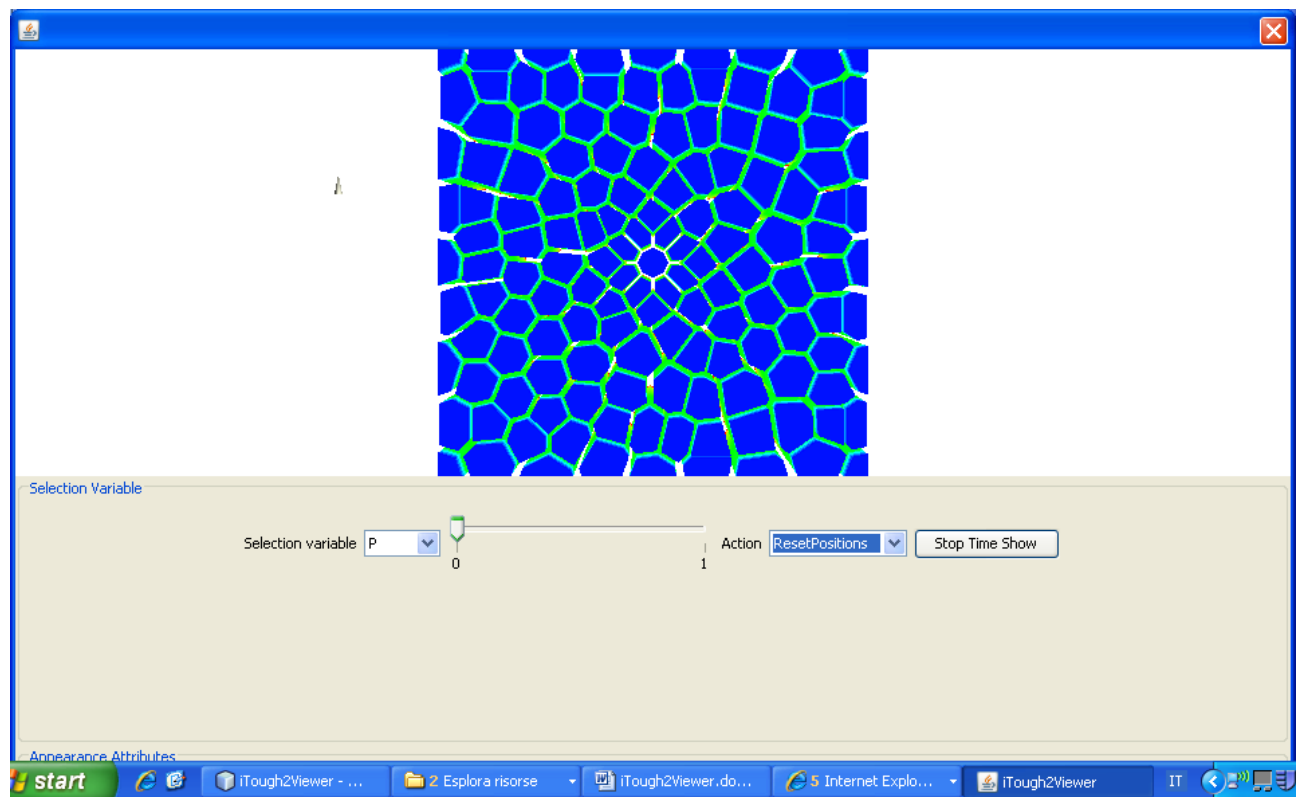


Figura 7.9. Visualizzazione di griglia irregolare (vista dall'alto)

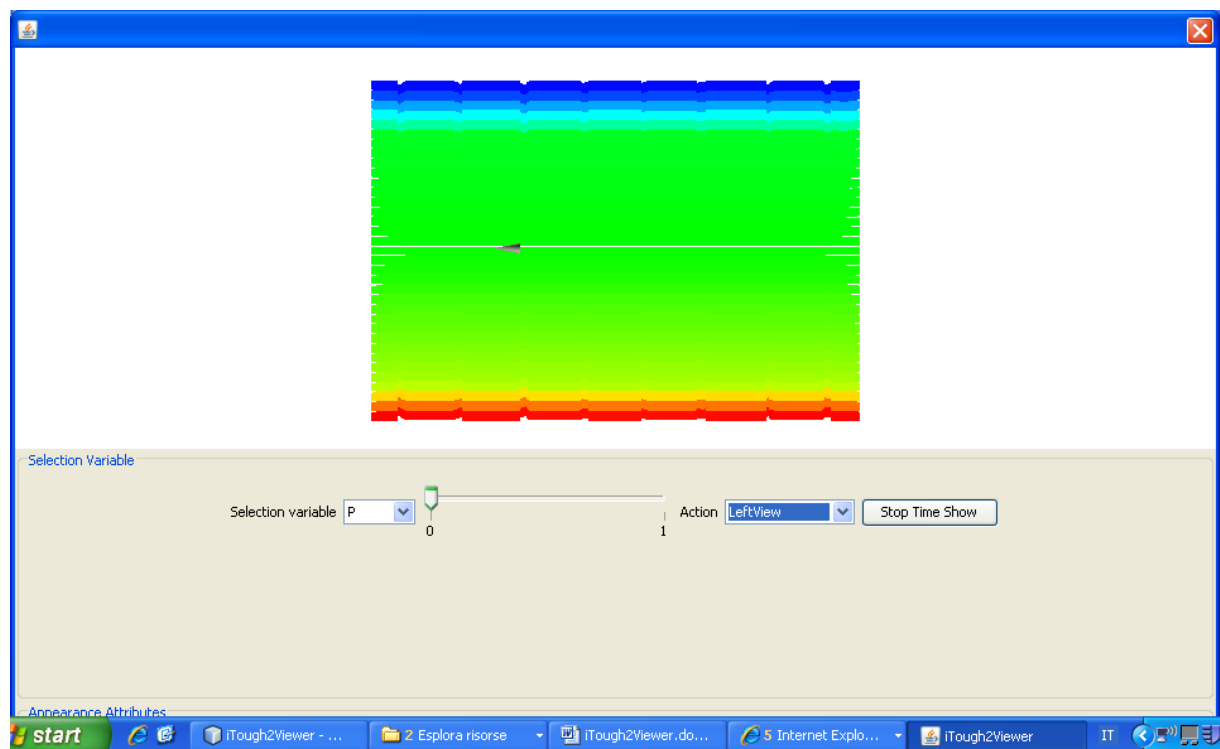




Figura 7.10. Visualizzazione di griglia irregolare (vista frontale)

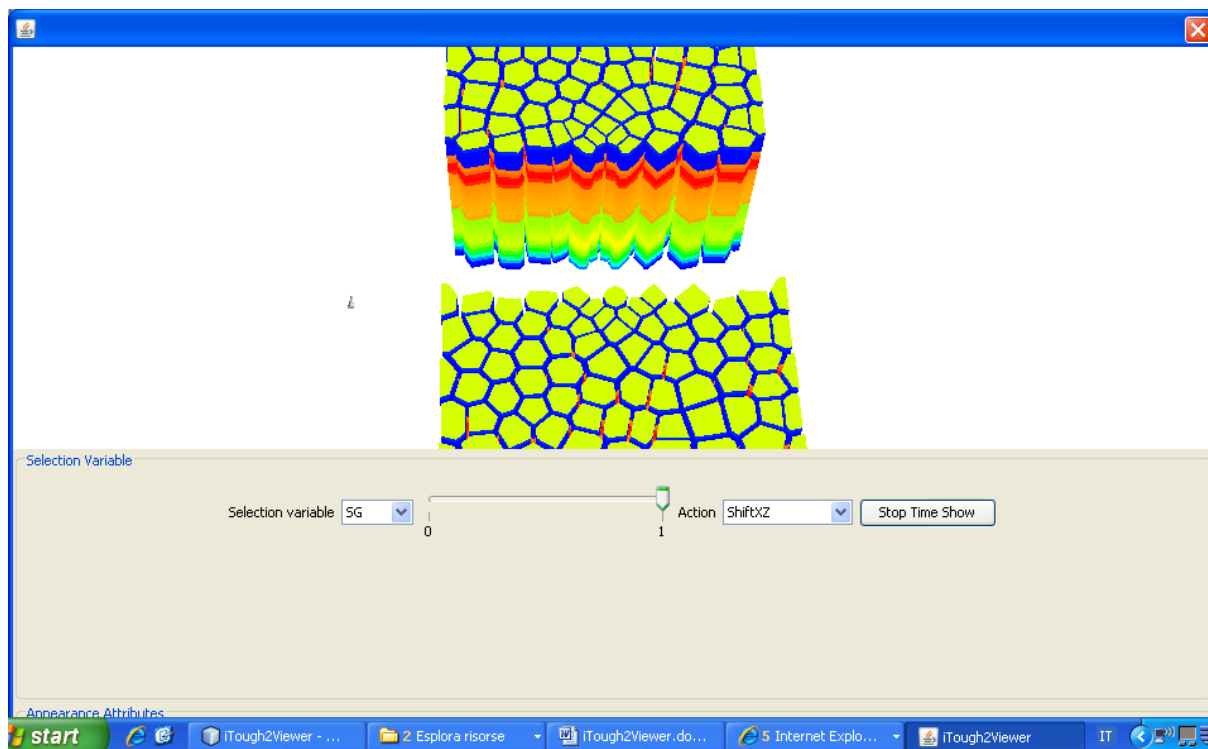


Figura 7.11. Sezione verticale della griglia irregolare

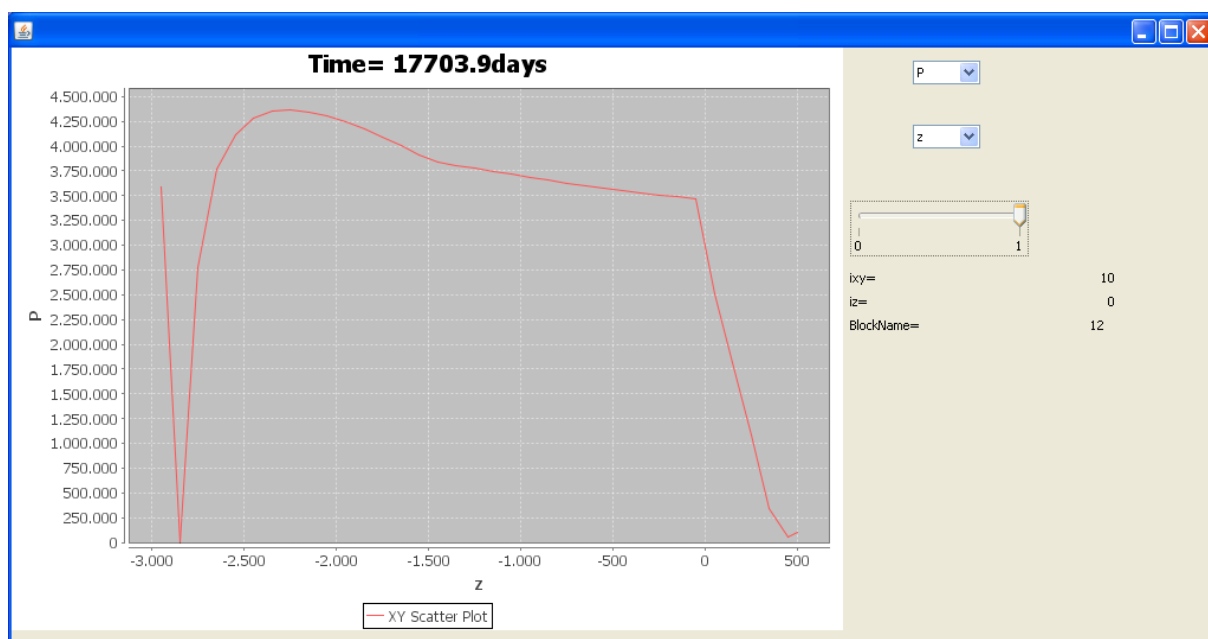


Figura 7.12. Scatter plot della pressione lungo l'asse z in un dato istante di tempo simulato

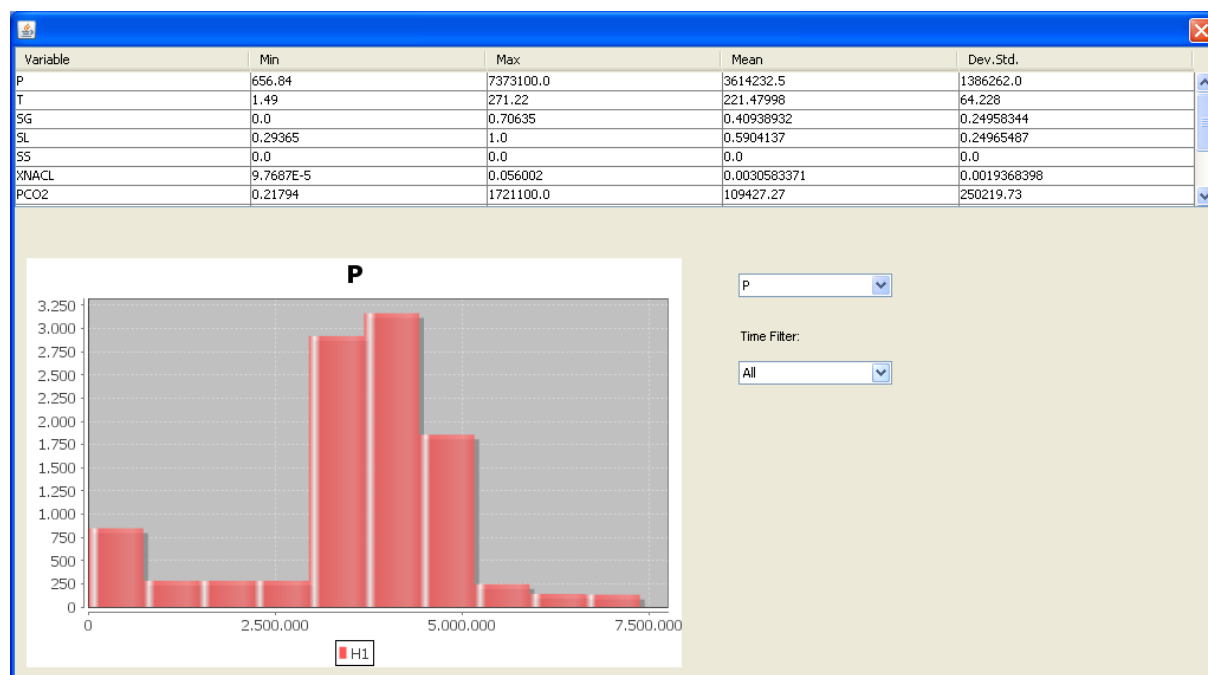


Figura 7.13. Grandezze statistiche elementari calcolate per le varie grandezze simulate

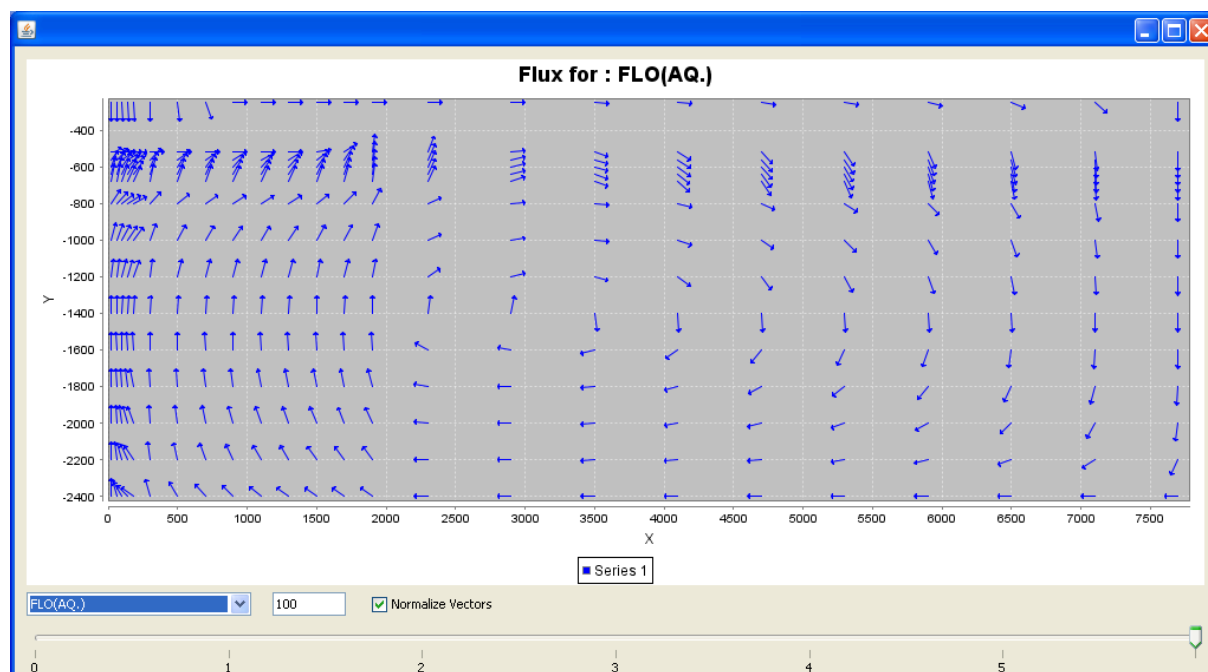


Figura 7.14. Visualizzazione del flusso di acqua in una sezione verticale

## 8. Procedura di simulazione

Riassumiamo il procedimento di simulazione con il sistema descritto:

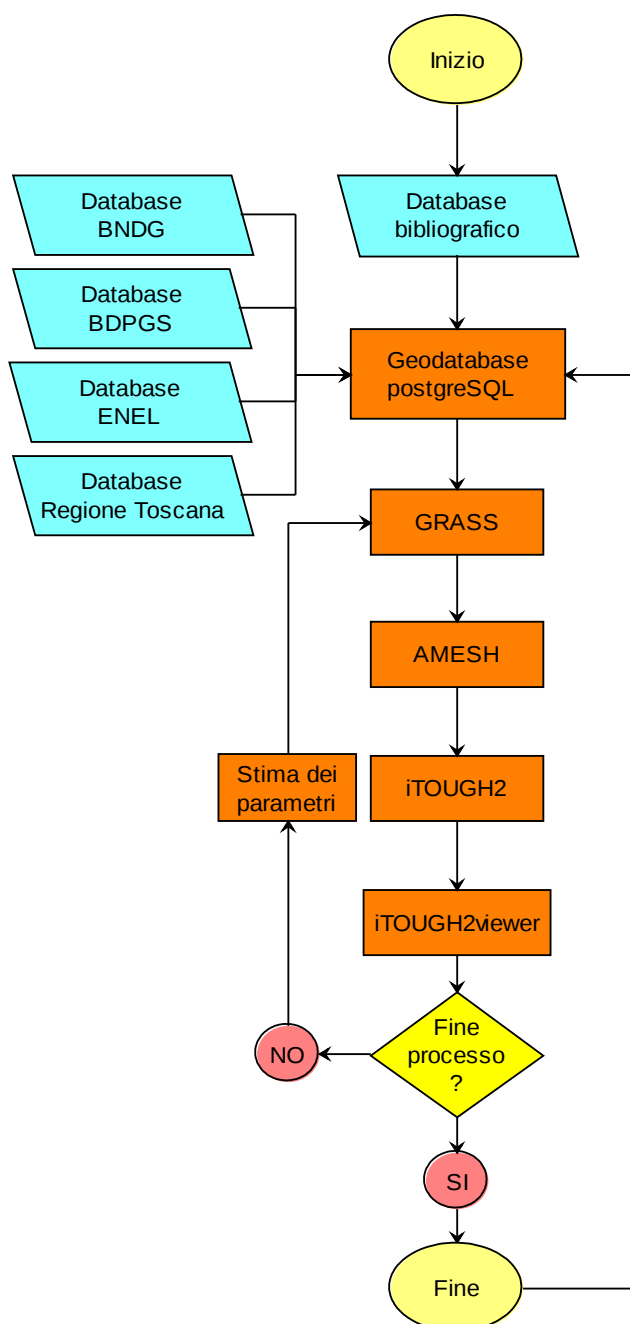


Figura 8.15. Diagramma di flusso

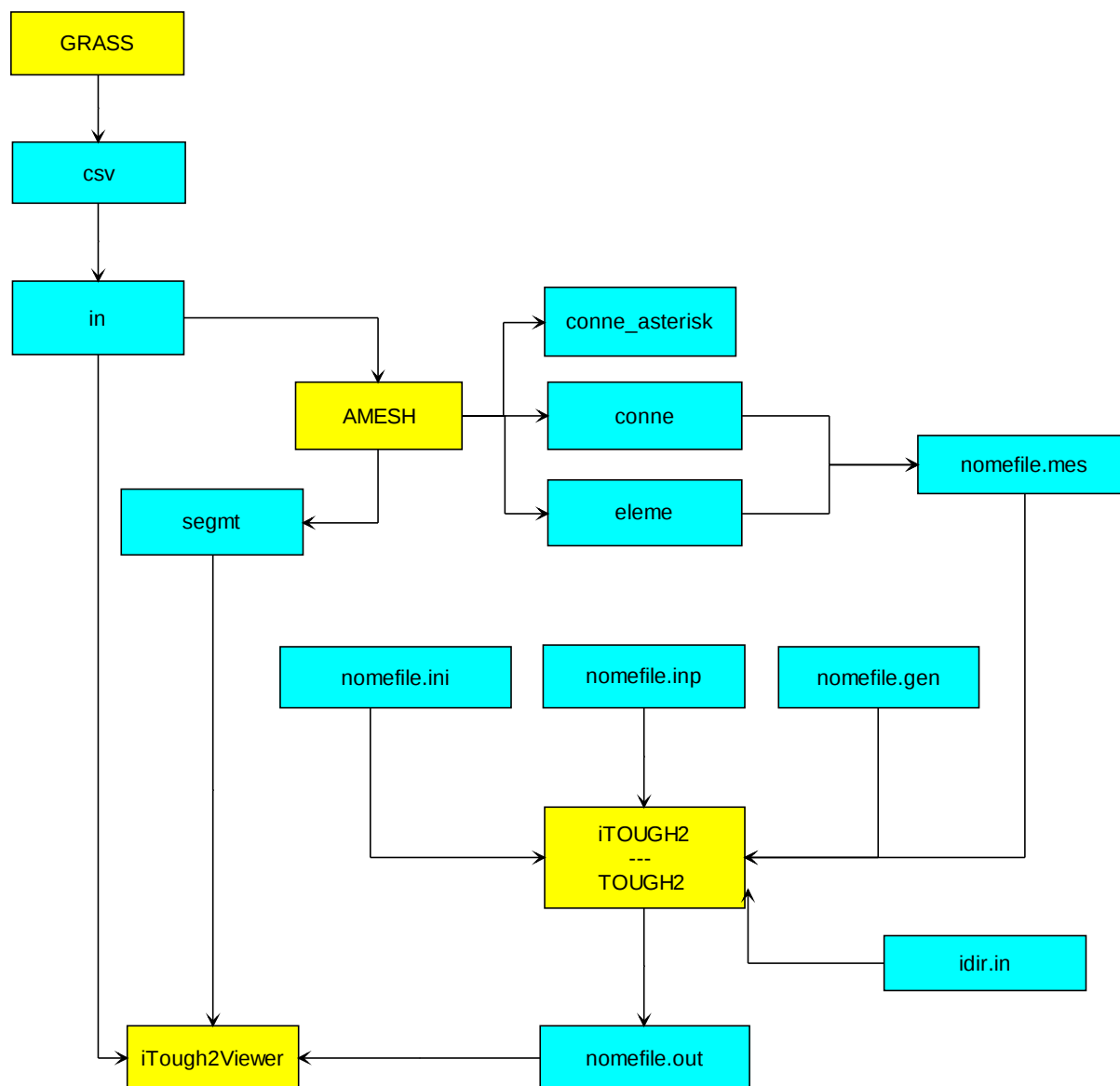


Figura 8.16. Diagramma di flusso della procedura per la simulazione

## 9. Architettura server / client ed interfaccia grafica

Le attività del MICC hanno riguardato l'analisi delle problematiche riguardanti la gestione dei dati inerenti l'interfaccia grafica di visualizzazione dei risultati delle simulazioni. In particolare l'interfaccia grafica è costituita da due moduli: input, per la selezione delle informazioni da visualizzare, e output, per la visualizzazione

degli stessi. Entrambi i moduli presentano funzionalità avanzate di interattività e rappresentazione dei dati complessi.

Allo stato attuale sono in fase di valutazione due possibili soluzioni per il modulo di input. Una prima soluzione consiste in una serie di funzionalità che attivano la simulazione direttamente, interfacciandosi con l'insieme di software (GRASS, AMESH, etc.) per l'elaborazione delle informazioni. Tale soluzione deve essere analizzata anche in funzione del tipo dell'architettura client-server dell'intero sistema e della possibilità di dialogare con i software per l'elaborazione dei dati.

La seconda soluzione si basa sul fatto che le procedure di generazione delle simulazioni vengano attivate in modo indipendente dall'interfaccia grafica. In questo caso il modulo di input consente di scegliere una delle simulazioni generate e memorizzate precedentemente tramite gli opportuni software. Allo stato attuale vengono analizzati i parametri (scelta della regione, intervallo di tempo, etc.) che possono essere modificati dall'utente per selezionare la simulazione da visualizzare.

Il modulo di output invece consente di interrogare il database contenente i risultati della simulazione e di visualizzarli opportunamente. Alcune funzionalità in fase di valutazione per la gestione dei dati possono essere: visualizzazione a strati 2D con variazione della quota tramite slider interattivo, zooming delle immagini, traslazione, salvataggio delle immagini in formati opportuni, possibilità di stampa, altro.

Un'altra parte di attività ha riguardato la valutazione degli strumenti software per l'implementazione dell'interfaccia grafica. Allo stato attuale vengono valutate tre diverse soluzioni lato client:

1. Ajax, XHTML, CSS, vantaggi: open source, velocità di sviluppo, scalabilità, svantaggi: problemi di compatibilità crossbrowser;
2. applet JAVA, vantaggi: open source, scalabilità, svantaggi: poco diffusa lato client, cpu expensive lato client;
3. Adobe Flash/Flex, vantaggi: scalabilità, interattività, svantaggi: no open source, cpu expensive lato client.

Per quanto riguarda invece la parte lato server la scelta ricadrà con molta probabilità verso il linguaggio di scripting PHP.

## **10. Casi studio per la verifica della robustezza dei codici**

Gli strumenti di Pre & Post Processing creati ad hoc, sono stati applicati a vari modelli numerici con lo scopo di verificarne il funzionamento e l'affidabilità.

I modelli utilizzati sono:

- modello 1D, colonna verticale
- modello 3D, stato naturale del bacino di Larderello

Entrambi i modelli sono basati su dati concordati con SAIPEM.

### **10.1. Modello 1D**

Dominio oggetto di studio:

- area interessata: 100x100 m
- strato di copertura: da +500 a 0 m s.l.m.
- reservoir shallow: da 0 a -1500 m s.l.m.
- reservoir deep: da -1500 a -3000 m s.l.m

Le dimensioni della griglia utilizzata per discretizzare questo dominio sono di 100x100x100 m. La griglia è stata ottenuta sia con il Meshmaker, sia con GRASS+AMESH.

Sono state eseguite simulazioni sia in ambiente Linux, sia in ambiente Windows adottando le due griglie sopracitate e utilizzando i medesimi parametri di simulazione (tempi di simulazione, condizioni iniziali, condizioni ai bordi, proprietà petrofisiche dei materiali e dei fluidi,...).

I risultati delle simulazioni, così effettuate, sono tra loro confrontabili

### **10.2. Stato Naturale del bacino 3D di Larderello**

La simulazione dello stato naturale del bacino di Larderello è stata eseguita prendendo in considerazione questo dominio:

- area interessata: 5 \* 5 km
- strato di copertura: da +500 a 0 m s.l.m.
- reservoir shallow: da 0 a -1500 m s.l.m.
- reservoir deep: da -1500 a -3000 m s.l.m

Questo dominio è stato discretizzato mediante due diverse griglie, una regolare e una irregolare (Figura 10.17. Griglia regolare per il bacino di Larderello, Figura 10.18. Griglia irregolare per il bacino di Larderello)

- griglia regolare: 10x10x36 blocchi (totale 3600)
- griglia irregolare: 141x36 blocchi (totale 5072)

|    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|
| 91 | 92 | 93 | 94 | 95 | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 |
| 81 | 82 | 83 | 84 | 85 | 86 | 87 | 88 | 89 | 90  |
| 71 | 72 | 73 | 74 | 75 | 76 | 77 | 78 | 79 | 80  |
| 61 | 62 | 63 | 64 | 65 | 66 | 67 | 68 | 69 | 70  |
| 51 | 52 | 53 | 54 | 55 | 56 | 57 | 58 | 59 | 60  |
| 41 | 42 | 43 | 44 | 45 | 46 | 47 | 48 | 49 | 50  |
| 31 | 32 | 33 | 34 | 35 | 36 | 37 | 38 | 39 | 40  |
| 21 | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30  |
| 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20  |
| 1  | 2  | 3  | 4  | 5  | 6  | 7  | 8  | 9  | 10  |

Figura 10.17. Griglia regolare per il bacino di Larderello

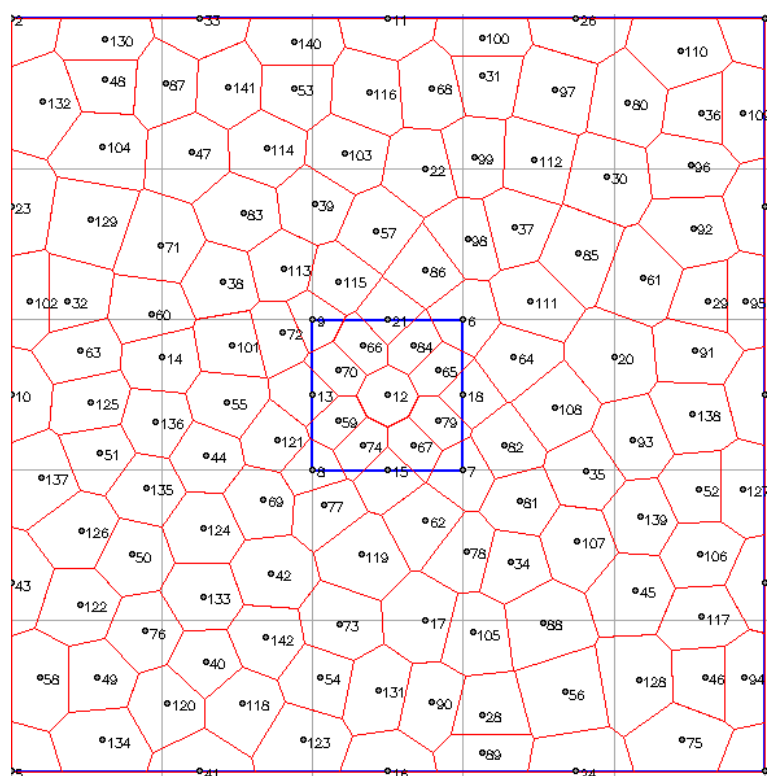


Figura 10.18. Griglia irregolare per il bacino di Larderello

La griglia regolare è stata ottenuta sia attraverso il Meshmaker, sia attraverso l'abbinamento di GRASS e AMESH, mentre la griglia irregolare è stata ricavata mediante GRASS+AMESH.

Sono state eseguite simulazioni sia in ambiente Linux, sia in ambiente Windows adottando le tre griglie sopraccitate e utilizzando ogni volta i medesimi parametri di simulazione (tempi di simulazione, condizioni iniziali, condizioni ai bordi, proprietà petrofisiche dei materiali e dei fluidi,...)

#### *10.2.1. Risultati delle simulazioni*

Le simulazioni hanno dimostrato che i valori delle grandezze fisiche nei blocchi della griglia regolare (sia per il Meshmaker, sia per GRASS+AMESH) e della griglia irregolare risultano tra loro confrontabili.

In virtù di questo risultato possiamo affermare che la procedura di creazione di griglie irregolari a poligoni di Voronoi, mediante GRASS e AMESH risulta corretta.

## **11. Modello ENEL del bacino di Larderello e Travale**

In virtù dei risultati ottenuti, si sta procedendo alla riproduzione della simulazione che ha effettuato l'ENEL mediante TOUGH2 per la procedura di V.I.A: delle centrali geotermoelettriche di Sasso 2 e Lagoni Rossi.

La simulazione ENEL si basa su una griglia regolare che comprende un bacino di 70x70 km e 7 km di profondità (Figura 11.19. Griglia regolare dell'ENEL georiferita)



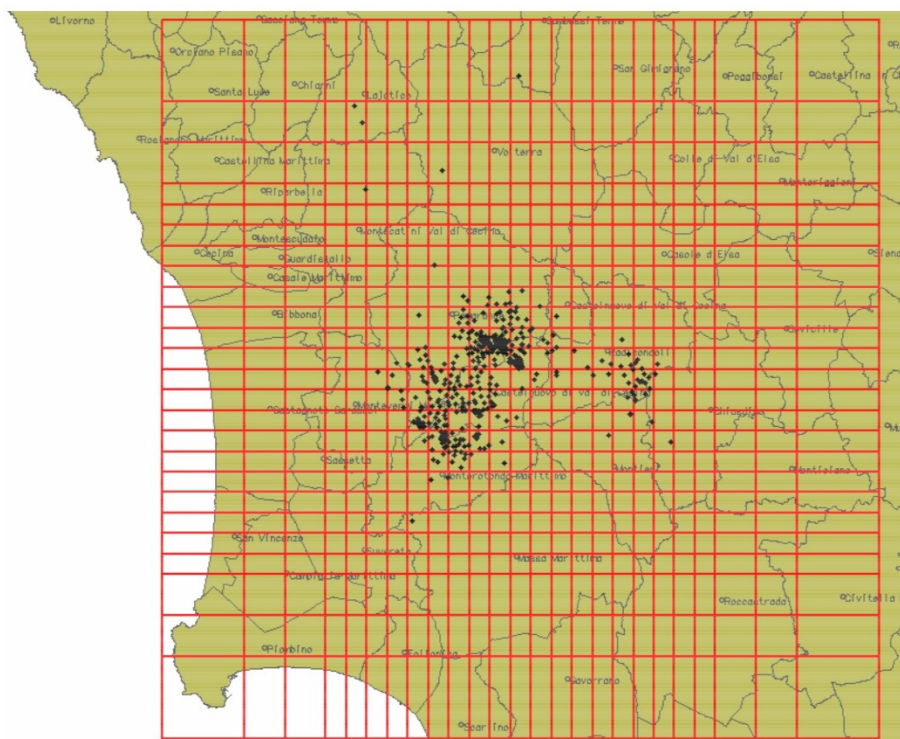


Figura 11.19. Griglia regolare dell'ENEL georiferita

Si prevede di affinare e migliorare questa simulazione mediante l'impiego di griglie irregolari ottenute attraverso gli strumenti per il Pre-Processing messi a punto da CINIGeo (Figura 11.20).

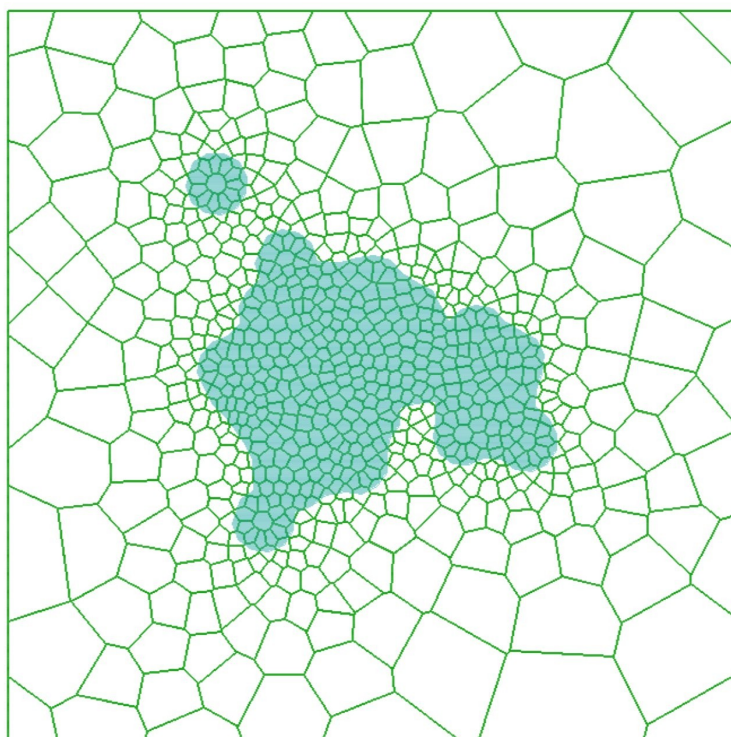


Figura 11.20. Ipotesi di griglia irregolare

## 12. Riferimenti Bibliografici

- [1] G. Andersen, A. Probst, L. Murray, and S. Butler. An accurate PVT model for geothermal fluids as represented by H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub>-NaCl mixtures. *Proceedings, Seventeenth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*, 17:239-248, 1992.
- [2] A. Battistelli, C. Calore, and K. Pruess. The simulator TOUGH2/EWASG for modelling geothermal reservoirs with brines and non-condensable gas. *Geothermics*, 26(4):437-464, 1997.
- [3] A Battistelli and M Marcolini. Tmgas: A new tough2 eos module for the numerical simulation of gas mixtures injection in geological structures. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 3(4):481 - 493, 2009.
- [4] Manson Benedict, George B. Webb, and Louis C. Rubin. An empirical equation for thermodynamic properties of light hydrocarbons and their mixtures ii. mixtures of methane, ethane, propane, and n-butane. *The Journal of Chemical Physics*, 10(12):747-758, 1942.
- [5] AB Comsol. COMSOL multiphysics user's guide. *Version: September*, 2005.
- [6] ZH Duan, N. Moller, and JH Weare. An equation of state for the CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O system: Mixtures from 50 to 1000° and 0 to 1000 bar. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 56:2619-2631, 1992.

- 
- [7] ZH Duan, N. Moller, and JH Weare. An equation of state for the CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O system: pure systems from 0 to 1000 and 0 to 8000 bar. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56:2605-2617, 1992.
- [8] D Geana and V Feriui. Thermodynamic properties of chlorine, nitrogen, oxygen and propylene using the GEOS-C equation of state. *Rev. Roum. Chim.*, 46(9):983-990, 2001.
- [9] R.A. Heidemann. Three-phase equilibria using equations of state. *AIChE Journal*, 20(5):847-855, 1974.
- [10] W. Henry. Experiments on the quantity of gases absorbed by water, at different temperatures, and under different pressures. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, pages 29-276, 1803.
- [11] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons Inc., 1963.
- [12] W.M. Kissling, K.L. Brown, M.J. O'Sullivan, S.P. White, and D.P. Bullivant. Modelling chloride and CO<sub>2</sub> chemistry in the wairakei geothermal reservoir. *Geothermics*, 25(3):285-305, 1996.
- [13] B.I. Lee and M.G. Kesler. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states. *AIChE Journal*, 21(3):510-527, 1975.
- [14] L Meacci. Modellazione di bacini geotermici. Master's thesis, Dip. di Matematica "U. Dini", Università degli Studi di Firenze, Firenze, Italy, 2008.
- [15] M.L. Michelsen. The isothermal flash problem. Part I. Stability. *Fluid Phase Equilibria*, 9(1):1-19, 1982.
- [16] ML Michelsen. The isothermal flash problem. Part II. Phase-split calculation. *Fluid Phase Equilibria*, 9:21-40, 1982.
- [17] M.L. Michelsen. State function based flash specifications. *Fluid Phase Equilibria*, 158:617-626, 1999.
- [18] JM Mollerup and ML Michelsen. Calculation of thermodynamic-equilibrium properties. *Fluid Phase Equilib.*, 74:1-15, 1992.
- [19] D. Müller and W. Marquardt. Dynamic multiple-phase flash simulation: Global stability analysis versus quick phase determination. *Computers and Chemical Engineering*, 21:817-822, 1997.
- [20] D.Y. Peng and D.B. Robinson. A New Two-Constant Equation of State. *Ind Eng Chem.. Fundam*, 15(1):59, 1976.
- [21] R.J. Perez and R.A. Heidemann. Coupling an equation of state and Henry's Law to model the phase equilibria of gases and brines Examples in the N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-NaCl system. *Journal of Geochemical Exploration*, 89(1-3):331-334, 2006.
- [22] K. Pruess and N. Spycher. ECO<sub>2</sub>N-A New TOUGH2 Fluid Property Module for Studies of CO<sub>2</sub>Storage in Saline Aquifers.
- [23] HH Rachford and JD Rice. Procedure for use of electronic digital computers in calculating flash vaporization hydrocarbon equilibrium. *J. Petrol. Tech*, 4(10):10-19, 1952.
- [24] RC Reid, JM Prausnitz, and BE Poling. *The properties of gases and liquids (ed.)*. McGraw-Hill, New York, 4th edition, 1987.
-

- [25] G Soave. Improving the treatment of heavy hydrocarbons by the srk eos. *Fluid Phase Equilib.*, 84:339–342, 1993.
- [26] P Sollich, P B Warren, and M E Cates. Moment free energies for polydisperse systems. *Adv. Chem. Phys.*, 116:265–336, 2001.
- [27] I. Søreide and CH Whitson. Peng-Robinson predictions for hydrocarbons, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>S with pure water and NaCl brine. *Fluid phase equilibria*, 77:217–240, 1992.
- [28] N. SPYCHER, K. PRUESS, and J. ENNIS-KING. CO<sub>2</sub> H<sub>2</sub>O mixtures in the geological sequestration of CO<sub>2</sub>. I. Assessment and calculation of mutual solubilities from 12 to 100 Å°C and up to 600 bar. *Geochimica et cosmochimica acta*, 67(16):3015–3031, 2003.
- [29] G. G. Tsypkin, C. Calore, and M. Marcolini. Mathematical modeling of cold water injection into a depleted high-temperature geothermal reservoir. *HIGH TEMPERATURE*, 44(3):450–457, MAY-JUN 2006.
- [30] G.G. Tsypkin and C. Calore. Role of capillary forces in vapour extraction from low-permeability, water-saturated geothermal reservoirs. *Geothermics*, 32(3):219–237, 2003.
- [31] GG Tsypkin and C. Calore. Influence of capillary forces on water injection into hot rock, saturated with superheated vapour. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(15-16):3195–3202, 2007.
- [32] G.G. Tsypkin and A.W. Woods. Vapour extraction from a water-saturated geothermal reservoir. *Journal of Fluid Mechanics*, 506:315–330, 2004.
- [33] CH Whitson and ML Michelsen. The negative flash. *Fluid phase equilibria*, 53:51–71, 1989.
- [34] GM Wilson. A Modified Redlich-Kwong Equation of State—Application to General Physical Data Calculations. In *65 th National AIChE Meeting, Cleveland, OH*, 1969.
- [35] Chierici G.L., Principi di ingegneria dei giacimenti di idrocarburi, 2004
- [36] Finsterle Stefan, *iTOUGH2 User's Guide*, 2007
- [37] Haukwa Charles B., *AMESH*, 1999
- [38] Kipp, K.L., P.A. Hsieh, e S.R. Charlton. Guide to the Revised Ground-Water Flow and Heat Transport Simulator: HYDROTHERM — Version 3, 2008
- [39] GeothermEx, Inc., Assessment of the state-of-the-art of numerical simulation of enhanced geothermal systems. United States, 1999
- [40] O'Sullivan Michael J., Karsten Pruess, Lippman Marcelo J., *State of the art of geothermal reservoir simulation*, *Geothermics* 30, no 4 (2001)
- [41] Pruess Karsten, *TOUGH2 User's Guide Version 2.0*, 1999