

PROPOSITION DE STAGE

IFP Energies Nouvelles

Direction Sciences et Technologies du numérique

1 et 4 avenue de bois-préau

92500 Rueil Malmaison, FRANCE

Intitulé

Amélioration des performances de l'algorithme de calcul de transport réactif dans le simulateur de processus multiphysiques en milieux poreux Geoxim

Contexte

Le simulateur Geoxim permet la simulation d'écoulement de fluides multiphasiques en milieu poreux dans des structures géologiques complexes en tenant compte des interactions chimiques ou thermiques avec le milieu traversé. Ce simulateur est utilisé pour l'étude de l'injection et la séquestration du CO₂ à long terme mais aussi pour les études en lien avec la géothermie. Geoxim est développé à IFPEN et est basé sur la plateforme logicielle parallèle Arcane co-développée avec le CEA-DAM. Grâce à cette plateforme Il est possible d'utiliser ce simulateur avec des supercalculateurs utilisant des centaines voire des milliers de cœurs de calcul.

Le calcul de Transport Réactif (TR) dans Geoxim qui est au cœur de ses capacités de simulation des interactions fluide-roche, constitue un challenge étant donné le très grand nombre d'inconnues considérées (plusieurs dizaines d'espèces chimiques par maille) et la très forte non-linéarité des équations associées.

Pour résoudre les équations algébriques issues de la discrétisation implicite des équations de TR, un algorithme original a été implémenté qui contourne la difficulté de résoudre d'un seul tenant l'ensemble des équations. Il permet de ramener la résolution à une séquence de problèmes non linéaires OD associés à chaque maille sans assemblage et ni résolution de gros systèmes linéaires et autorise en outre l'utilisation de pas de temps locaux à chaque maille, adapté à la non-linéarité locale des équations.

Cet algorithme par nature séquentiel a été parallélisé par une approche de type Décomposition de Domaine. Il fournit aujourd'hui une approche efficace pour les simulations métier dans le cas de run scalaire sur une seule unité de calcul mais cette efficacité n'est obtenue qu'au prix d'une perte de contrôle de la précision pour les runs multi-processeurs.

Objectifs

L'objectif de ce stage est donc d'améliorer les performances, notamment parallèles, de l'algorithme de Transport Réactif.

Plusieurs pistes sont identifiées :

- augmentation du recouvrement de l'approche Décomposition de domaine
- gestion de cycles dans le graphe d'écoulement
- switch local (i.e. dans certaines mailles) à une discrétisation explicite là où le pas de temps satisfait la condition CFL locale

Profil

M2 de type Master Mathématiques et applications, Calcul scientifique et simulation, Calcul haute performance et simulation

Connaissance du C++, méthode de parallélisation par Décomposition de Domaine

Responsable

Isabelle Faille, Thomas Guignon

Durée : 5 mois **Période :** à partir de mars 2025

Lieu : IFPEN – Rueil Malmaison, Le site est accessible en transport en commun.

Stage rémunéré

Candidature : Envoyer CV et lettre de motivation à isabelle.faille@ifpen.fr, thomas.quignon@ifpen.fr