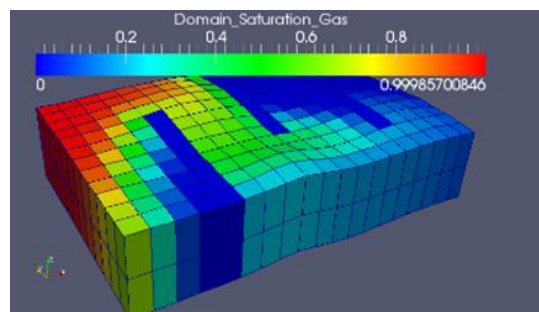


Méthodes numériques avancées pour les problèmes à forte raideur en transport réactif

La simulation du transport réactif en milieu poreux est un enjeu majeur pour la transition énergétique, avec des applications pour la séquestration du CO₂, la géothermie et le stockage d'hydrogène. Malheureusement, la performance des codes de transport réactif est aujourd'hui fortement limitée par les difficultés numériques liées à la modélisation chimique.



Numerical Simulation of CO₂ injection in aquifer

La convergence des méthodes de résolution des systèmes d'équations non-linéaires décrivant les équilibres chimiques est une des principales difficultés rencontrées. Deux choix fréquents existent pour la formulation du problème :

- Les inconnues sont les quantités de matière des espèces chimiques. Ce choix conduit à des équations linéaires pour la conservation de la masse et non-linéaires pour les équilibres chimiques. De plus, il faut veiller à assurer la positivité des inconnues lors de la résolution du système, et la grande étendue de l'intervalle de solution (de 1 mol/L à 10⁻¹⁵ mol/L) permet difficilement d'obtenir la précision attendue sur les inconnues.
- Les inconnues sont le log des quantités de matière des espèces chimiques. Ce choix conduit à des équations non-linéaires pour la conservation de la masse et linéaires pour les équilibres chimiques. Cela permet de s'affranchir des problèmes de positivité et de précision, cependant la convergence numérique de l'algorithme de résolution non-linéaire devient beaucoup plus difficile.

L'objectif de ce stage est d'aller au-delà de ces formulations classiques en adoptant un paramétrage intelligent des inconnues permettant d'alterner dynamiquement entre ces deux formulations [1].

Informations sur le stage :

Date de début : Mars-Juin 2020

Localisation : INRIA Lille – Nord Europe

Indemnité : ~ 500 € / Mo

Candidature : CV et lettre de motivation à clement.cances@inria.fr

References :

[1] S. Bassetto, C. Cancès, G. Enchéry, and Q. H. Tran, "Robust Newton solver based on variable switch for a finite volume discretization of Richards equation," Bergen, Norway, Jun. 2020, Accessed: Jan. 12, 2021. [Online]. Available: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02464945>.