

Instrumentation d'un outil de simulation géologique

Environnement.

Supervision: Olivier Hermant (olivier.hermant@mines-paristech.fr), Irina Sin (irina.sin@mines-paristech.fr)

Lieu: Centre de recherche en informatique et centre de géosciences, Fontainebleau

Contexte. La modélisation numérique des problèmes physiques permet de mieux comprendre la complexité des processus qui sont inaccessibles et impossibles à reproduire précisément par les moyens expérimentaux ou par les méthodes analytiques. HYTEC, développé au Centre de Géosciences de MINES ParisTech depuis 1994, est un code de transport réactif qui rassemble la modélisation des processus thermodynamiques, hydrodynamiques et chimiques (THC) en milieu poreux, et qui s'applique par exemple au stockage de CO₂ ou à la récupération in situ de minerai.

Au-delà de l'application et de la modélisation, une expertise du code (en C++) est nécessaire à plusieurs niveaux, du point de vue langage.

Problématique, enjeux et objectifs. La modélisation des problèmes de transport réactif sert à évaluer le comportement physico-chimique au passé, au présent et au futur. Les modèles s'appuient sur des paramètres d'entrée qui peuvent varier en temps et en espace. Ces paramètres sont la plupart du temps situées dans une fourchette d'incertitude et il y a un intérêt fort à explorer différents scénarios et d'étudier la sensibilité des paramètres. Ceux-ci sont fournis dans un fichier d'entrée ayant une syntaxe utilisateur simplifiée, interprétés ensuite par HYTEC pour construire un état initial à partir duquel la résolution commence.

L'objectif du stage est de pouvoir interrompre les calculs de la résolution numérique d'un problème initial A , d'en sauvegarder l'état courant s_A au temps t , puis, à partir de s_A et de t , de reprendre la résolution numérique d'un nouveau problème (ou de la série de problèmes) A_i , c'est à dire avec un nouveau jeu de paramètres i . Outre un temps de calcul drastiquement réduit, il devient alors possible d'interpoler et d'extrapoler les résultats de A_i sans exécution de HYTEC.

Le challenge de ce stage est de comprendre comment instrumenter un code

de calcul scientifique, sans ni perturber ni polluer celui-ci, de façon à être le plus générique et transparent possible. L'approche privilégiée est l'application de techniques provenant de la programmation orientée aspect.

Bibliographie.

- [LS05] Daniel Lohmann and Olaf Spinczyk. On typesafe aspect implementations in C++. In Thomas Gschwind, Uwe Aßmann, and Oscar Nierstrasz, editors, *Software Composition - 4th International Workshop, SC@ETAPS 2005, Edinburgh, UK, April 9, 2005, Revised Selected Papers*, volume 3628 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 135–149. Springer, 2005.
- [SLC17] Irina Sin, Vincent Lagneau, and Jérôme Corvisier. Integrating a compressible multicomponent two-phase flow into an existing reactive transport simulator. *Advances in Water Resources*, 100:62–77, 2017.
- [vDLG03] Jan van der Lee, Laurent De Windt, Vincent Lagneau, and Patrick Goblet. Module-oriented modeling of reactive transport with hytec. *Computers & Geosciences*, 29(3):265–275, 2003. Reactive Transport Modeling in the Geosciences.