

STAGE MASTER 2 : Développement numérique de modules géochimiques destinés au calcul des propriétés de l'eau et des solutions aqueuses salines

Lieu du stage: BRGM Orléans

Champs scientifiques: Thermodynamique

Mots-clés: calculs géochimiques, bases de données, C++

Durée du stage : 6 mois (février – juillet 2024)

Responsable du stage : Arnault Lassin

Date limite de candidature : 30 novembre 2023

Contact: envoyer CV et lettre de motivation à a.lassin@brgm.fr et l.andre@brgm.fr

Sujet :

Le BRGM est l'établissement public de référence dans les applications des sciences de la Terre pour gérer les ressources et les risques du sol et du sous-sol dans une perspective de développement durable. Son centre scientifique et technique est situé à Orléans.

Dans le cadre de ses activités, l'équipe MG2 (Minéralogie, Géochimie et Modélisation des milieux Géologiques) s'intéresse aux interactions chimiques, dans le sol et le sous-sol, entre les roches, l'eau et les gaz, dans des contextes plus ou moins extrêmes de température, de pression et de salinité. Ces conditions se rencontrent en particulier dans des applications de type géothermie, stockages de gaz en réservoir géologique ou de déchets nucléaires, ou dans des environnements favorables à la mise en place de gisements de minerais ou de sources d'énergies comme l'hydrogène.

Le rôle de l'eau et des solutions aqueuses y est souvent prépondérant et il est indispensable de pouvoir en décrire les propriétés thermodynamiques telles que la capacité calorifique, l'enthalpie, la masse volumique, la vitesse de propagation du son, etc.

L'objectif du stage est d'implémenter les équations pertinentes dans un code de calcul géochimique déjà existant, programmé en C++, afin de calculer ces propriétés des solutions. Les équations génériques sont connues, mais il s'agira de savoir les décliner pour tout système chimique composé d'un nombre variable d'éléments chimiques.

Le(a) stagiaire devra être en mesure de s'approprier le formalisme mathématique utilisé et l'interpréter pour ensuite l'implémenter correctement dans un programme informatique. Outre le développement du code numérique, des applications de l'outil sur des cas réels sont aussi à prévoir.