

# Groupement National de Recherches MoMaS

*Modélisations mathématiques et simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires*

## Rapport scientifique 2008

### 1 Thème A : Ecoulements multiphasiques

Cette thématique (resp. A. Bourgeat) regroupe 4 projets.

1. **Ecoulements multiphasiques, transport et réactions chimiques en milieu complexe** (UPMC-Sisyphé et LCD Poitiers), resp. P. Adler

Les efforts ont surtout porté sur la parallélisation de divers codes de calcul, en simple phase et en double phase, de manière à améliorer le temps de restitution. Les premiers codes concernés sont des codes basés sur un algorithme de Boltzmann sur réseau FCHC à quatre dimensions. Dans ce cas, l'utilisation de MPI a donné des résultats tout à fait insatisfaisants ; par exemple, le taux d'accélération obtenu avec huit processeurs est seulement de 1.6 pour la partie écoulement. Il a donc fallu ensuite changer de logiciel pour utiliser OpenMP qui est adapté aux processeurs multi-cœurs qui sortent actuellement avec une architecture de mémoire partagée. Les taux de restitution se sont alors avérés tout à fait satisfaisants (6.12 pour 8 processeurs). Le second logiciel qui a été parallélisé calcule la convection-dispersion-déposition d'un soluté qui se partitionne entre deux phases par une méthode de marche aléatoire. Dans ce cas, dans le même contexte, les taux d'accélération obtenus sont de l'ordre de 6.

Ce même projet commence de plus à prendre en compte la minéralogie nécessairement complexe des matériaux réels en affinant et en particulierisant la description de l'interface solide-pores. Ont été attribués par exemple des coefficients cinétiques particuliers aux différents éléments présents à la paroi. En fait est définie une paroi qui peut avoir une réactivité et une mouillabilité variant dans l'espace selon l'élément de surface considéré ; de plus, les éléments de surface des cubes élémentaires colmatés peuvent avoir une réactivité et une mouillabilité particulière.

2. **Modélisation et simulation numérique de la migration de gaz** (Univ Pau, UCB Lyon et LEMTA Nancy), resp. B. Amaziane

Ce projet est composé de 3 sous-projets collaborant étroitement entre eux, un à Pau autour de B. Amaziane, plus particulièrement centré sur l'aspect numérique, un second à Lyon autour de A. Bourgeat, plus particulièrement consacré à l'aspect modélisation mathématique et le troisième à Nancy autour de M. Panfilov, plus particulièrement consacré à l'aspect modélisation physique. Chacun de ces trois sous-projets prend cependant en compte, de façon complémentaire avec les autres sous-projets, les deux aspects Modélisation et Simulation Numérique.

L'équipe de Pau s'est intéressée essentiellement à la réalisation du Benchmark Couplex-Gaz et à l'amélioration de la modélisation de la migration de gaz dans le champ proche d'un stockage de déchets radioactifs en formation géologique profonde. Dans un premier temps, un état de l'art sur les différentes formulations existantes dans la littérature a été réalisé ainsi qu'une comparaison entre ces différentes formulations en précisant les avantages et les inconvénients de chaque formulation. Une nouvelle formulation a été obtenue à l'aide du concept de pression globale [1]. Cette formulation mène à un système couplé d'équations aux dérivées partielles composé d'une équation de pression globale parabolique et d'une équation de saturation parabolique non linéaire dégénérée de type diffusion-convection. Cette approche a l'avantage d'affaiblir le couplage entre les équations du modèle diphasique et se prête à une étude rigoureuse de point de vue mathématique et de

l'analyse numérique. Ensuite, un schéma numérique totalement implicite basé sur une méthode volume finis de type vertex-centered a été développé en utilisant un schéma de Godunov pour les termes convectifs et une approximation élément fini  $P_1$  pour les termes de diffusion. La mise en œuvre de ce schéma numérique est en cours. L'analyse numérique (stabilité, principe du maximum discret, et convergence) a été faite parallèlement au travail de programmation.

Le sous-projet de l'UCB-Lyon a proposé, face aux difficultés constatées lors de l'exercice Couplex-Gaz, un modèle d'écoulement compressible multiphasique en milieu poreux pouvant s'appliquer à la migration de gaz dans un stockage souterrain de déchets nucléaires. Le principal intérêt de cette nouvelle formulation est d'introduire, en s'appuyant sur les principes fondamentaux de la mécanique des fluides et de la thermodynamique, un cadre unifié pour traiter des écoulements totalement et partiellement saturés en eau ; rendant ainsi possible un traitement numérique unifié de ces situations. Une des difficultés essentielles concernant les modèles usuels était leur inaptitude à prendre en compte simultanément les situations totalement et partiellement saturées en eau, ce qui amenait à des problèmes numériques ou à l'introduction de contraintes numériques non physiques. Par exemple, les simulations utilisaient deux « artifices » : soit un changement de variable dans la maille où la phase disparaît/apparaît au cours d'une itération de Newton, soit le maintien artificiel d'une saturation en gaz  $\geq \varepsilon > 0$ . Les inconnues utilisées dans le nouveau modèle sont la densité totale d'hydrogène et la pression de la phase liquide [4]. Il a été à la fois démontré l'existence d'une solution de ce nouveau modèle, pour certaines données, et vérifié par simulation numérique [64] sa capacité à prendre en compte la disparition/apparition de phase, voir la figure 1 (à gauche).

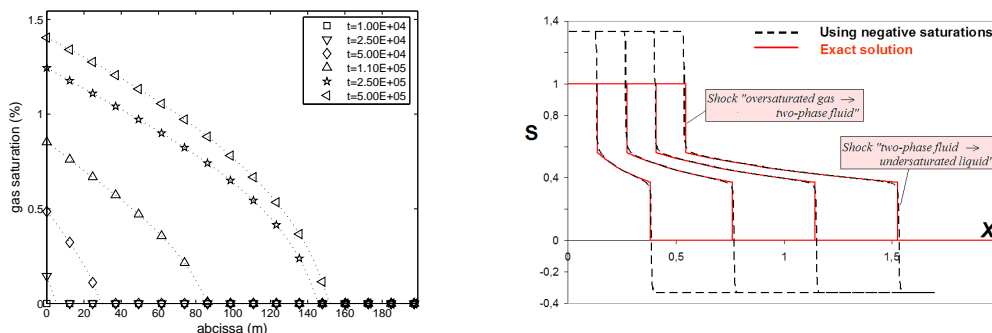


FIG. 1 – Injection continue d'hydrogène appliquée en  $x = 0m$ . Evolution de la saturation en gaz dans le milieu poreux à différents instants : les deux types d'écoulements, totalement et partiellement saturés, cohabitent. A gauche : problème avec capillarité traité à Lyon, à droite : problème de Riemann traité à Nancy.

Le sous-projet de Nancy a établi un résultat théorique, appelé principe d'équivalence, qui stipule qu'un fluide monophasique sur-saturé peut être remplacé par un fluide imaginaire diphasique dont la composition des phases satisfait les lois d'équilibre et des conditions de consistence dans le cas d'un écoulement diphasique compositionnel avec dissolution partielle des composants et transitions de phase. Une de ces conditions stipule que la saturation d'une des phases imaginaires est négative. Ce résultat permet d'introduire le concept étendu de saturation et d'utiliser dans tout le domaine les équations diphasiques dans ce formalisme étendu, indépendamment du nombre de phases présentes dans les diverses zones, celles-ci étant détectées automatiquement par la méthode. Ce résultat a été testé pour la résolution du problème de Riemann correspondant au déplacement d'eau par hydrogène dans un milieu poreux avec dissolution partielle. Le gaz injecté est sur-

saturé, l'hydrogène n'étant pas en équilibre avec l'eau), ce qui détermine l'existence d'une zone monophasique gazeuse à proximité du point d'injection, une zone monophasique aqueuse subsistant à l'autre bout du domaine, voir la figure 1 (à droite). Enfin, la méthode a été étendue au cas d'un écoulement avec diffusion, gravité et capillarité.

### 3. Méthodes mathématiques et numériques pour les écoulements diphasiques avec dissolution (Paris-Sud, Univ Aix Marseille, UMLV), resp. D. Hilhorst

Ce projet articule 4 sous-projets.

- Le premier (Angelini, Brenner, Eymard, Hilhorst et Vohralík) s'est attaché à comprendre et à analyser la méthode des volumes finis sur maillages quelconques, le but essentiel étant d'en préparer l'implémentation pour des problèmes d'écoulements diphasiques. Pour cela a été considérée une équation linéaire de convection-diffusion, avec terme de diffusion in-homogène et anisotrope, impossible à discrétiser par la méthode des volumes finis standard. Le terme de diffusion est discrétisé à l'aide d'une méthode d'éléments finis non conformes sur le maillage donné et les autres termes à l'aide de la méthode des volumes finis standard sur un maillage de volumes de contrôle construits autour des faces du maillage initial. La discrétisation temporelle est complètement implicite. La convergence de l'algorithme et les tests numériques correspondants ont été effectués dans le cadre du stage de Master 2 de K. Brenner.
- Dans le second sous-projet (Eymard, Henry et Hilhorst), on étudie la limite singulière du problème à deux phases quand la mobilité de l'air tend vers zéro. Le problème limite est un problème à frontière libre qui a la forme d'un problème de Richards généralisé. Cependant, il reste encore à caractériser complètement la limite de la solution. Un premier jeu d'essais numériques en une dimension d'espace, comparant la solution donnée par la simulation numérique du problème limite avec celle du problème diphasique complet, a permis de vérifier que les deux solutions obtenues sont très voisines.
- Le troisième sous-projet (Cancès et Gallouët) s'intéresse à des modèles d'écoulements diphasiques avec une fonction pression capillaire discontinue à l'interface entre deux milieux. Ont été étudiés l'élaboration du modèle, l'existence et unicité de la solution, la convergence de schémas numériques et l'apparition de chocs non entropiques quand la fonction pression capillaire converge vers une fonction constante par milieu.
- Le dernier sous-projet (Angelini, Chavant, Granier, Chénier et Eymard) s'intéresse à développer un schéma de volumes finis hybrides pour des simulations tri-dimensionnelles dans des géométries relativement complexes avec de grandes variations spatiales des propriétés du milieu lorsqu'il n'est pas possible d'utiliser les méthodes standard de volumes finis qui nécessiteraient une trop grande régularité du maillage. A partir de schémas de volumes finis proposés, dans le cas d'équations de diffusion linéaires et stationnaires par R. Eymard, T. Gallouët et R. Herbin, s'appuyant sur des maillages généraux et adaptés à des propriétés d'anisotropie avec des contrastes importants, on propose, dans le cas des problèmes d'évolution non linéaires, une méthode qui réduit la courbure locale de la solution discrète aux endroits où l'on observe une perte de monotonie. Un travail montrant qu'une méthode numérique, basée sur l'algorithme d'Uzawa, permet d'obtenir des solutions précises et monotones pour des problèmes fortement anisotropes, a été soumis pour publication [38]. Egalement a été implémenté dans le Code\_Aster le schéma Sushi de volumes finis sur maillage quelconque et son adaptation à des problèmes d'écoulements diphasiques généraux comportant des changements de phase et des phénomènes de dissolution. Le Code\_Aster s'appuyant essentiellement sur des formulations de type éléments finis, il a été nécessaire d'effectuer des adaptations informatiques pour pouvoir intégrer une classe suffisamment importante de schémas de volumes finis. La programmation de ce schéma d'évolution non linéaire est terminée et les premiers tests sont en cours.

### 4. Simulation numérique de transfert d'hydrogène (EC Nantes, Univ Toulon et Univ Nantes), resp. M. Saad

L'analyse mathématique des écoulements diphasiques immiscibles compressibles en milieu poreux, notamment les écoulements eau-gaz, a fait l'objet des publications [10, 11]. Sous l'hypothèse que les densités dépendent de la densité globale, l'existence de solutions pour le problème dégénéré est prouvée. Récemment, dans [42], cette condition a été relaxée en considérant que la densité de chaque phase dépend de sa propre pression et en généralisant l'analyse aux écoulements multiphasiques. Un article est en cours de rédaction sur ce thème en lien avec la thèse de Z. Khalil [81]. Parallèlement à cette approche théorique, à partir du modèle considéré dans le Benchmark Couplex-Gaz 2 proposé par l'ANDRA, un algorithme a été implémenté et est en cours de validation pour la simulation numérique des écoulements diphasiques compressibles en tenant compte de la dissolution. Finalement, dans le cadre de la thèse de B. Saad [83], et en collaboration avec le CEA-Saclay, ce projet s'intéresse à la simulation numérique d'écoulements multi-composants et plus particulièrement aux algorithmes tenant compte du caractère dégénéré des équations.

Les **journées scientifiques** du thème « Ecoulements multiphasiques » ont été organisées à Lyon les 4 et 5 Septembre 2008 par O. Gipouloux et A. Bourgeat. Elles ont réuni une quarantaine de participants, dont des membres de chacun des quatre projets ci-dessus. Dix-huit exposés ont balayé tout le spectre de la thématique et ont permis de faire le point sur les avancées et les attentes de chacun. Quatre partenaires (ANDRA, CEA, EdF, IRSN) étaient représentés et ont pu faire part de leurs problématiques. M. Cathelineau, Directeur du GNR Forpro, a été invité à exposer les problématiques de son groupement en vue d'interactions possibles avec Momas.

Enfin, une table ronde a été organisée afin de proposer des **cas tests (benchmarks)** synthétiques et représentatifs, chacun, d'une difficulté particulière de la simulation numérique des écoulements multiphasiques. Ces cas tests ont pour but de pouvoir faire le point sur les approches numériques variées au sein de la thématique, sur la façon dont chacun prend en compte ces difficultés numériques et enfin sur les résultats des différentes approches. Ces cas tests (à ce jour deux : un proposé par l'UCB-Lyon et l'autre par EDF ; l'Andra devrait en proposer un prochainement), sont disponibles à l'adresse

[http://sources.univ-lyon1.fr/cas\\_test.html](http://sources.univ-lyon1.fr/cas_test.html)

## 2 Thème B : Modèles et couplages

Cette thématique (resp. A. Mikelić) regroupe 5 projets.

### 1. Simulation thermo-hydro-mécanique de l'EDZ : méthodes régularisées et représentation discrète (L3S-R Grenoble, Lamsid, Institut d'Alembert/UPMC), resp. R. Chambon

La simulation de l'EDZ est un enjeu scientifique et technique majeur dans les études de stockage. Le projet précédent (« modélisation des couplages thermiques et hydrauliques en liaison avec l'endommagement mécanique ») ayant montré l'efficacité du modèle à micro-dilatation dans le cadre du benchmark HYDRO\_MECA, la priorité a été donnée en 2008 à la consolidation des acquis du précédent projet. Les acteurs scientifiques ont développé une méthode qui permet de suivre plusieurs solutions et de comparer les solutions notamment en terme d'étendue de l'EDZ et de perméabilité équivalente, en lien avec le point 5 de l'expression de besoins EDF. Le travail sur la Tache T1 (Interprétation des calculs régularisés HYDRO\_MECA Momas en terme d'extension d'EDZ) a été achevé et les participants ont présenté leur résultats dans plusieurs conférences. Notons aussi l'article [12] et la publication [65] (à paraître dans un ouvrage collectif). Enfin, le travail sur la Tache T2 (Amélioration du modèle pour limiter l'extension de la zone totalement endommagée) est bien avancé.

### 2. Homogénéisation du terme source : définition et validation de cas test (Univ Lyon 1), resp. O. Gipouloux

Le projet s'inscrit dans la continuation du projet précédent au sein du projet intégré Européen

PAMINA FP6-036404 avec deux partenaires du Groupement, l'IRSN (Ch. Serres et G. Mathieu) et le CEA (A. Genty). L'objectif est de mettre au point des cas tests afin d'évaluer l'influence du changement d'échelle sur le terme source pour la simulation du relâchement de radionucléides d'un stockage de déchets. La géométrie générale des cas tests se compose d'alvéoles de stockage connectées par une galerie d'accès. En 2008, le premier cas test a été mis en place (10 alvéoles dans une galerie fermée) et les simulations présentées aux conférences indiquent que les concentrations calculées à partir du modèle complet et à partir du modèle homogénéisé sont assez proches pour des temps  $t \geq 1000$  ans. Notons les 2 articles à paraître [13] et [14].

**3. Interfaces évolutives à la petite échelle : application au gonflement des géomatériaux** (LMSGC/Institut Navier, Champs/Marne), resp. E. Lemarchand

Les matériaux argileux (argilites, schistes argileux) et les matériaux à matrice cimentaire (béton, mortier) constituent deux classes de géomatériaux directement impliqués dans la problématique du stockage des déchets radioactifs. Ces matériaux ont la particularité d'exhiber des hétérogénéités à plusieurs échelles d'espace. Ce projet se concentre sur l'analyse des interfaces solide/fluide(s) et fluide(s)/fluide(s) évolutives sous l'effet de couplages, au moins en partie physico-chimiques, à une échelle non directement observable par l'ingénieur. Au cours de l'année 2008, les efforts se sont concentrés sur les phénomènes de dissolution et dissolution/précipitation de constituants de la phase solide des géomatériaux, en particulier dans le contexte de l'analyse et la compréhension de la dégradation des matériaux cimentaires. Les réalisations principales en 2008 incluent a) la définition des morphologies micro-structurales aux différentes échelles, avec prise en compte notamment de la phase Portlandite, et b) l'identification de la structure des lois d'interface couplées, estimations potentielles des termes de couplages chemo-poromécaniques.

**4. Modèles de dispersion efficace pour des problèmes de chimie-transport** (Univ Lyon 1, CMAP/Ecole Polytechnique, LMPA/Univ du Littoral, Univ Aix-Marseille 3, LEMTA-INPL Nancy), resp. A. Mikelić

Les travaux ont été développés dans cinq directions se complétant mutuellement.

- Homogénéisation d'un modèle de transport réactif dans des milieux poreux afin de comprendre la dispersion de Taylor dans une géométrie générale 3D [43]. Le modèle contient une équation de convection-diffusion dans les pores et une équation différentielle ordinaire linéaire pour l'adsorption sur la surface des pores. Pour une situation physique correspondant à de grands nombres de Péclet et de Damkohler, le modèle homogénéisé a été obtenu et a la forme d'une équation de convection-diffusion avec des coefficients efficaces dépendant du couplage entre la réaction, la convection et la diffusion.
- Ecoulement réactif à travers un tube capillaire [66]. Le soluté est transporté et diffusé par le fluide. À la frontière latérale de tube, les particules subissent une réaction d'adsorption-désorption. Les paramètres de transport et de réaction conduisent au régime des grands nombres de Péclet et de Damkohler. Utilisant la technique de la perturbation singulière anisotrope, les équations efficaces sont dérivées. En l'absence de réactions chimiques, elles coïncident avec celles de Taylor. Le résultat est comparé à la fermeture en modélisation de la turbulence et à l'approche par la variété centrale. En outre, une justification numérique du modèle efficace par une simulation directe est présentée.
- Dérivation rigoureuse du modèle efficace pour un réactif traversant un pore bidimensionnel étroit et long [16]. Les particules transportées et diffusées du soluté subissent les réactions infinies de taux d'adsorption à la frontière latérale de tube. Les paramètres de transport et de réaction conduisent au régime des grands nombres de Péclet et de Damkohler. La transformation de Laplace en temps a été employée afin d'obtenir de meilleures estimations que dans les travaux précédents de Mikelić et Rosier sur le même problème.
- Processus de sorption dans le charbon [17]. Ceux-ci ont été modélisés par une équation pseudo-parabolique dégénérée non linéaire pour la diffusion du  $\text{CO}_2$  dans le charbon, augmentée par

la contrainte provenant de la paroi amovible. Dans ce travail, l'entropie est employée afin d'obtenir l'existence globale d'une solution faible appropriée avec des dérivées premières de carré intégrable.

- Mise au point des mesures de transport en milieu poreux par IRM. Les procédures d'acquisition et de traitement d'images IRM de milieux poreux modèles (colonnes de billes de verre) sont actuellement au point. Des mesures de vitesse obtenues par IRM (gradients pulsés avec encodage de phase) ont été réalisées pour un écoulement de Poiseuille (tube) afin d'étalonner la technique puis dans des milieux poreux modèles. Voir également [19].

**Analyse du transfert couplé matrice-fracture** (GEMP/IMFT, LMAP/Univ Pau), resp. F. Plouraboué

Le but est de mieux comprendre comment le transport couplé entre fissures et matrice peut être modélisé dans le cadre du régime stationnaire et du régime propagatif sans effectuer l'approximation de Taylor (i.e., pour tout nombre de Péclet). En 2008, les efforts ont porté sur une reformulation en problème auto-adjoint du problème de Graetz [15, 45].

5. **Modèles fractionnaires pour le transport de matière en milieu poreux** (Univ Avignon), resp. M.C. Néel

Le but est d'expliquer les comportements diffusifs anormaux (non-Fickéens) en ajoutant un terme de viscosité de la forme  $\lambda \partial_t^\gamma c$  avec  $\gamma \in ]0, 1[$  si bien que la dérivée est fractionnaire. L'ajout de ce terme fournit un paramètre supplémentaire et l'idée est d'expliquer les données expérimentales, pour la dispersion du soluté dans un écoulement non-saturé, par ce modèle légèrement plus compliqué que le modèle Fickéen. Au niveau moléculaire, de telles formulations peuvent résulter formellement de modèles non-browniens avec terme de rétention [46]. La modélisation a également été enrichie en remplaçant l'opérateur  $(I + \lambda \partial_t^{\gamma-1})^{-1}$  par un produit de convolution temporel général.

Les **journées scientifiques** du thème « Modèles et couplages » ont été organisées par A. Mikelić à l'Université Lyon 1, Lyon, du 4 au 5 novembre 2008. Il y avait 28 inscrits (8 liés aux partenaires CEA, EdF et IRSN et 19 liés aux 5 projets de la thématique) et 14 exposés ont eu lieu. Tous les projets relevant de la thématique ont présenté leurs travaux ce qui a permis une interaction constructive avec les partenaires présents.

### 3 Thème C : Méthodes numériques

Cette thématique (resp. S. Huberson) regroupe 4 projets.

1. **Méthodes numériques pour les écoulements en milieux anisotropes et hétérogènes** (Univ Aix Marseille, UMLV, ENPC Champs, Univ Montpellier, Univ Clermont-Ferrand et Univ Nantes), resp. R. Herbin

Le Benchmark « Anis » dont le déroulement est décrit ci-dessous constitue l'un des points forts du projet. Par ailleurs, plusieurs résultats importants ont été acquis.

- L'analyse des schémas de volumes finis SUSHI a été complétée par une estimation d'erreur. Un article incluant une annexe sur l'analyse fonctionnelle discrète qui peut être utile pour l'analyse de convergence d'autres méthodes de discrétisation non-conformes a été soumis [91]. La convergence du schéma SUSHI a également été démontrée pour des problèmes non-linéaires incluant l'opérateur de Leray-Lions.
- Les propriétés génériques des méthodes de volumes finis permettant les couplages de différentes zones ont été étudiées pour l'opérateur de convection-diffusion [70, 40].
- Les méthodes de Galerkin discontinues pour l'approximation des équations de convection-diffusion-réaction ont été formulées et analysées dans le cas d'un tenseur de diffusion symétrique mais uniquement semi-défini positif [21]. L'utilisation d'une moyenne de pondération dépendant de

la diffusion et de coefficients de pénalisation proportionnels à la moyenne harmonique de la diffusivité normale à l'interface des éléments sont des éléments clés de la méthode.

- La méthode DDFV bi-dimensionnelle a été utilisée pour construire un schéma précis au second ordre pour le problème de convection-diffusion. La convergence a été démontrée pour le cas diffusif. Des tests numériques ont également confirmé la précision au second ordre de ces schémas [49]. Les méthodes DDFV ont été étendues au traitement de cas anisotropes, hétérogènes et non-linéaires. Différentes stratégies ont été proposées pour étendre la méthode aux cas tridimensionnels [69, 48]. La comparaison entre ces différentes méthodes est en cours. Enfin, l'application de l'algorithme de Schwarz aux méthodes DDFV pour les cas plans est en cours d'étude [47, 68].

## 2. Méthodes particulières pour les milieux poreux (Univ Poitiers, Univ Bordeaux, LIMSI, Inria Nancy), resp. S. Huberson

Ce projet a deux objectifs : adapter la méthode particulière pour traiter les problèmes de champ lointain et prendre en compte les incertitudes sur les caractéristiques du terrain réel. En conséquence, les trois points suivants ont été abordés.

- Un solveur particulière de l'équation de convection-diffusion incluant l'utilisation de fonctions de régularisation à support compact et de maillages de chaînage ainsi qu'un haut degré de parallélisation a été construit pour le cas d'un transport tridimensionnel.
- Un champ de vitesse et des caractéristiques de terrain réel ont été fournis par l'ANDRA pour tester la méthode. La méthode de communication particule-maillage mise au point dans le cadre du précédent projet a été étendue au cas tridimensionnel pour des grilles type volumes-finis non structurées. Les deux techniques habituelles de prise en compte de la dispersion (PSE et vitesse de dispersion) sont en cours de tests comparatifs sur ces données.
- Une première stratégie de prise en compte des incertitudes a été implémentée. Dans cette approche, les particules sont transportées avec les propriétés moyennes du milieu (vitesse et dispersion moyennes) alors que l'incertitude est traitée grâce à la technique PSE étendue à des représentations en polynômes de chaos.

## 3. Solveurs pour l'écoulement et le transport en champ lointain (Inria Rocquencourt, UPMC, Univ Paris 13, Univ Troyes), resp. J. Jaffré

Les activités de ce projet sont distribuées sur quatre sous-thèmes.

- Décomposition de domaine en temps (LAGA et Projet Estime). Le mémoire de Master de A. Keller a montré comment implémenter une formulation basée sur la méthode du complément de Schur associée à un problème d'interface discrète. Par ailleurs, la méthode de relaxation de Schwarz optimisée couplée avec des éléments finis discontinus en temps a été étudiée sur une version simplifiée du Benchmark Couplex 2D.
- Génération de maillage (Projet Estime et LASMIS). Une méthode adaptative pour la construction de maillages hexaédriques a été élaborée. Les maillages ont vocation à être testés sur des calculs de l'écoulement de Darcy 3D en champ lointain. L'adaptativité sera obtenue par un raffinement du maillage hexaédrique grossier suivant certains critères.
- Algèbre linéaire numérique (Laboratoire J.L. Lions). Des conditions de transmission efficaces et la construction de bons maillages grossiers ont été étudiés pour la décomposition de domaine algébrique ainsi qu'une version améliorée de la méthode de factorisation emboîtée, très populaire en ingénierie pétrolière, pour les préconditionneurs de type ILU.
- Problèmes de complémentarité non-linéaire (Projet Estime). La possible disparition de l'une des phases dans un écoulement diphasique à deux composants a été formulée comme un problème de complémentarité. La thèse de I. Ben Gharbia a pour sujet la construction d'un solveur pour ce type de problème. Ce solveur devrait également pouvoir être appliqué à d'autres problèmes, par exemple de dissolution-précipitation.

## 4. Modélisation et simulation du transport réactif (Inria Rocquencourt, IMFS, Inria Rennes), resp. J. Ehrel et M. Kern

Les points suivants ont été abordés.

- Décomposition de domaine pour le transport réactif (IMFS). Des éléments finis discontinus sont utilisés pour le transport par convection et des volumes finis pour le transport par dispersion. Une estimation d'erreur a posteriori a été développée pour déterminer le raffinement du maillage. L'intégration en temps étant explicite, le CFL est fixé à 1 et il est nécessaire d'adapter le pas de temps aux variations du maillage ce qui conduit à l'utilisation d'un pas de temps local. L'évolution du maillage est contrôlée par l'estimation d'erreur et des critères spécifiques entraînant une éventuelle adaptation complémentaire.
- Diffusion active en milieux poreux (IMFS). La première partie de ce travail est expérimentale et aujourd'hui achevée. Les expériences de transport réactif incluant une réaction redox entre du fer et du chrome ont été réalisées dans une cellule bidimensionnelle de 33cm. Le modèle réactif décrivant la chimie de l'interaction chrome-fer est en cours de construction et des expériences sur une cellule plus grande (150cm), toujours en configuration plane, sont en préparation.
- Méthode ELLAM pour les écoulements réactifs en milieu hétérogène (IMFS). La méthode ELLAM a été utilisée pour résoudre des problèmes de transport convectif dominant en milieu poreux. Contrairement aux méthodes eulériennes, la méthode peut utiliser de grands pas de temps car il n'y a pas de condition de CFL. Toutefois, des précautions doivent être prises pour traiter les termes dispersifs et réactifs dans des milieux hétérogènes. Une procédure alternative, basée sur la construction d'un coefficient de dispersion équivalent et un taux de réaction équivalent quand différentes zones sont traversées durant la convection a été proposée. L'efficacité de la procédure a été démontrée par des expériences numériques.
- Formulation DAE (Rennes). Un code de calcul permettant de traiter les problèmes 1D/2D/3D est disponible dans le logiciel libre MT3D. Ce code a été utilisé pour résoudre les cas tests de transport réactif 1D et 2D proposés dans Alliances et le volet "easy test case" du benchmark Transport Réactif décrit ci-dessous.
- Développement d'un algorithme unidimensionnel pour résoudre le problème de transport réactif couplé avec application au cas test (1D, easy) du benchmark Transport Réactif (Rocquencourt). Ce travail est basé sur la méthode de Newton-Krylov et fait partie de la thèse de L. Amir (soutenance prévue en décembre 2008). Le stage d'A. Perrin a été l'opportunité pour étudier des schémas d'intégration en temps d'ordre supérieur. Ce travail a également été étendu à des géométries 2D et 3D. La bibliothèque C++ d'éléments finis Life V a été utilisée. Dans le cadre d'un projet Cemracs, une méthode de point fixe a été implémentée et testée et une méthode de Newton-Krylov utilisant la bibliothèque Sundials/Kinsol est en cours d'implémentation.

Les **journées scientifiques** du thème « Méthodes numériques » ont été organisées par S. Huberson le 14 Novembre 2008 à l'Institut Henri Poincaré. Cette journée a réuni 26 participants du groupement. 11 exposés représentant tout les projets de la thématique ont été présentés et ont permis de faire le point sur l'avancement des différents problèmes abordés.

## 4 Thème D : Analyse d'erreur et incertitudes

Cette thématique (resp. O. Le Maître) regroupe 3 projets.

1. **Estimation de paramètres hydrodynamiques par approche inverse multi-échelle et Estimation de paramètres de transport pour un milieu hydro-géologique** (IMFS, Univ Nice), resp. Ph. Ackerer/J. Blum

Ce projet concerne l'identification par des méthodes inverses des propriétés physiques des milieux poreux naturels et articule deux sous-projets.

- Le premier sous-projet, piloté Ph. Ackerer de l'IMFS de Strasbourg (avec M. Fahs) et mené en collaboration avec le laboratoire HydrASA de Poitiers (F. Delay, G. Porel), concerne l'identification des paramètres *hydrodynamiques* locaux des sols (conductivités hydrauliques et porosités).

Dans un premier temps, un modèle classique a été utilisé pour l'identification à partir de mesures effectuées sur le site de Poitiers et a permis d'obtenir un bon accord entre les données simulées et mesurées. Dans un second temps, un modèle à double échelle pour les milieux fracturés a été considéré. Le système adjoint associé au modèle double échelle a été dérivé et la procédure d'identification testée avec succès sur des données générées numériquement. Ces tests numériques ont montré la convergence en quelques itérations de la procédure d'identification ainsi que sa robustesse.

- Le second sous-projet piloté par J. Blum au Laboratoire Dieudonné de l'Université de Nice (avec Th. Migliore) est mené en collaboration avec l'INRIA Sophia-Antipolis (L. Hascouet), l'ANDRA (L. Loth et D. Coelho) et l'Institut de Mathématiques de Toulouse (D. Auroux). Le projet vise au développement et à l'application d'une méthode d'identification des paramètres physiques non mesurables caractéristiques des couches géologiques, tels que les porosités et les coefficients de diffusion. L'identification s'appuie sur un modèle de convection-diffusion (problème direct) résolu par le code TRACE développé par l'IMFS de Strasbourg et l'ANDRA et une procédure d'identification par moindres carrés. L'année 2008 a été consacrée à la dérivation et à la validation du code adjoint pour le modèle de convection-diffusion. Le code adjoint a été généré par différenciation automatique du code TRACE à l'aide du logiciel TAPENADE de l'INRIA Sophia-Antipolis. La validité de la procédure d'optimisation a été démontrée pour l'identification de paramètres de porosité et de diffusion dans les différentes couches. L'outil est à présent prêt pour l'identification à partir de données réelles fournies par l'ANDRA.

## 2. Propagation et quantification des incertitudes par polynômes de chaos (LIMSI, UPMC, Univ Nantes, ENPC Champs), resp. O. Le Maître

Ce projet placé sous la responsabilité de O. Le Maître au LIMSI-CNRS (avec L. Mathelin) est mené en collaboration avec A. Ern (CERMICS, ENPC), D. Lucor (IJLRDA-CNRS, UPMC), J.-M. Martinez (CEA/DM2S, Saclay) et A. Nouy (GeM, Université de Nantes). Il concerne le développement et la mise au point de techniques de propagation d'incertitudes paramétriques (sur les propriétés physiques des milieux) dans les modèles de transport. Les techniques considérées se basent sur des développements en polynômes de chaos stochastiques. Deux approches alternatives de résolution sont confrontées sur un ensemble de problèmes de convection-dispersion (non-réactifs).

- Plusieurs approches non-intrusives reposant sur un ensemble de simulations déterministes effectuées au sein de la plate-forme Alliances (CEA-EdF-ANDRA) pour calculer les coefficients de la projection stochastique ont été appliquées. Une méthode adaptative a été mise en œuvre pour minimiser le nombre de simulations à effectuer et ainsi réduire significativement le coût numérique de la projection. Différents critères d'adaptation ont aussi été testés. Ces travaux ont permis de caractériser les incertitudes sur les concentrations et flux des radio-éléments, puis de mener des analyses de sensibilité globale pour des problèmes faisant intervenir jusqu'à une quinzaine de paramètres incertains.
- Les approches intrusives par projection de Galerkin reposent sur la résolution d'un problème de grande dimension pour les coefficients de projection. Compte tenu des difficultés de mise en œuvre de ces approches (potentiellement plus efficaces et précises que les méthodes non-intrusives), les travaux se sont limités en 2008 à la partie hydraulique des problèmes (modèle de Darcy). Plusieurs préconditionneurs et une approche par réduction de modèle (approximation sur base réduite) ont été testés. Ces expériences numériques ont démontré l'intérêt de l'approche par réduction de modèle qui permet d'envisager son emploi dans des codes de calcul déterministes industriels, type Alliances, moyennant de légères adaptations. L'extension de ces méthodes aux équations de convection-dispersion est en cours d'étude.

## 3. Estimations d'erreur a posteriori pour le contrôle d'erreur et l'adaptation de maillage (UPMC, ENPC Champs, Univ Paris 13), resp. M. Vohralík

Ce projet, placé sous la responsabilité de M. Vohralík du Laboratoire J.-L. Lions de l'UPMC, est

mené en collaboration avec Paris 13 (L. El Alaoui), l'ENPC (A. Ern) et le CEA-Saclay (P. Omnes). Le projet porte sur le développement d'estimateurs d'erreur a posteriori pour l'adaptation de maillage et concerne une large gamme de techniques de discrétisation : volumes finis (FV), Galerkin Discontinu (DG), éléments finis (FE). En 2008, les travaux ont principalement porté sur la consolidation des théories d'estimation d'erreur a posteriori pour les problèmes du second ordre linéaires stationnaires, et sur l'extension de ces théories aux problèmes non-linéaires instationnaires (notamment les équations de convection-diffusion-réaction). Les principales avancées ont porté sur (a) le développement d'estimateurs d'erreur a posteriori robustes vis-à-vis des régimes dominés par les effets convectif, réactif ou diffusif (DG, FE, FV) ; (b) la robustesse des estimateurs vis-à-vis d'inhomogénéités du coefficient de diffusion (FV, DG, mixed-FE) ; (c) l'extension de certaines théories aux maillages non-conformes ; (d) le développement d'estimateurs a posteriori pour l'erreur d'intégration en temps (mixed-FE) ; (e) l'utilisation des estimateurs d'erreur a posteriori pour la stabilisation optimale (stabilized-FE) ; (f) l'unification des théories a priori et a posteriori (mixed-FE). Un point important à noter est l'implémentation de certains de ces estimateurs dans un code de calcul du CEA pour les équations de Darcy.

Deux journées scientifiques ont été organisées en lien avec les travaux ci-dessus.

1. Une journée sur **l'analyse d'erreur a posteriori**, les maillages adaptatifs et le contrôle d'erreur a été organisée par M. Vohralík, L. El Alaoui et A. Ern le 13 octobre 2008 au Laboratoire J.-L. Lions de l'université Paris 6. Outre une présentation des travaux du projet ci-dessus sur les estimations d'erreur a posteriori, six conférenciers invités ont présenté leurs travaux récents sur le sujet : M. Ainsworth (Glasgow University), Ch. Bernardi (UPMC), C. Carstensen (Humboldt University of Berlin), A. Veiser (Université de Milan), R. Verfürth (Ruhr-Universität Bochum) et B. Wohlmuth (Université de Stuttgart). La journée a réuni un grand nombre de participants, dont 8 des partenaires du groupement, 13 scientifiques en provenance de l'étranger et une trentaine de scientifiques travaillant en France.
2. Une journée sur le traitement des **incertitudes** a été organisée par O. Le Maître le 13 Novembre 2008 à l'Institut Henri Poincaré. Cette journée a réuni 25 participants du Groupement et extérieurs, autour de 4 présentations invitées (C. Soize, Université de Marne la Vallée ; F. Nobile, Politecnico Milano ; Gaël Poette, IJLRDA-UPMC ; S. Boyaval, CERMICS-ENPC) et 4 présentations par des participants du groupement (C. Crestaux, CEA-Saclay ; A. Nouy, GeM-Université de Nantes ; F. Smaï, ISTIL-Université Lyon 1 ; O. Le Maître, LIMSI-CNRS).

## 5 Benchmarks

### 5.1 Transport réactif (TR)

L'objectif de ce benchmark, piloté par J. Carrayrou (IMFS, Strasbourg), est de proposer un exercice d'inter-comparaison de codes axé sur les difficultés numériques et non sur les phénomènes. Pour ce faire, l'exercice est conçu comme un cas de transport réactif fictif utilisant les lois fondamentales réelles : équation d'advection-dispersion-réaction, loi d'action de masse. L'exercice comporte 3 niveaux : "easy", "medium" et "hard" ; déclinables en version 1D ou 2D. Durant le "International Workshop on Reactive Transport in Porous Media" organisé à Strasbourg du 21 au 24 janvier 2008, une journée a été dédiée à la restitution des travaux réalisés sur ce benchmark. 10 équipes ont résolu cet exercice, utilisant 10 méthodes numériques différentes. C'est, à notre connaissance, la première fois qu'un exercice d'inter-comparaison de cette ampleur est mené sur cette thématique. Afin de valoriser le travail effectué, un numéro spécial de la revue *Computational Geosciences*, intitulé "MoMas Reactive Transport Benchmark", est en cours de finalisation.

Les résultats ont été officiellement proclamés en novembre 2008. Les prix, pour un montant total de 10000 Euros, ont été divisés comme suit :

1. K.U. Mayer, K.T.B. McQuarrie (University of New Brunswick et University of British-Columbia) MoMaS benchmark problems : MIN3P implementation (3000 Euros)
2. J. Hoffmann, S. Krättele, P. Knabner (Université d'Erlangen) : Computation of the MoMaS benchmark problem with a parallel global-implicit 2-D solver based on a reformulation of the PDE-ODE system (3000 Euros)
3. V. Lagneau, J. van der Lee (Mines ParisTech) HYTEC results of the MoMaS reactive transport benchmark (2000 Euros)
4. C. de Dieuleveult, J. Ehrel (INRIA) A global approach for reactive transport : application to the benchmark easy test case of MoMaS (2000 Euros)

## 5.2 Diffusion anisotrope (ANIS)

Un benchmark pour la discrétisation de problèmes de diffusion anisotropes et hétérogènes sur maillages généraux a été élaboré par R. Herbin et F. Hubert (LATP, université Aix Marseille), avec la contribution de I. Aavatsmark, F. Boyer, R. Eymard, T. Gallouët, C. Le Potier, G. Manzini et R. Masson. Il est bâti autour de neuf cas tests bi-dimensionnels portant sur la résolution du problème générique  $\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla u) = f$ , avec conditions aux limites. Le tenseur  $\mathbf{K}$  peut être anisotrope, hétérogène et discontinu. Les maillages considérés sont triangulaires ou quadrangulaires, et dans certains cas déformés ou non conformes. Les résultats ont été présentés dans une session spéciale du congrès FVCA5 qui s'est tenu en Juin 2008 à Aussois, et publiés dans les actes de ce congrès. 20 participations ont été reçues, dont neuf de MOMAS [86, 87, 88, 89, 90, 91, 93, 94, 95]. De nombreuses méthodes ont été proposées : éléments finis, Galerkin discontinu, méthodes de volumes finis centrées par maille ou par sommet, ou de type dualité discrète, méthodes mimétiques... Les résultats donnés pour chaque schéma incluent le nombre d'inconnues, le nombre d'éléments non nuls dans la matrice, l'ordre de convergence, le respect ou non des bornes physiques, les valeurs de l'énergie.

Ces résultats ont été synthétisés et comparés dans un article [92] également paru dans les actes du congrès. On peut noter leur relative homogénéité. On a pu observer que les schémas d'ordre supérieur (éléments finis, Galerkin discontinu) ont un meilleur ordre de convergence, conformément à la théorie, et que les méthodes de type DDFV (dualité discrète) donnent une erreur particulièrement faible pour le gradient. Les méthodes FV centrées et FD mimétiques semblent un peu plus robustes en ce qui concerne le respect des bornes physiques ou le principe du maximum. Des schémas non linéaires ont montré la possibilité de respecter ces principes.

Le benchmark a permis de se rendre compte que les méthodes de type mimétique, VF hybrides et VF mixtes sont très proches. Un travail de comparaison théorique est en cours de rédaction. Il est envisagé de poursuivre ce benchmark par des tests sur des équations non linéaires modèles présentant des difficultés typiques de celles rencontrés dans les équations en milieux poreux réactifs, telles que l'équation de Stefan ou l'équation de Richards, de proposer également des cas 3D, et enfin de s'intéresser à des équations de diffusion convection couplées.

## 6 Autres actions spécifiques

1. Le Professeur P. Knabner de l'Université d'Erlangen a tenu le 17 janvier 2008 à l'Institut Henri Poincaré une journée de cours intitulée "Reactive Transport in Porous Media : Models, Analysis and Simulation" à laquelle ont assisté une vingtaine de membres du groupement dont des partenaires et des jeunes chercheurs.
2. Dans le cadre du Colloque EUROMECH qui s'est tenu à Nancy du 9 au 12 juin 2008, plusieurs membres du groupement ont présenté leurs travaux, notamment sur les écoulements multiphasiques. Une sélection des contributions à ce congrès sera publiée dans un numéro spécial de la revue *Transport in Porous Media*.

3. Du 13 au 16 octobre 2008 s'est tenue à Dubrovnik une conférence internationale intitulée "Scaling up and modeling for transport and flow in porous media". 26 conférenciers invités sont intervenus, dont plusieurs membres des projets du groupement, de son Conseil scientifique ainsi que des experts internationaux, notamment des Etats-Unis. Cette conférence a été l'occasion de nombreux échanges scientifiques directement en lien avec les projets du groupement.
4. Une journée de séminaires sur les "Méthodes numériques pour les fluides" a été organisée par J.-P. Croisille (Université de Metz, en collaboration avec F. Dubois (CNAM), A. Ern (ENPC), R. Luce (Université de Pau) et J.-F. Maitre (Ecole Centrale de Lyon)) le 4 décembre 2008 à l'ENPC, Champs sur Marne. Cinq conférenciers invités sont intervenus : ShiPeng Mao (ICM, Beijing), C. Chainais-Hillairet (Université de Clermont-Ferrand), Ch. Le Potier (CEA), L. Agelas (IFP) et D. Capatina (Université de Pau).

## 7 Publications

### Références

#### Articles parus ou acceptés

- [1] B. Amaziane and M. Jurak, A new formulation of immiscible compressible two-phase flow in porous media, *C. R. Acad. Sci. Paris, Mécanique*, **336**, 600–605 (2008).
- [2] B. Amaziane and M. El Ossmani, Convergence analysis of an approximation to miscible fluid flows in porous media by combining mixed finite element and finite volume methods, *Numer. Methods Partial Differential Equations*, **24**, 799–832 (2008).
- [3] B. Amaziane, M. El Ossmani and Ch. Serres, Numerical modeling of the flow and transport of radionuclides in heterogeneous porous media, *Computational Geosciences*, DOI 10.1007/s10596-008-9083-0 (2008).
- [4] A. Bourgeat, M. Jurak and F. Smaï, Two-phase partially miscible flow and transport modeling in porous media; application to gas migration in a nuclear waste repository, *Computational Geosciences*, (2008)
- [5] Abadpour A., Panfilov M. Principle of Equivalence and Method of Negative Saturations for two-phase Compositional Flow with Oversaturated Zones. *Transport in Porous Media*. Accepted on November 6 (2008).
- [6] Ilina T., Panfilov M., Buès M., and Panfilova I. A pseudo two-phase model for colloid facilitated transport in porous media. *Transport in Porous Media*, **71**, no. 3, 311-329 (2008).
- [7] Panfilov M., Stepanyants Y., and Panfilova I. Mechanisms of particle transport acceleration in porous media. *Transport in Porous Media*, **74**, no 1, 49-71 (2008).
- [8] C. Cancès, Nonlinear parabolic equations with spatial discontinuities, à paraître dans *Nonlinear Differential Equations and Applications*.
- [9] C. Cancès, T. Gallouët, and A. Porretta, Two-phase flows involving capillary barriers in heterogeneous porous media, à paraître dans *Interfaces and Free Boundaries*.
- [10] C. Galusinski and M. Saad, A nonlinear degenerate system modeling water-gas in reservoir flow, *Discrete and continuous dynamical systems series B, Vol. 9, Num. 2.*, **281–308** (2008).
- [11] C. Galusinski and M. Saad, Two compressible and immiscible fluids in porous media, *J. Differential Equations*, 244, **1741–1783** (2008).
- [12] R. Fernandes, C. Chavant, R. Chambon. A simplified second gradient model for dilatant materials : theory and numerical implementation, *International Journal of Solids and Structure*, **45**, 5289–5307 (2008).

- [13] A. Bourgeat, O. Gipouloux, and F. Smai. Scaling up of source terms with random behavior for modeling transport migration of contaminants in aquifers. *Nonlinear Analysis*, (à paraître), 2008.
- [14] O. Gipouloux and F. Smai. Scaling up of an underground waste disposal model with random source terms. *International Journal of Multiscale Computing for Engineering*, **6(4)**, 2008 (à paraître).
- [15] S. Araujo de Lima, M A. Murad, C. Moyne, D. Stemmelen. A three-scale model for pH-dependent steady flows in 1 :1 clays. *Acta Geotechnica*, **3**, 153–174, 2008.
- [16] C. Choquet, A. Mikelić, Laplace transform approach to the rigorous upscaling of the infinite adsorption rate reactive flow under dominant Peclet number through a pore, accepté pour publication dans *Applicable Analysis*, 2008.
- [17] A. Mikelić and J. Bruining, Analysis of Model Equations for Stress-Enhanced Diffusion in Coal Layers. Part I : Existence of a Weak Solution, *SIAM J. Math. Anal.* **40 (4)**, 1671–1691 (2008)
- [18] O. Iliev, A. Mikelić, P. Popov, On upscaling certain flows in deformable porous media, *Multiscale Model. Simul.*, **7 (1)**, 93–123 (2008).
- [19] M. A. Murad and Ch. Moyne. A dual porosity model for ionic solute transport in expansive clays. *Computational Geosciences*, **12 (1)**, 47–82 (2008).
- [20] F. Boyer and F. Hubert. Finite volume method for 2d linear and nonlinear elliptic problems with discontinuities. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46(6), 2008.
- [21] D. A. Di Pietro, A. Ern, and J.-L. Guermond. Discontinuous galerkin methods for anisotropic semidefinite diffusion with advection. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46(2) :805–831, 2008.
- [22] I. V. Dolean, F. Nataf, and G. Rapin. Deriving a new domain decomposition method for the stokes equations using the smith factorization. *Math. Comp.*, à paraître 2008.
- [23] A. Sboui, J. Jaffré, and J. E. Roberts. A composite mixed finite element for hexahedral grids. *SIAM J. Sci. Comput.*, accepté 2008.
- [24] Belfort B., Ramasomanana F., Younes A., and Lehmann F. An efficient lumped mixed hybrid finite element formulation for variably saturated groundwater flow. Accepté dans *Vadose Zone Journal*, 2008.
- [25] Younes A. Reply to the comment on direct and split operator approaches with the moving mesh ELLAM for solving chemically reactive transport equations. *AIChE Journal*, 54(2), 2008.
- [26] Fahs M., Younes A., and Delay F. On the use of large time steps with ELLAM for transport with kinetic reactions over heterogeneous domains. *AIChE Journal*, à paraître 2008.
- [27] Fahs M., Carrayrou J., Younes A., and Ackerer P. On the efficiency of the direct substitution approach for reactive transport problems in porous media. *Water Air Soil Pollution*, 193 :299–308, 2008.
- [28] M. Hayek, F. Lehmann and P. Ackerer, Adaptive multiscale parametrization for one dimensional flow in unsaturated porous media, *Advances in Water Resources*, **31(1)**, 28–43 (2008).
- [29] A. Nouy and O. Le Maitre, Generalized spectral decomposition for stochastic non-linear problems, *J. Comp. Phys.*, **228**, 220–235 (2009).
- [30] I. Cheddadi, R. Fučík, M.I. Prieto and M. Vohralík, Computable a posteriori error estimates in the finite element method based on its local conservativity : improvements using local minimization, *ESAIM Proc.*, **24**, 77–96 (2008).
- [31] L. El Alaoui, An adaptive finite volume box scheme for solving a class of nonlinear parabolic equations, *Applied Mathematics Letters*, (2008).
- [32] A. Ern and A.F. Stephansen, A posteriori energy-norm error estimates for advection-diffusion equations approximated by weighted interior penalty methods, *J. Comp. Math.*, **26(4)**, 488–510 (2008).

- [33] M. Vohralík, A posteriori error estimation in the conforming finite element method based on its local conservativity and using local minimization, *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, **346**(11-12), 687–690 (2008).
- [34] M. Vohralík, Residual flux-based a posteriori error estimates for finite volume and related locally conservative methods, *Numer. Math.*, **111**, 121–158 (2008).

### Articles soumis

- [35] A. Bourgeat, M. Jurak, A Two Level Scaling-up method for multiphase flow in porous media ; numerical validation and comparison with other methods ; soumis pour publication à : *Computational Geosciences*, (2008).
- [36] Oladyshkin S., Panfilov M. Influence of the type of relative permeability on the regimes of hydrogen penetration in water in porous media. *Advances in Water Ressources*, soumis (2008).
- [37] Oladyshkin S., Panfilov M. Open thermodynamic model for compressible multicomponent two-phase flow in porous media. *Transport in Porous Media*, soumis (2008).
- [38] O. Angelini, C. Chavant, E. Chénier and R. Eymard, A finite volume scheme for diffusion problems on general meshes ensuring monotony constraints, *soumis pour publication dans SIAM Journal on Numerical Analysis*.
- [39] C. Cancès, Finite volume scheme for two-phase flow in heterogeneous porous media involving capillary pressure discontinuities, *soumis pour publication dans M2AN*.
- [40] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin, Discretization schemes for heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general nonconforming meshes, *soumis pour publication*.
- [41] F. Marpeau and M. Saad, Three dimensional simulation of the ground pollution by radionuclide *Int. J. Numer. Meth. in fluids* (en révision 2008)
- [42] C. Galusinski, M. Saad, Weak solutions for immiscible compressible multifluid flows in porous media. *CRAS* soumis 2008.
- [43] G. Allaire, A. Mikelić, A. Piatnitski, Homogenization approach to the dispersion theory for reactive transport through porous media, prepublication presque complétée, CMAP, Ecole Polytechnique, 2008.
- [44] W. Jäger, A. Mikelić, Modeling effective interface laws for transport phenomena between an unconfined fluid and a porous medium using homogenization, en révision pour *Transport in Porous Media*, 2008.
- [45] C. Pierre, F. Plouraboué, A new mixed-formulation for eigenvalue convection-diffusion problems, soumis (2008).
- [46] B. Maryshev, M. Joelson, D. Lyubimov, T. Lyubimova and M.C. Néel, Non Fickian flux for advection-dispersion with immobile periods, soumis au *Journal of Physics A* 2008, en révision.
- [47] F. Boyer, F. Hubert, and S. Krell. Non-overlapping Schwarz algorithm for DDFV schemes on general 2D meshes. Soumis en 2008.
- [48] Y. Coudière and F. Hubert. A 3d discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equations. soumis en 2008.
- [49] Y. Coudière and M. Manzini. The discrete duality finite volume method for convection-diffusion problems. soumis en 2008. <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319254/fr/>.
- [50] M.J. Gander and C. Japhet. A compact algorithm with optimal complexity for non-matching grid projections. soumis en 2008.
- [51] L. Halpern, C. Japhet, and J. Szeftel. Discontinuous galerkin and nonconforming in time optimized schwarz waveform relaxation. soumis en 2008.

- [52] J. Jaffré and A. Sboui. Law, phase diagrams and complementary constraints for two-phase flow with gas dissolution. soumis en 2008.
- [53] C. Japhet, Y. Maday, and F. Nataf. A new cement to glue nonconforming grids with robin interface conditions : The finite element case. soumis en 2008.
- [54] D. Moreau, H. Borouchaki, and P. Laug. Adaptive hexahedral mesh refinement. soumis en 2008.
- [55] C. de Dieuleveult, J. Erhel, and M. Kern. A global strategy for solving reactive transport equations. *J. Comput. Phys.*, soumis (2008).
- [56] S. Majdalani, M. Fahs, J. Carrayrou, and Ph. Ackerer. Reactive transport parameter estimation : Genetic algorithm versus monte carlo approach. soumis 2008.
- [57] I. Cheddadi, R. Fučík, M.I. Prieto and M. Vohralík, Guaranteed and robust a posteriori error estimates for singularly perturbed reaction–diffusion problems, *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, soumis (2008).
- [58] A. Ern, A.F. Stephansen and M. Vohralík, Guaranteed and robust discontinuous Galerkin a posteriori error estimates for convection–diffusion–reaction problems, *Math. Models Methods Appl. Sci.*, soumis (2008).
- [59] P. Jiránek, Z. Strakoš and M. Vohralík, A posteriori error estimates including algebraic error : computable upper bounds and stopping criteria for iterative solvers, *SIAM J. Sci. Comput.*, soumis (2008).
- [60] P. Omnes, Y. Penel and Y. Rosenbaum, A posteriori error estimation for the discrete duality finite volume discretization of the Laplace equation, soumis (2008).
- [61] M. Vohralík, Unified primal formulation-based a priori and a posteriori error analysis of mixed finite element methods, *Math. Comp.*, soumis (2008).
- [62] M. Vohralík, Guaranteed and fully robust a posteriori error estimates for conforming discretizations of diffusion problems with discontinuous coefficients, *Math. Comp.*, soumis (2008).

### Articles dans des ouvrages collectifs

- [63] Abadpour A., Panfilov M. Method of Negative Saturations for Multiphase Compositional Flow with Oversaturated Zones. *Procs. EUROMECH-499, 9-12 June 2008*, pp. 101–119 (2008).
- [64] F. Smäi, A. Bourgeat and M. Jurak, *Two phase partially miscible flow and transport modeling in porous media ; application to gas migration in a nuclear wast repository*, *Procs. EUROMECH-499, 9-12 June 2008*, (2008).
- [65] H. Amor, J.-J. Marigo, C. Maurini, Numerical experiments in a variational formulation of fatigue, in *Proceeding of the second edition of the Euro Mediterranean Symposium On Advances in Geomaterial and Structures (AGS'08)*, Hammamet, Tunisie, 2008.
- [66] C.J. van Duijn, A. Mikelić, I. S. Pop, C. Rosier, Effective Dispersion Equations For Reactive Flows With Dominant Peclet and Damkohler Numbers, In : G. B. Marin, D. West and G. S. Yablonsky, Eds., *Advances in Chemical Engineering*, **34**, Academic Press, 1–45, (2008).
- [67] F. Boyer and F. Hubert. The m-ddfv method for heterogeneous linear and nonlinear elliptic problems. In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*, pages 217–224. Wiley, 2008.
- [68] F. Boyer, F. Hubert, and S. Krell. Non-overlapping Schwarz algorithm for DDFV schemes on general 2D meshes. In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*, page 225–232. Wiley, 2008.

- [69] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. A ddfv scheme for anisotropic and heterogeneous elliptic equations, application to a bio-mathematics problem : Electrocardiogramsimulation. In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*. Wiley, 2008.
- [70] J. Droniou. A recipe to couple two finite volume schemes for elliptic problems. In R. Eymard and J.-M. Hérard, editors, *Finite Volumes for Complex Applications V*, page 69–86. Wiley, 2008.
- [71] L. Halpern and C. Japhet. Discontinuous galerkin and nonconforming in time optimized schwarz waveform relaxation for heterogeneous problems. In U. Langer, M. Discacciati, D.E. Keyes, O.B. Widlund, and W. Zulehner, editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVII, series :Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, volume 60, pages 211–219. Springer, 2008.
- [72] P. Omnes, An a posteriori error bound for the discrete duality finite volume discretization of the Laplace equation and application to the adaptive simulation in a domain with a crack, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, pp. 617–624, (John Wiley & Sons, 2008).
- [73] M. Vohralík, Two types of guaranteed (and robust) a posteriori estimates for finite volume methods, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, pp. 649–656, (John Wiley & Sons, 2008).

### Thèses en cours

- [74] Th. Abballe (Encadrants G. Allaire et Ph. Montarnal) *Simulation multi-échelle et homogénéisation des matériaux cimentaires*, CMAP, Ecole Polytechnique, bourse CEA, depuis oct 2007.
- [75] L. Amir (Encadrant M. Kern) *Modèles couplés en milieu poreux : transport réactif et fractures*. Université Paris IX, soutenue le 18 décembre 2008.
- [76] O. Angelini (Encadrants R. Eymard et C. Chavant), *Etude de schémas numériques pour les écoulements biphasiques en milieu poreux déformables pour des maillages quelconques*, Université de Marne La Vallée, bourse CIFRE-EdF.
- [77] J. Bodin (Encadrants A. Mikelić et Th. Clopeau) *Modélisation, analyse et simulation d'écoulements et transferts diphasiques multicomposants en milieux poreux*, Thèse de l'université Claude Bernard Lyon 1, depuis oct. 2007, bourse ANDRA.
- [78] C. Cancès (Encadrant Th. Gallouet), *Écoulements diphasiques en milieux poreux hétérogène : modélisation et analyse*, Thèse de Doctorat, Université de Provence 2008.
- [79] C. de Dieuleveult (Encadrant J. Ehrel), *Méthode globale appliquée au transport réactif*, Thèse de l'université de Rennes soutenue le 2008, financement ANDRA.
- [80] R. Fernandes (Encadrant R. Chambon), *Modélisation numérique objective des problèmes hydromécaniques couplés dans le cas des géomatériaux*, Thèse de l'université Joseph Fourier, Grenoble, qui sera soutenue en janvier 2009.
- [81] Z. Khalil (Encadrant M. Saad), *Modélisation et simulation numérique du stockage du CO2 par dissolution dans des gisements pétroliers*, Thèse de l'école centrale de Nantes, depuis oct. 2007, allocation MR (Ministère de la Recherche).
- [82] Th. Migliore, *Estimation des paramètres de transport pour un milieu hydro-géologique et analyse d'incertitudes*, Thèse de l'université de Nice démarrée en octobre 2006, financement ANDRA.
- [83] B. Saad (Encadrants : Florian Caro (CEA) et Mazen Saad (ECN)) *Modélisation et simulation numérique d'écoulements multi-composants en milieux poreux*, Thèse de l'école centrale de Nantes, depuis oct. 2008, (Bourse CEA).
- [84] F. Smaï (Encadrants A. Bourgeat et O. Gipouloux), *Simulation et Analyse des écoulements multiphasiques en milieu poreux ; application à la migration de gaz dans un stockage de déchets nucléaires*, Université Claude Bernard Lyon 1, Institut Camille Jordan (financement EC, FP6, Pamina).

- [85] S. Tchouanmo (Encadrant : B. Amaziane) *Modélisation et simulation numérique 3D de la migration de gaz issu d'un stockage profond de déchets radioactifs*, Université de Pau et des Pays de l'Adour, co-financement IRSN.

## Benchmark ANIS

- [86] M. Afif and B. Amaziane, Benchmark on Anisotropic Problems, Numerical simulation for the anisotropic benchmark by a vertex centred finite volume method in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 683–704 (Wiley, 2008).
- [87] L. Agelas and D. Di Pietro, Benchmark on Anisotropic Problems, A symmetric finite volume scheme for anisotropic heterogeneous second-order elliptic problems in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 705–716 (Wiley, 2008).
- [88] F. Boyer and F. Hubert, Benchmark on Anisotropic Problems, The DDFV discrete duality finite volumes and m-DDFV schemes, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 735–750 (Wiley, 2008).
- [89] C. Chainais, J. Droniou and R. Eymard, Benchmark on Anisotropic Problems, Use of the mixed finite volume method, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 751–760 (Wiley, 2008).
- [90] D. Di Pietro, A. Ern, Benchmark on Anisotropic Problems, A discontinuous Galerkin flux for anisotropic heterogeneous second-order elliptic problems, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 777–793 (Wiley, 2008).
- [91] R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin, Benchmark on Anisotropic Problems, SUSHI : a scheme using stabilization and hybrid interfaces for anisotropic heterogeneous diffusion problems in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 801–814 (Wiley, 2008).
- [92] R. Herbin and F. Hubert, Benchmark on Discretization Schemes for Anisotropic Diffusion Problems on General Grids in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 659–692 (Wiley, 2008).
- [93] F. Hermeline, Benchmark on Anisotropic Problems, Numerical experiments with the DDFV method, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 851–863 (Wiley, 2008).
- [94] Ch. Le Potier, Benchmark on Anisotropic Problems, Numerical results with two cell centered finite volume schemes for heterogeneous anisotropic diffusion operators, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. 825–842 (Wiley, 2008).
- [95] P. Omnes, Benchmark on Anisotropic Problems, Tests with the Discrete Duality Finite Volume method, in *Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., pp. (Wiley, 2008).

## Benchmark TR

- [96] J. Carrayrou, M. Kern, P. Knabner, MoMaS reactive transport benchmark, *Computational Geosciences*, soumis (2008).
- [97] C. de Dieuleveult, J. Erhel, A global approach for reactive transport : application to the benchmark easy test case of MoMaS, *Computational Geosciences*, soumis (2008).
- [98] J. Hoffmann, S. Krautle, P. Knabner, Computation of the MoMaS Benchmark Problem with a Parallel Global-Implicit 2-D Solver based on a Reformulation of the PDE-ODE System, *Computational Geosciences*, soumis (2008).

- [99] V. Lagneau, J. van der Lee, HYTEC results of the MoMas reactive transport benchmark, *Computational Geosciences*, soumis (2008).
- [100] L. Amir, M. Kern, Newton-Krylov methods for coupling transport with chemistry in heterogeneous porous media, *Computational Geosciences*, soumis (2008).
- [101] K. U. Mayer and K. T. B MacQuarrie, MoMaS benchmark problems : MIN3P implementation, *Computational Geosciences*, soumis (2008).
- [102] J. Carrayrou, Looking for some reference solutions for the Reactive Transport Benchmark of MoMaS with SPECY, *Computational Geosciences*, soumis (2008).
- [103] J. Carrayrou, J. Hoffman, P. Knabner, S. Krautle, C. de Dieuleveult, J. Erhel, J. Van der Lee, V. Lagneau, M. Kern, L. Amir, K. U. Mayer, K. T. B. McQuarrie, A synthesis of the MoMaS reactive transport benchmark results, *Computational Geosciences*, soumis (2008).