

Groupement National de Recherches MoMaS

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

Rapport scientifique 2009

1 Thème A : Écoulements multiphasiques

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

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

Les travaux ont été menés dans trois directions :

- L'écriture et l'implémentation d'algorithmes basés sur la méthode de Boltzmann pour les écoulements à une et deux phases. Le programme simple phase donne des résultats relativement précis, mais s'avère inefficace par rapport aux codes basés sur la méthode de volumes finis. Le programme double phase donne lui aussi des résultats satisfaisants, mais rencontre des difficultés lorsque les deux fluides ont des densités contrastées. Les deux codes sont parallélisés sous OpenMP.
- Applications à des écoulements double phase dans des milieux modèles. Le code a été utilisé pour évaluer des perméabilités relatives et pour simuler l'injection de gaz dans un milieu initialement saturé d'eau.
- Propriétés mécaniques de milieux poreux modèles avec deux phases compressibles. La méthode de calcul est basée sur la discrétisation du milieu par une méthode de ressorts linéaires et angulaires. Cette méthode a été utilisée pour simuler la propagation d'ondes et a fourni des résultats en bon accord avec des prédictions théoriques pour un milieu homogène.

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

articles parus ou acceptés [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10], articles soumis [64, 65], thèses [98, 109]

L'objectif principal a été l'obtention de modèles mathématiques et physiques pour la simulation des écoulements diphasiques (liquide, gaz) à deux composants (eau, H₂) en milieu poreux, adaptés aux spécificités du stockage de déchets nucléaires. Des résultats ont été obtenus dans trois directions principales :

- l'utilisation de variables adéquates permettant de modéliser et simuler l'apparition/disparition de phase : concentration/pression (UCBLyon), saturation étendue/pression (LEMETA Nancy) ;
- le développement mathématique et numérique d'un modèle utilisant une pression globale pour les écoulements diphasiques immiscibles et compressibles. L'approche numérique repose sur une méthode totalement implicite en temps et une méthode de volumes finis centrés par sommet en espace ;
- la dérivation d'un modèle homogénéisé pour traiter le cas test Couplex-Gaz 1 proposé par l'ANDRA. La zone des colis est remplacée par un milieu équivalent, le reste de la zone ouvragée et le milieu naturel demeurant inchangés. Les résultats sont très bons, en dépit du nombre relativement limité de colis dans la zone à homogénéiser ; voir la figure 1.

Signalons également la mise au point par l'équipe de l'UCBLyon d'une banque de cas tests (benchmark) pour la simulation des écoulements multiphasiques, voir

http://www.gdrmmas.org/ex_qualifications.html

avec flux discontinu ou vers une solution avec un choc non classique à l'interface.

4. **Simulation numérique de transfert d'hydrogène** (EC Nantes, Univ Toulon et Univ Nantes), resp. M. Saad
articles parus ou acceptés [18, 19, 20], articles soumis [71, 72], thèses [105, 108]

Les travaux se déclinent selon deux axes.

- L'analyse mathématique et numérique de modèles d'écoulements diphasiques immiscibles et compressibles. De nouvelles estimations d'énergie ont été obtenues afin d'établir l'existence de solutions. La pression globale n'est pas nécessaire pour formuler le problème mais est utile afin d'obtenir un résultat de compacité. Cette analyse mathématique a conduit naturellement à la formulation d'un schéma de volumes finis (en dimensions 2 et 3), l'idée étant de conserver au niveau du schéma numérique les estimations d'énergie sur les solutions discrètes. L'approche utilise la notion de maillages admissibles et le décentrement amont des mobilités aux interfaces selon le gradient de la pression globale. Un point important est d'approcher la densité aux interfaces en utilisant les pressions sur les deux mailles voisines.
- Le développement de modèles numériques dans la perspective du benchmark Couplex-Gaz 2 proposé par l'ANDRA. Le modèle considéré exprime la conservation de la masse de chaque constituant et est fermé par les lois de Dalton et Henry. Les implémentations se font en lien avec le CEA dans le logiciel MPCube.

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
articles parus ou acceptés [21, 22], articles soumis [73]

Les acteurs scientifiques ont développé, dans le cadre du modèle à micro-dilatation, 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. L'interprétation des calculs régularisés en terme d'extension de l'EDZ a été achevée. Par ailleurs, le travail sur le contrôle de la largeur de la zone localisée dans l'état complètement endommagé et sur la modélisation d'une fissure discrète en hydromécanique est bien avancé; ce travail va être poursuivi dans les années à venir. Le troisième sujet concernait l'introduction d'un passage consistant d'une zone localisée à une interface dans le cadre des milieux de second gradient. Un travail préliminaire a été fait en dimension un. Des difficultés imprévues ayant surgi en cours d'étude, le travail en dimension deux est encore en cours de validation. Enfin, le quatrième sujet portait sur le problème de la non-unicité des solutions pour les problèmes considérés. Les méthodes de régularisation des modèles d'endommagement ne suppriment pas la multiplicité des solutions, ce qui est cohérent avec la physique. Des travaux récents menés sur un cas analytique et avec un modèle d'endommagement très simple montrent qu'une infinité de solutions peuvent apparaître, et qu'en utilisant la dérivée seconde de l'énergie, on peut trouver un critère d'unicité et un critère de stabilité. Ces travaux sont pris en compte par EDF dans Code_ASTER.

2. **Homogénéisation du terme source : définition et validation de cas test** (Univ Lyon 1), resp. O. Gipouloux
articles parus ou acceptés [23, 24], thèse [109]

Les travaux s'inscrivent 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); citons en particulier le livrable [97]. L'objectif était 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. Les résultats des calculs effectués par le CEA et l'IRSN ont été comparés à ceux effectués pour le problème homogénéisé dans deux cas, l'un pour un comportement faiblement convectif dans les galeries et l'autre pour un régime beaucoup plus convectif. La solution numérique du problème homogénéisé a été obtenue par une approche basée sur une formulation EFMH avec décomposition de domaine en deux et trois dimensions d'espace.

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. Le projet s'est concentré 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, en particulier sur les phénomènes de dissolution et dissolution/précipitation de constituants de la phase solide des géomatériaux dans le contexte de l'analyse et la compréhension de la dégradation des matériaux cimentaires. Une estimation des propriétés diffusives des pâtes cimentaires a été obtenue sur la base de la micro-structure retenue pour les fractions volumiques des différentes phases issues du modèle d'hydratation de Powers. Parallèlement, un raisonnement micro-mécanique a été développé sur la prise en compte de couplages chemo-mécaniques dans l'écriture des lois de dissolution/précipitation locales mises en jeu notamment dans la carbonatation des matériaux cimentaires. Il a été montré comment rendre compte de l'impact de l'énergie libre élastique (locale) dans l'écriture de la force thermodynamique responsable localement des mécanismes de dissolution et de précipitations au niveau des interfaces solide/fluide. L'identification de la structure des lois d'interface couplées a été achevée, avec l'estimation des termes de couplages chemo-poromécaniques. Une publication est en cours d'écriture.

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

articles parus ou acceptés [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33], articles soumis [74, 75], thèses [99, 101]

Les travaux ont été développés dans diverses 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. Le modèle contient une équation de convection-diffusion dans les pores et une équation différentielle ordinaire linéaire pour l'adsorption à la surface des pores. Pour une situation physique correspondant à de grands nombres de Péclet et de Damkohler, le modèle homogénéisé a été obtenu ; celui-ci a la forme d'une équation de convection-diffusion avec des coefficients efficaces dépendant du couplage entre la réaction, la convection et la diffusion ; voir la figure 2.
- Dérivation rigoureuse du modèle effectif pour un réactif traversant un pore bidimensionnel étroit et long. Le soluté, transporté et diffusé par le fluide, subit les réactions d'adsorption-désorption à la frontière latérale de tube. À la frontière d'injection, on suppose des conditions aux limites de Danckwerts. Les paramètres de transport et de réaction sont supposés conduire au régime des grands nombres de Péclet et de Damkohler. La transformation de Laplace en temps a été employée et, ensuite, la technique de la perturbation singulière anisotrope. En supposant une cinétique chimique linéaire, des effets de mémoire et de relaxation ont été mis en évidence.
- Elaboration d'un modèle à 3 échelles pour décrire le transport d'eau, d'ions et de charges électriques dans un milieu argileux saturé. Le matériau argileux utilisé pour cette étude théorique

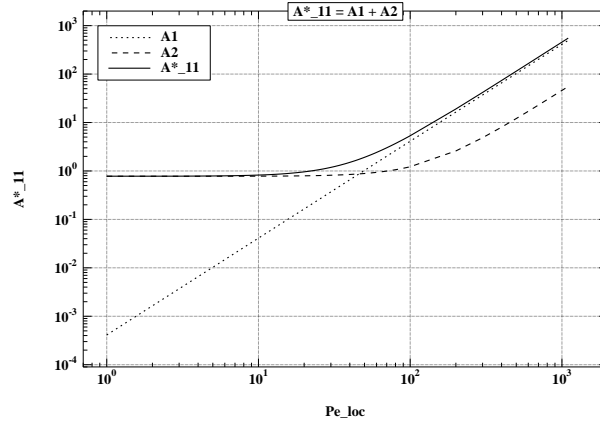


FIG. 2 – Représentation en échelle log-log de la composante (1,1) de la matrice de dispersion effective, A_{11}^* , en fonction du nombre de Péclet local Pe_{loc} ; on décompose $A_{11}^* = A_1 + A_2$, la contribution A_1 étant nulle en l'absence de réactions chimiques; on observe que pour des grands nombres de Péclet locaux, A_{11}^* est proportionnel à Pe_{loc}^2 , alors que l'asymptotique serait $Pe_{loc}^{1.7}$ en l'absence de réactions chimiques

a été une kaolinite non gonflante. L'objectif a été d'examiner le rôle du pH connu pour être un paramètre crucial dans le comportement des argiles. Le modèle physique prend en compte les réactions d'échange au niveau des surfaces des feuillets et introduit un modèle de dispersion réactive des espèces ioniques. La modélisation a été développée par homogénéisation périodique et des simulations à l'échelle macroscopique, en régimes permanent et transitoire, dans des géométries simples permettent d'appréhender les mécanismes de transport pour ce type de situation.

- Mise au point de mesures grâce à l'imagerie par résonance magnétique (IRM) pour étudier les mécanismes de transport en milieu poreux. Des séquences d'acquisition et des procédures de traitement d'images ont été développées pour détailler la structure interne des milieux poreux modèles (empilements de billes) et pour réaliser des mesures de vitesse au sein de ces mêmes milieux (vélocimétrie IRM). La difficulté réside, non pas dans la visualisation, mais dans l'obtention de mesures précises. Le principal résultat concerne la cartographie 2D précise du champ de vitesse dans la section de différents milieux poreux parcourus par un écoulement d'eau. Ces travaux sont le préalable à la réalisation de mesures de la dispersion par IRM en utilisant la technique double-PGSE (Double Pulse Gradient Spin Echo).

Signalons par ailleurs deux points supplémentaires. D'une part, les écoulements insaturés avec pression capillaire dynamique où l'entropie est employée afin d'obtenir l'existence globale d'une solution faible appropriée avec des dérivées premières de carré intégrable. D'autre part, l'étude de deux modèles d'homogénéisation des termes sources dans une équation parabolique de diffusion. Les termes sources, correspondant à des colis desquels s'échappe un polluant, sont répartis périodiquement sur une surface. Le contraste de diffusion entre le sous-sol géologique et l'environnement immédiat des colis (galeries et scellements) est supposé très important (comme dans les modèles de double porosité). Cela entraîne que, dans le modèle homogénéisé, le terme source est obtenu à travers la résolution d'un problème de cellule et non pas par simple moyennisation. Des essais numériques en 2-d complètent cette étude.

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). Les efforts ont porté sur une reformulation en problème auto-adjoint du problème de Graetz.

5. **Modèles fractionnaires pour le transport de matière en milieu poreux** (Univ Avignon), resp. M.C. Néel
articles parus ou acceptés [34, 35], articles soumis [76]

Le but du projet est d'expliquer les comportements diffusifs anormaux (de type non-Fickéens) en ajoutant un terme de viscosité de la forme $\lambda I^{1-\gamma} \partial_t c$ où $\gamma \in]0, 1[$ et $I^{1-\gamma}$ représente une intégrale fractionnaire d'ordre $1 - \gamma$. 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, au moins formellement, de modèles non-browniens avec terme de rétention. La modélisation a également été enrichie en incluant le cas où la vitesse de convection dépend du temps.

3 Thème C : Méthodes numériques

Cette thématique (resp. R. Herbin) 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. F. Hubert
articles parus ou acceptés [36, 37, 38, 39, 40, 41], articles soumis [77, 78, 79], thèse [106]

Le benchmark sur les problèmes anisotropes hétérogènes sur maillages généraux présenté à FVCA5 en Juin 2008 a permis de dégager des similitudes entre plusieurs schémas ; voir la figure 3. Ceci a conduit à introduire une famille de schémas qui contient les MFD (mimetic finite difference methods), les méthodes volumes finis dites « hybrides » de type SUSHI et les méthodes volumes finis mixtes, et leur extension au cadre non linéaire. Deux extensions de ce benchmark sont à présent à l'étude : le passage à 3 dimensions d'espace et le couplage d'une équation de diffusion avec une équation de transport, de manière à bien évaluer la précision des flux numériques.

Les recherches concernant les schémas DDFV ont été poursuivies, avec en particulier une extension aux problèmes de convection-diffusion et les problèmes anisotropes hétérogènes, et également à la dimension 3 en espace. Il est également prévu d'étudier l'algorithme général de couplage de schémas dans le cadre de la méthode de décomposition de domaine de Schwarz-Lions, qui est également étudiée pour le schéma DDFV bi-dimensionnel et pour laquelle on recherche des meilleures conditions de transmission.

Un autre axe important est la recherche de monotonie pour des schémas de discrétisation en espace sur maillage non structuré, et l'étude de leurs propriétés de convergence. Enfin, signalons d'une part qu'il a été répondu affirmativement à une question d'Aavatsmark concernant l'existence d'un schéma centré à 9 points symétrique et convergent sur maillages quadrangulaires et d'autre part que les schémas de discrétisation de type éléments finis stabilisés en espace et Runge Kutta en temps ont été analysés pour des équations hyperboliques en prouvant la stabilité des schémas et des estimations d'erreur pour des solutions régulières sous une condition de CFL habituelle.

2. **Méthodes particulières pour les milieux poreux** (Univ Poitiers, Univ Bordeaux, LIMSI, Inria Nancy), resp. S. Huberson
articles parus ou acceptés [42, 43], articles soumis [80]

Le premier objectif de ce projet était de construire un code particulière 3D pour un milieu anisotrope et discontinu et l'appliquer sur un cas test de l'ANDRA. Le coté anisotrope ne pose pas de

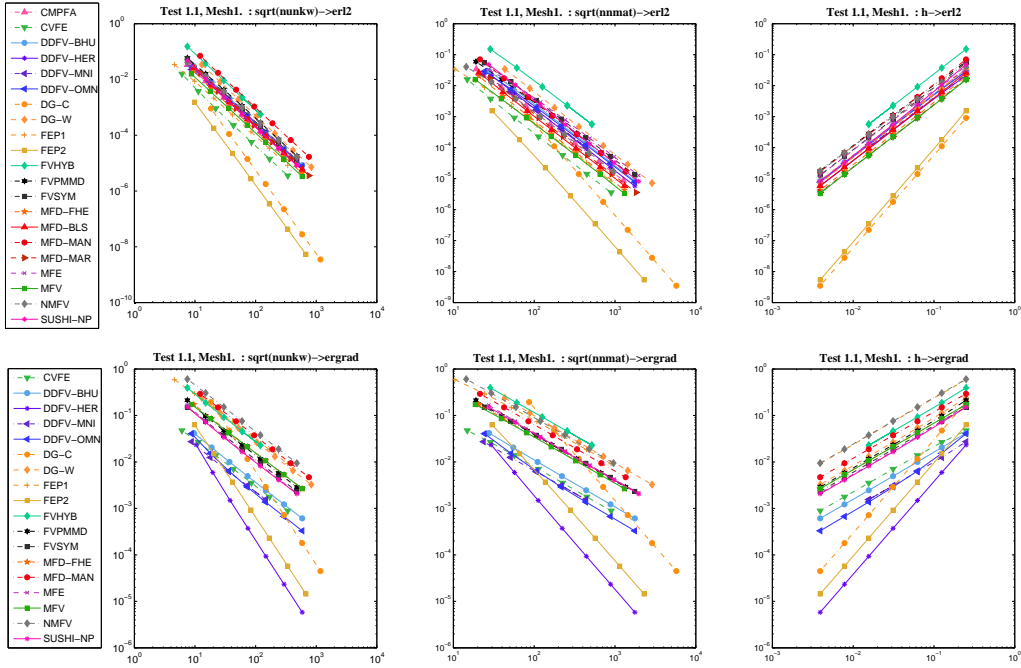


FIG. 3 – Résultats du benchmark ANIS. Test 1 : faible anisotropie. Comparaison de la norme L^2 de la solution (ordre $\{2, 3\}$) et du gradient (ordre $\{1, 2\}$).

problème particulier, par contre les discontinuités peuvent induire des instabilités. L’interprétation déterministe de la méthode de marche aléatoire de Lejay et Etoire semble limitée à une dimension d’espace. On a donc tenté d’étendre la méthode des lignes de courant pour inclure les effets de dispersion, ce qui ne paraît pas facile, et finalement une nouvelle méthode basée sur le transport des iso-contours a été conçue. Les calculs 3D prévus n’ont pu être effectués en raison du manque d’un solveur pour le problème de dispersion dans le cas de discontinuités. On a toutefois produit un solveur parallèle pour l’équation de transport sur maillages non structurés d’au moins 700 000 éléments.

Le deuxième objectif était de combiner la méthode particulière avec le calcul d’incertitudes dans le cas où le champ de vitesses et le tenseur de dispersion ne sont pas complètement déterminés, en dimension 2 d’espace. La première méthode proposée est basée sur un transport Lagrangien de la fonction de distribution des particules, tandis que la seconde est une discrétisation particulière pour la propagation d’incertitudes. Les deux méthodes donnent des résultats similaires pour la variance dans le cas d’un problème de transport dispersion avec une condition initiale gaussienne, mais la première méthode devient difficile à mettre en œuvre pour les moments d’ordre supérieur.

3. **Solveurs pour l’écoulement et le transport en champ lointain** (Inria Rocquencourt, UPMC, Univ Paris 13, Univ Troyes), resp. J. Jaffré articles parus ou acceptés [44, 45], articles soumis [81, 82]

Un premier objectif est le développement de méthodes de décomposition en temps pour permettre des pas de temps différents sur des domaines physiques différents. La méthode de Schwarz couplée avec la méthode de Galerkin discontinu en temps et des éléments finis en espace donne une discrétisation non conforme des problèmes d’advection-diffusion qui permet l’utilisation de grilles

non conformes en temps. La projection d'une grille à l'autre est effectuée par une méthode frontale de complexité linéaire (en 2 et 3D) et facile à implémenter. La convergence de la méthode DG-OSWR a été prouvée pour des conditions de transmission de Robin. La méthode a été étendue à des problèmes avec porosité discontinue. Les premiers résultats numériques effectués avec P. Omnes (CEA) sont très encourageants. Un code 2D avec plusieurs couches parallèles est en cours de développement. Par ailleurs, la méthode des éléments finis mixtes avec un complément de Schur pour l'interface discrète a été implémentée, et la méthode de Schwarz étendue aux EF mixtes.

On s'est également intéressé dans ce projet aux maillages hexaédriques. On teste actuellement une méthode adaptative pour la construction de tels maillages pour un calcul de Darcy 3D en minimisant les variations de la hessienne. Cette méthode donne pour l'instant trop d'éléments et doit donc encore être améliorée.

Enfin, un problème complémentaire non-linéaire a été formulé pour le problème diphasique eau-hydrogène avec dissolution possible de l'hydrogène dans l'eau modélisée par la loi de Henry. On s'intéresse maintenant à la résolution numérique de ce problème ainsi qu'à d'autres problèmes complémentaires tels que la dissolution-précipitation. La méthode Newton-min de Kansow (2004) a été implémentée en 1D, mais peut ne pas converger si la matrice n'est pas une M-matrice.

4. **Modélisation et simulation du transport réactif** (Inria Rocquencourt, IMFS, Inria Rennes), resp. J. Ehrel et M. Kern
articles parus ou acceptés [46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53], articles soumis [83, 84]

Les méthodes globales pour le couplage ont été étudiées, en particulier pour la réduction du temps de calcul nécessaire pour la résolution des systèmes linéaires par résolution du système issu du complément de Schur de la matrice Jacobienne. Cette résolution est actuellement effectuée par une méthode directe, et il est envisagé de passer à une méthode itérative. L'étude de la convergence des méthodes SIA et SNIA a débuté. Il est clair que le pas de temps pour SNIA est restreint par une condition de stabilité. Il semble que le pas de temps pour SIA soit également restreint, pour assurer la convergence de la méthode de point fixe. Il est maintenant prévu d'étudier la méthode de décomposition d'opérateurs. En effet, un schéma explicite est pertinent pour la partie advective du transport, alors qu'une méthode implicite et globale est nécessaire pour la partie dispersive.

Par ailleurs, les méthodes ELLAM avec transport réactif ont été étudiées en 1D. Poursuivant les travaux précédents, une nouvelle combinaison (avec moins d'inconnues) entre les méthodes des lignes et le transport réactif a été proposée.

Enfin, le Benchmark « Transport Réactif » a été achevé. Il a été résolu par 9 équipes différentes, à des degrés divers. Un numéro spécial de la revue Computational Geosciences sera consacré au benchmark (articles disponibles en ligne).

4 Thème D : Analyse d'erreur et incertitudes

Cette thématique (resp. S. Huberson) 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
articles soumis [85, 86], thèse [107]

Ce projet est composé de deux parties distinctes dont les points communs sont l'utilisation d'une formulation adjointe et de techniques de zonation. Les applications présentées sont différentes.

Pour la première partie, les objectifs étaient (1) développer un code direct permettant de décrire les écoulements dans un « double milieu » à l'aide d'éléments finis mixtes sous un formalisme de condensation de masse; (2) développer la formulation adjointe pour calculer les indicateurs de

raffinement permettant d'identifier la zonation des paramètres (géométrie des zones et paramètres associés) ; (3) appliquer l'outil d'identification obtenu aux données du site de Poitiers ; (4) comparer les résultats obtenus avec l'approche globale sur ce site. Les objectifs 1 et 2 ont été atteints. Le code permettant le calcul direct a été réalisé avec le formalisme condensé des éléments finis mixtes et l'algorithme d'identification des paramètres a été développé et mis en œuvre. Le code et l'algorithme d'identification ont été vérifiés à l'aide de solutions analytiques et d'expériences numériques. La procédure mise en place permet d'identifier les paramètres et la géométrie des zones considérées comme homogènes. L'objectif (3) n'a pas été atteint, la mise en place de la procédure d'identification s'étant avérée plus compliquée que prévu. Il est proposé de le poursuivre en 2010-2011. Quant à l'objectif (4), l'approche « simple milieu » (standard en hydrogéologie) a été comparée aux résultats obtenus par l'approche globale. L'espace de l'ensemble des paramètres plausibles a été exploré par une approche de type Monte Carlo. Si la distribution des paramètres (perméabilité, emmagasinement) varie localement, la distribution statistique exprimée sous forme de variogrammes demeure inchangée.

Pour la seconde partie, l'objectif était de mettre au point, en liaison avec l'équipe Tropics de l'INRIA, le code adjoint du logiciel TRACES développé par l'IMFS et l'ANDRA. Cet outil informatique permettra d'identifier les paramètres dans un modèle de diffusion-convection à partir de mesures expérimentales, notamment la porosité et la diffusion. L'aspect identification de paramètres à zones fixées a été étudié dans un premier temps. Pour résoudre le problème inverse, des méthodes déterministes (ou variationnelles) basées sur la minimisation d'un critère (ou fonction coût) quadratique ont été utilisées, l'objectif étant de trouver l'ensemble des paramètres qui minimisent le critère. Le milieu a été décomposé en zones homogènes dans lesquelles les coefficients ont été identifiés (technique de zonation). Pour cela, le code TRACES a été différencié avec le logiciel de différentiation automatique TAPENADE. Dans un second temps, ce travail a été utilisé pour résoudre le problème d'identification de zones. On a cherché, partant d'une configuration géologique modifiée, à retrouver la configuration géologique réelle en identifiant les paramètres qui ont pour support ces zones. La configuration recherchée a été obtenue en regroupant ensuite par isovalues les coefficients identifiés.

2. Propagation et quantification des incertitudes par polynômes de chaos (LIMSI, UPMC, Univ Nantes, ENPC Champs), resp. O. Le Maître articles parus ou acceptés [54, 55, 56], article soumis [87], thèse [110]

Le principal objectif était de démontrer la possibilité d'utiliser les projections sur une base de polynômes de chaos pour calculer la propagation des effets des incertitudes sur les caractéristiques des milieux poreux. Les études se sont principalement concentrées sur les problèmes de Darcy et de transport-dispersion. Le projet se structure selon trois axes :

- Méthodes spectrales non intrusives et méthodes de « sparse grids » ; voir figure 4. La première étape, réalisée au CEA, a été de développer un code permettant de manipuler des algorithmes de type « sparse grid » pour des problèmes de grandes dimensions. Celui-ci est basé sur la méthode de tensorisation de Smolyak qui a été étendue. Une réduction supplémentaire du nombre de simulations à réaliser a été obtenue grâce à l'emploi d'une technique adaptative dans laquelle de nouvelles tensorisations sont progressivement introduites selon un critère approprié. Cette approche a été validée par une application au cas test Couplex-1 dans lequel on a pu prendre en compte jusqu'à 15 paramètres incertains.
- Méthodes de Galerkin intrusives. Dans cette approche, on utilise directement les équations stochastiques pour écrire un système d'équations aux dérivées partielles pour chaque mode stochastique de la solution. La première étape a été de développer un code de résolution pour l'équation de Darcy. Il utilise une discrétisation en éléments finis P1 et une décomposition sur la base des polynômes de chaos. Pour les équations de convection-dispersion, l'application de la méthode pose un certain nombre de difficultés, en particulier conduisant à des probabilités

non nulles de valeurs négatives de concentration. Pour résoudre ce problème, le flux convectif stochastique a été discrétisé en utilisant un schéma de Roe. Le temps CPU a été réduit grâce au développement d'un solveur permettant d'éviter la nécessité d'une décomposition spectrale des flux. Cette méthode n'est toutefois pas suffisante pour assurer la positivité et a dû être complétée par une résolution multi-échelle type ondelettes.

- Représentation sur bases réduites. Cette méthode consiste à construire un modèle d'ordre réduit en approchant la base stochastique optimale plutôt que de choisir une base a priori comme dans les points 1 et 2 ci-dessus. La méthode de décomposition spectrale généralisée a été appliquée à l'équation de Darcy et différents algorithmes de construction de l'approximation réduite ont été testés (puissances itérées et Arnoldi). Ces expérimentations ont montré qu'on pouvait obtenir une réduction de moitié du temps CPU par rapport à la méthode de Galerkin classique pour une précision comparable. La méthode a également été appliquée à un problème elliptique non-linéaire. On a pu observer qu'une application directe des méthodes employées dans les cas linéaires, même si elle ne repose pas sur une base théorique établie, conduit à la même efficacité pour la réduction du temps CPU. Enfin, l'application de la méthode à des problèmes de convection-dispersion réalistes se heurte à des difficultés, à la fois par manque de méthodes de stabilisation efficaces et par la nécessité de stocker les modes réduits pour les temps intermédiaires. Ces difficultés ont orienté le travail vers d'autres types de méthodes basées sur des représentations alternatives et sur la séparation des variables stochastiques, de temps et d'espace. Une première application à des problèmes stochastiques multidimensionnels a été réalisée.

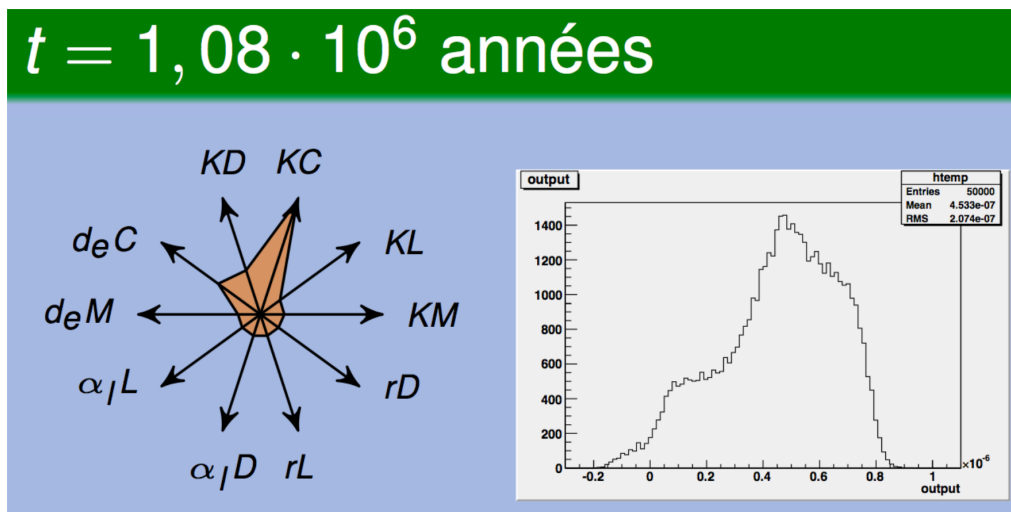


FIG. 4 – Développement en polynômes de chaos du flux à l'interface argile-calcaire après un million d'années, construit avec la méthode « sparse grid » adaptative; à gauche effets relatifs (index de sensibilité totale) de différent paramètres incertains, à droite densité de probabilité du flux

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

articles parus ou acceptés [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63], articles soumis [88, 89, 90], thèse [103]

Les travaux ont été développés dans trois directions.

- Consolidation de la théorie des estimations a posteriori pour les problèmes stationnaires linéaires du second ordre. Pour les équations de convection-diffusion-réaction et plusieurs méthodes non conformes (Galerkin discontinu, éléments finis mixtes, volumes finis centrés par maille), des

estimations basées sur la reconstruction des flux sont maintenant disponibles ; de plus, ces estimations sont robustes dans les cas de convection ou réaction dominantes. Le cas de maillage non raccordés a également été inclus dans l'analyse. De plus, les résultats ont été étendus aux méthodes conformes en reconstruisant le flux sur un maillage dual. Là encore, les estimations sont robustes. Des estimations robustes pour le problème de Brinkman ont aussi été obtenues. Enfin, une analyse a posteriori a été réalisée pour les méthodes de volumes finis de type DDFV appliquées aux équations de diffusion. L'analyse s'applique à n'importe quel maillage, y compris les maillages qui ne se raccordent pas. La correspondance entre la méthode DDFV et les schémas de type éléments finis a été exploitée dans le cas du Laplacien. Des estimateurs ont été implémentés et testés dans un code de calcul d'écoulement en milieux poreux du CEA dans des cas purement diffusifs.

- Arrêt des solveurs linéaires et non linéaires. Une nouvelle étude a été entreprise dans le but d'une part de prendre en compte l'erreur sur la solution d'un système linéaire ou non linéaire issu d'une discrétisation numérique et d'autre part de définir un critère d'arrêt efficace pour les méthodes de résolution itératives. En particulier, les contributions des différentes sources d'erreur ont été évaluées séparément pour le cas d'un problème de Laplace non-linéaire.
- Extension aux problèmes instationnaires. Un cadre unifié pour l'estimation d'erreur a posteriori dans le cas de l'équation de la chaleur discrétisée par différentes méthodes a été présenté. Des estimateurs calculables ont également été construits pour les équations de convection-diffusion instationnaires. Par ailleurs, une méthode de définition du pas de temps pour un système couplé de transport non-linéaire et d'une équation différentielle ordinaire définissant une barrière de confinement a été établie.

5 Actions spécifiques

5.1 Le colloque du GNR au CIRM

Les journées scientifiques du GNR se sont tenues au CIRM à Luminy du 23 au 25 novembre 2009. Pour le programme complet, voir

<http://www.gdrmmas.org/prgm09.html>

Ces journées ont suscité une forte mobilisation de la communauté avec 75 inscrits. Le dialogue avec les partenaires a été un élément important, avec 5 exposés par les partenaires et 24 participants (5 de l'ANDRA, 2 du BRGM, 8 du CEA, 7 d'EDF et 2 de l'IRSN). Tous les projets financés dans le cadre du programme scientifique 2008-2009 ont présenté leurs travaux, et des discussions ont également permis de consolider l'appel à projets lancé pour la période 2010-2011.

Sept conférenciers invités sont intervenus :

- H. Matthies (University of Braunschweig) *Sparse representations in uncertainty quantifications*
- T. Russell (NSF) *NSF-supported projects related to MoMaS science*
- R. Scheichl (University of Bath) *Multilevel iterative solvers : Robustness and links to upscaling*
- B. Schweizer (University of Dortmund) *Porous media and plasticity : Homogenization for equations with hysteresis*
- R. Shaw (BGS) *The FORGE (Fate of Repository Gases) pan European project*
- R. Stenberg (University of Helsinki) *Finite element methods for the Brinkman and Biot models*
- B. Wohlmuth (University of Stuttgart) *A new coupling concept for multiphase multicomponent porous media and free flows*

On notera enfin la présence d'une équipe du GNR PARIS (P. Turq et collègues du laboratoire PECSA) afin de préparer le dépôt d'un projet commun entre les GNR MoMaS et PARIS.

5.2 Autres actions spécifiques

- L'école thématique « Avancées récentes en calcul scientifique », coordonnée par F. Boyer et F. Hubert, s'est tenue au CIRM à Luminy du 9 au 13 février 2009. Les thématiques abordées étaient variées aussi bien du point de vue des schémas numériques (Eléments finis, Volumes finis, Discontinuous Galerkin, ALE) que de celui des solveurs (méthodes multiniveaux, décomposition de domaines). Le programme scientifique se composait de 5 mini-cours de 3h environ et de 8 exposés de revue de 1 heure environ. Plus de détails sur
<http://www.latp.univ-mrs.fr/cirm09/semaine2.html>
- Le workshop *Discretization methods for viscous flows*, coordonné par R. Herbin, F. Hubert et J.-C. Latché, s'est tenu à Porquerolles du 22 au 26 juin 2009. Ce workshop comprenait deux parties, l'une sur les écoulements en milieu poreux hétérogène et l'autre sur les écoulements compressibles et incompressibles. Ces journées ont notamment permis d'avancer dans la définition des futurs benchmarks proposés en 2010 par le projet MoMaS coordonné par F. Hubert. Plus de détails sur
<http://www.cmi.univ-mrs.fr/herbin/WP09/>
- Une session spécifique au stockage des déchets radioactifs, coordonnée par B. Amaziane et à laquelle ont participé plusieurs partenaires du GNR, a été organisée dans le cadre de la troisième conférence internationale *Approximation Methods and numerical Modeling in Environment and Natural Resources* (MAMERN) qui s'est tenue à Pau du 8 au 11 juin 2009. Cette conférence a également été l'occasion pour plusieurs équipes du GNR d'y présenter leurs travaux. Plus de détails sur
<http://lma.univ-pau.fr/meet/mamern09/>

6 Publications

Références

Articles parus ou acceptés

- [1] A. Abadpour and M. Panfilov. Method of Negative Saturations for two-phase Compositional Flow with Oversaturated Zones. *Transport in Porous Media*, v. 79; p. 197-214, 2009.
- [2] A. Abadpour and M. Panfilov. Asymptotic Decomposed Model of Two-Phase Compositional Flow in Porous Media : Analytical Front Tracking Method for Riemann Problem. *Transport in Porous Media*, 2009, published online, DOI : 10.1007/s11242-009-9428-8.
- [3] M. Panfilov and M. Rassoulzadeh. Interfaces of phase transition and disappearance and method of negative saturations for compositional flow with diffusion and capillarity in porous media. *Transport in Porous Media*, accepted 2009.
- [4] A. Bourgeat and M. Jurak. A two level scaling-up method for multiphase flow in porous media, numerical validation and comparison with other methods. *Computational Geosciences*. doi.org/10.1007/s10596-009-9128; 2009.
- [5] A. Bourgeat, M. Jurak et F. Smaï. Two partially miscible flow and transport modeling in porous media; application to gas migration in a nuclear waste repository. *Computational Geosciences*. 13(1) : 29-42; 2009.
- [6] F. Smaï. A model of multiphase flow and transport in porous media applied to gas migration in underground nuclear waste repository. *C. R. Acad. Sci. Paris. Ser. I*, 347; 2009.
- [7] B. Amaziane, A. Bergam, M. El Ossmani, Z. Mghazli. A posteriori estimators for vertex centred finite volume discretization of a convection-diffusion-reaction equation arising in flow in porous media. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 59 :259-284; 2009.

- [8] B. Amaziane, M. Jurak, A. Zgalji-Keko, Modeling and Numerical Simulations of Immiscible Compressible Two-Phase Flow in Porous Media by the Concept of Global Pressure , *Transport in Porous Media*, DOI 10.1007/s11242-009-9489-8; 2009.
- [9] B. Amaziane, L. Pankratov, V. Rybalko, On the homogenization of some double porosity models with periodic thin structures, *Applicable Analysis*, Vol. 88, Nos. 10-11, 1469-1492; 2009.
- [10] B. Amaziane, L. Pankratov, A. Piatnitski, Nonlinear flow through double porosity media in variable exponent Sobolev spaces, *Nonlinear Analysis : Real World Applications*, Volume 10, Issue 4, Pages 2521-2530; 2009.
- [11] L. Agélas, R. Eymard, and R. Herbin, A nine-point scheme for the simulation of diffusion in heterogeneous media, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 347(11-12) :673-676, 2009.
- [12] O. Angelini, C. Chavant, E. Chénier, R. Eymard, A Finite Volume Scheme For Diffusion Problems on General Meshes Applying Monotony Constraints, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, to appear.
- [13] N. Bouillard, R. Eymard, M. Henry, R. Herbin, and D. Hilhorst, A fast precipitation and dissolution reaction for a reaction-diffusion system arising in a porous medium, *Nonlinear Analysis : Real World Applications*, 2009, 10 629–638.
- [14] C. Cancès, T. Gallouët, A. Porretta, Two-phase flows involving capillary barriers in heterogeneous porous media, *Interfaces Free Bound.*, 2009, 11, 239–258.
- [15] C. Cancès, Finite volume scheme for two-phase flow in heterogeneous porous media involving capillary pressure discontinuities, *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 2009, 43, 973–1001.
- [16] C. Cancès, On the effects of discontinuous capillarities for immiscible two-phase flows in porous media made of several rock-types, *Special issue of Networks and Heterogeneous Media*, à paraitre, 2009.
- [17] R. Eymard, D. Hilhorst, and M. Vohralík, A combined finite volume-finite element scheme for the discretization of strongly nonlinear convection-diffusion-reaction problems on nonmatching grids, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, , to appear, already online.
- [18] F. Marpeau and M. Saad, Three dimensional simulation of the ground pollution by radionucleide *Int. J. Numer. Meth. in Fluids*, Online in Wiley interscience; www.interscience.wiley.com; 2009.
- [19] C. Galusinski and M. Saad, Weak solutions for immiscible compressible multifluid flows in porous media. *Partial Differential Equations, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 347; 249-254; 2009.
- [20] Z. Khalil and M. Saad, Mathematical analysis for compressible immiscible two phase flow in porous media. *ijpma*, accepted, 2009.
- [21] H. Amor, J.-J. Marigo, and C. Maurini, Variational approach to brittle approach with unilateral contact : numerical experiments. *J. Mech. Phys. Solids*, **57**, p. 1209-1229 (2009).
- [22] K. Pham and J.-J. Marigo. Stability of non localized responses for damaging materials. *Vietnam Journal of Mechanics*, **30(4)**, p. 1-11 (2009).
- [23] G. Allaire, M. Briane, R. Brizzi, Y. Capdeboscq, Two Asymptotic Models for Arrays of Underground Waste Containers, *Applicable Analysis*, **88**, p.1445-1467 (2009).
- [24] A. Agouzal, N. Debit, O. Gipouloux, A numerical method for waste repository problems with non-standard interface condition. *Applicable Analysis*, **88**, issue : 10-11, p. 1431-1443 (2009).
- [25] G. Allaire, R. Brizzi, A. Mikelić, A. Piatnitski, Two-scale expansion with drift approach to the taylor dispersion for reactive transport through porous media, *Chemical Engineering Science*, 2009, doi :10.1016/j.ces.2009.09.010 .
- [26] G. Allaire, A. Mikelić, A. Piatnitski, Homogenization approach to the dispersion theory for reactive transport through porous media, accepté pour publication dans *SIAM J. Math. Anal.*, 2009.

- [27] S. Araújo de Lima, M. A. Murad, Ch. Moyne, D. Stemmelen. Electro-osmosis in kaolinite with pH-dependent surface charge modelling by homogenization. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, accepted, 2009.
- [28] S. Araújo de Lima, M. A. Murad, Ch. Moyne, D. Stemmelen, and C. Boutin. Three-scale model of Ph-dependent flows and ion transport with equilibrium adsorption in kaolinite clays : II. Effective-medium behavior. *Transport in Porous Media*, accepted, 2009.
- [29] M. Balhoff, A. Mikelić, and M.F. Wheeler, Polynomial filtration laws for low Reynolds number flows through porous media, *Transport in Porous Media*, 2009. DOI : s11242-009-9388-z, accepted.
- [30] C. Choquet and A. Mikelić, Rigorous upscaling of the reactive flow with finite kinetics and under dominant Peclet number, *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, **21**, p. 125-140 (2009).
- [31] W. Jäger and A. Mikelić, Modeling effective interface laws for transport phenomena between an unconfined fluid and a porous medium using homogenization, *Transport in Porous Media*, **78 (3)**, p. 489-508 (2009).
- [32] A. Mikelić, An existence result for the equations describing a gas-liquid two-phase flow, *Comptes rendus Mécanique*, **337**, Issue 4, p. 226-232 (2009).
- [33] A. Mikelić, A global existence result for the equations describing unsaturated flow in porous media with dynamic capillary pressure, *Journal of Differential Equations*, 2009. doi : 10.1016/j.jde.2009.11.022, accepted.
- [34] B. Maryshev, M. Joelson, D. Lyubimov, T. Lyubimova and M.C. Néel, Non Fickian flux for advection-dispersion with immobile periods, *J. Phys. A : Math. And Theor.*, **42 (11)**, 115001 (2009).
- [35] M.C. Néel, A. Zoia and M. Joelson, Mass transport subject to time-dependent flow with nonuniform sorption in porous media, *Phys. Rev. E.*, **80**, 056301 (2009).
- [36] L. Agélas, R. Eymard, and R. Herbin. A nine-point finite volume scheme for the simulation of diffusion in heterogeneous media. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 347(11-12) :673-676, 2009.
- [37] 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.
- [38] J. Droniou, R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A unified approach to mimetic finite difference, hybrid finite volume and mixed finite volume methods. *M3AS*, 20(2) :1-31, 2009.
- [39] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Cell centred discretization of fully non linear elliptic problems on general multidimensional polyhedral grids. *J. Numer. Math.*, 17(3) :173-193, 2009.
- [40] F. Hermeline. A finite volume method for approximating 3D diffusion operators on general meshes. page = 5763-5786, *J. Comput. Phys*, 228 :5763-5786, 2009.
- [41] Ch. Le Potier. A non linear scheme satisfying maximum and minimum principles for diffusion operators, *Int. Jour. Finite Volume*, 2009.
- [42] S. Huberson, E. Rivoalen and A. Beaudoin. Une méthode particulière pour résoudre l'équation de richards. *CRAS Mécanique*.
- [43] M. Deaconu et A. Lejay. Simulation of diffusions by means of importance sampling paradigm (to appears). *Annals of Applied Probability*, 2009.
- [44] A. Sboui, J. Jaffré, and J. E. Roberts. A composite mixed finite element for hexahedral grids. *SIAM J. Sci. Comput.*, 31 (2009), pp. 2623-2641.
- [45] A. Sboui and J. Jaffré. Henry' law and gas phase disappearance. *INRIA report 6891, to appear in Transport in Porous Media* (2009).
- [46] J. Carrayrou. Looking for some reference solutions for the reactive transport benchmark of MoMaS with SPECY. *Computational Geosciences*, 2009.

- [47] J. Carrayrou, J. Hoffman, P. Knabner, S. Krättele, C. de Dieuleveult, J. Erhel, J. van der Lee, V. Lagneau, K. U. Mayer, and K. T. B. McQuarrie. A synthesis of the MoMaS reactive transport benchmark results. *To appear in Computational Geosciences*.
- [48] Jérôme Carrayrou, Michel Kern, and Peter Knabner. Reactive transport benchmark of momas. *Computational Geosciences*, 2009.
- [49] C. de Dieuleveult and J. Erhel. A global approach to reactive transport : application to the MoMas benchmark. *Computational Geosciences*, 2009.
- [50] C. de Dieuleveult, J. Erhel, and M. Kern. A global strategy for solving reactive transport equations. *Journal of Computational Physics*, 228 (6395-6410), 2009.
- [51] Ch. P. El Soueidy, A. Younes, and Ph. Ackerer. Solving the advection-diffusion equation on unstructured meshes with discontinuous/mixed finite elements and a local time stepping procedure. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79 :1068–1093, 2009.
- [52] M. Fahs, A. Younes, and F. Delay. On the use of large time steps with Eulerian-Lagrangian methods on heterogeneous domains. *AIChE Journal*, 55(5) :1121–1126, 2009.
- [53] S. Majdalani, M. Fahs, J. Carrayrou, and Ph. Ackerer. Reactive transport parameter estimation : Genetic algorithm vs. Monte Carlo approach. *AIChE Journal*, 55(8) :1959–1968, 2009.
- [54] A. Nouy. Recent developments in spectral stochastic methods for the numerical solution of stochastic partial differential equations. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16(3) :251–285, 2009.
- [55] A. Nouy. Proper generalized decompositions and separated representations for the numerical solution of high dimensional stochastic problems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, Accepted.
- [56] A. Nouy and O.P. Le Maître. Generalized spectral decomposition method for stochastic non linear problems. *Journal of Computational Physics*, 228(1) :202–235, 2009.
- [57] B. Achchab, M. El Fatini, A. Ern, and A. Souissi. A posteriori error estimates for subgrid viscosity stabilized approximations of convection-diffusion equations. *Appl. Math. Letters* 22 (2009), 1418–1424.
- [58] 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.* 43, 5 (2009), 867–888.
- [59] A. Ern and S. Meunier. A posteriori error analysis of Euler–Galerkin approximations to coupled elliptic–parabolic problems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* 43 (2009), 353–375.
- [60] A. Ern, S. Stephansen, and M. Vohralík. Guaranteed and robust discontinuous Galerkin a posteriori error estimates for convection–diffusion–reaction problems. *J. Comp. Appl. Math.*, accepted.
- [61] A. Ern and M. Vohralík. Flux reconstruction and a posteriori error estimation for discontinuous Galerkin methods on general nonmatching grids. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris* 347 (2009), 441–444.
- [62] P. Omnes, Y. Penel, and Y. Rosenbaum. A posteriori error estimation for the discrete duality finite volume discretization of the Laplace equation. *SIAM J. Numer. Anal.* 47 (2009), 2782–2807.
- [63] M. Vohralík. Unified primal formulation-based a priori and a posteriori error analysis of mixed finite element methods. *Math. Comp.* (2009).

Articles soumis

- [64] B. Amaziane, L. Pankratov, A. Piatnitski. Homogenization of a compressible immiscible two-phase flow in porous media : application to gas migration in a nuclear waste repository, *SIAM J. Multiscale Modeling and Simulation*.

- [65] M. Afif and B. Amaziane, On convergence of a 1D finite volume scheme and numerical simulations for water-gas flows in heterogeneous porous media, *Applied Numerical Mathematics*.
- [66] O. Angelini, K. Brenner, and D. Hilhorst, A finite volume method on general meshes for a degenerate parabolic convection-reaction-diffusion equation.
- [67] O. Angelini, C. Chavant, E. Chénier, R. Eymard, and S. Granet, Finite volume approximation of a diffusion-dissolution model and application to nuclear waste storage.
- [68] C. Cancès, Asymptotic behavior of two-phase flows in heterogeneous porous media for capillarity depending only of the space. I. Convergence to an entropy solution.
- [69] C. Cancès, Asymptotic behavior of two-phase flows in heterogeneous porous media for capillarity depending only of the space. II. Occurrence of non-classical shocks to model oil-trapping.
- [70] R. Eymard, M. Henry, and D. Hilhorst, Singular limit of a two-phase flow problem in porous medium as the air viscosity tends to zero, <http://arxiv.org/abs/0910.4003>, *Journal DCDS S*, in revision.
- [71] F. Caro, A. Genty E. Laucoin, B. Saad, Numerical simulation of two phase flow in porous media in a context of high performance computing. *J. Mathematics and computers in simulation*.
- [72] Z. Khalil, M. Saad, Degenerate two-phase compressible immiscible flow in porous media : The case where the density of each phase depends on its own pressure *J. Mathematics and computers in simulation*.
- [73] K. Pham and J.-J. Marigo. Construction and analysis of localized responses for gradient damage models in a 1d setting. *Vietnam Journal of Mechanics*.
- [74] S. Araújo de Lima, M. A. Murad, Ch. Moyne and D. Stemmelen. Three-scale model of Ph-dependent flows and ion transport with equilibrium adsorption in kaolinite clays : I. Homogenization analysis. *Transport in Porous Media*, en révision.
- [75] A. Mikelić and C.J. van Duijn, Rigorous derivation of a hyperbolic model for Taylor dispersion.
- [76] J. Golder, M. Joelson and M.C. Néel, Mass Transport with sorption in porous media, *Mathematical Computing and Simulation*.
- [77] E. Burman, A. Ern and M. Fernández. Explicit Runge–Kutta schemes and finite elements with symmetric stabilization for first-order linear PDE systems.
- [78] J. Droniou and C. Le Potier, Construction and convergence study of local-maximum-principle preserving schemes for elliptic equations.
- [79] F. Hermeline, Approximation of convection-diffusion operators on general meshes in two-space dimensions.
- [80] A. Lejay et S. Maire. Simulating diffusions with piecewise constant coefficients using a kinetic approximation.
- [81] I. Ben Gharbia and J. Ch. Gilbert Nonconvergence of the plain Newton-min algorithm for linear complementarity problems with a P-matrix. soumis.
- [82] D. Moreau, H. Borouchaki and P. Laug Adaptive hexahedral mesh refinement soumis au CRAS Mathématiques.
- [83] J.-B. Apoung, P. Havé, J. Houot, M. Kern, and A. Semin. Reactive transport in porous media. *submitted to ESIAM : Proc.*
- [84] A. Younes. An efficient implementation of the method of lines for multicomponent reactive transport equations. *Submitted to AIChE Journal*.
- [85] Ph. Ackerer and F. Delay, Inversion of a set of well-test interferences in a fractured limestone aquifer by using an automatic multi-scale parameterization technique, Soumis à Journal of Hydrology.

- [86] H. Fahs, M. Hayek, M. Fahs, and Ph. Ackerer. A complete inverse approach for identifying hydraulic parameters in 2D dual-porosity media. Soumis à *Advances in Water Resources*.
- [87] J. Tryoen, O. Le Maître, M. Ndjinga, and A. Ern. Intrusive projection methods with upwinding of uncertain nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, en révision.
- [88] L. El Alaoui, A. Ern, and M. Vohralík. Guaranteed and robust a posteriori error estimates and balancing discretization and linearization errors for monotone nonlinear problems. HAL Preprint 00410471.
- [89] A. Ern and M. Vohralík. A posteriori error estimation based on potential and flux reconstruction for the heat equation. HAL Preprint 00383692.
- [90] D. Hilhorst and M. Vohralík. A posteriori error estimates for combined finite volume–finite element discretizations of reactive transport equations on nonmatching grids.

Articles dans des ouvrages collectifs

- [91] H. Amor, J.-J. Marigo, C. Maurini, and K. Pham. A regularized variational formulation of fracture mechanics with unilateral contact at crack lips. In *ESMC 2009, 7th Euromech Solid Mechanics Conference*, Lisbon, September 2009. Euromech.
- [92] M.C. Néel, M. Joelson and A. Zoia, Compétition entre transport et rétention de matière en milieu poreux, *Mécanique et Industrie*, numéro spécial "19e Congrès français de mécanique (CFM 2009)", **10 (3-4)**, pp 217-221 (2009).
- [93] M.J. Gander and C. Japhet. An algorithm for non-matching grid projections with linear complexity. Proceedings of the 18th international conference of Domain Decomposition methods, M. Bercovier, M. J. Gander, D. Keyes and O. Widlund eds., Springer LNCSE, 2009.
- [94] L. Halpern, C. Japhet and J. Szeftel. Discontinuous Galerkin and nonconforming in time optimized Schwarz waveform relaxation. Proceedings of the 18th international conference of Domain Decomposition methods, M. Bercovier, M. J. Gander, D. Keyes and O. Widlund eds., Springer LNCSE, 2009.
- [95] L. Mathelin, A. Nouy, and O. Le Maître. Generalized stochastic decomposition for large evolution problems. In *8th European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH 2009)*, 29 Jun.-3 Jul. 2009, Uppsala, Sweden, 2009.
- [96] A. Nouy. A priori model reduction technique for solving stochastic partial differential equations. In *8th European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH 2009)*, 29 Jun.-3 Jul. 2009, Uppsala, Sweden, 2009.

Autres

- [97] B. Kienzler, J. Lützenkirchen, E. Bozau (FZK-INE), R. Cervinka, D. Lukin, A. Vokál (NRI), A. Bourgeat, O. Gipouloux (UCBL), A. Genty (CEA) and G. Mathieu (IRSN), Editor : G. Mathieu ; Date of issue 05/11/09, Deliverable European project PAMINA.

Thèses en cours

- [98] A. Abadpour (Encadrant M. Panfilov), *Analyse asymptotique du probleme de Riemann pour les écoulements compositionnels polyphasiques en milieux poreux et applications aux réservoirs souterrains*, LEMTA Nancy, depuis oct. 2007.
- [99] Th. Abballe (Encadrants G. Allaire et Ph. Montarnal) *Simulation multi-échelle et homogénéisation des matériaux cimentaires*, CMAP, Ecole Polytechnique, bourse CEA, depuis oct 2007.

- [100] 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.
- [101] 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.
- [102] K. Brenner (Encadrant Danielle Hilhorst), *La méthode des volumes finis sur maillages quelconques pour des problèmes d'écoulement et de transport en milieu poreux*, Thèse de l'Université de Paris-Sud 11, depuis oct. 2008, bourse de thèse de l'Université de Paris-Sud 11, moniteur.
- [103] N. Chalhoub (Encadrants A. Ern et M. Vohralík), *Analyse d'erreur a posteriori et méthodes adaptatives pour des problèmes instationnaires discrétisés en volumes finis*, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (co-financement ENPC et CNRS Liban); depuis octobre 2008.
- [104] R. Joubaud (Encadrants A. Ern et T. Lelièvre), *Modélisation multi-échelles des argiles*, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (financement ANDRA); depuis octobre 2009.
- [105] 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).
- [106] S. Krell (Encadrants F. Boyer et F. Hubert), *Schéma volumes finis en mécanique des fluides complexes*, Thèse de l'université de Provence démarrée en octobre 2007.
- [107] Th. Migliore, *Estimation des paramètres de transport pour un milieu hydro-géologique et analyse d'incertitudes*, Thèse de l'université de Nice soutenue le 7 décembre 2009, financement ANDRA.
- [108] 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).
- [109] 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); soutenue le 8 décembre 2009.
- [110] J. Tryoen (Encadrants A. Ern et O. P. Le Maitre), *Méthodes spectrales stochastiques pour la propagation d'incertitudes dans les problèmes hyperboliques*, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (financement ENPC); depuis octobre 2008.