



Grand défi interdisciplinaire NEEDS

Nucléaire : énergie, environnement, déchets, société

Appel à propositions de recherche 2012 du Projet Fédérateur

NEEDS-MILIEUX POREUX

Date de publication de l'appel : Juillet 2012

Date limite de réception: les propositions complétées selon le formulaire prévu doivent être envoyées pour le 15 septembre 2012, aux adresses suivantes:
Michel.Cathelineau@univ-lorraine.fr et Benjamin.Rotenberg@upmc.fr

INTRODUCTION

Le projet NEEDS-Milieux Poreux fédère des équipes du CNRS, de l'ANDRA, de l'IRSN, d'EDF et du BRGM. Il fait partie des 7 projets fédérateurs regroupés au sein du Grand Défi Interdisciplinaire NEEDS (Nucléaire : énergie, environnement, déchets, société).

Le présent appel à propositions vise à soutenir des travaux de recherches s'inscrivant dans le champ des questions scientifiques définies par le Conseil de Projet de NEEDS-Milieux Poreux. L'enjeu général de ce projet fédérateur est d'améliorer la connaissance des matériaux poreux naturels ou anthropiques (argilites, bétons, barrières et bouchons en argiles smectitiques, ...) susceptibles d'être en contact ou affectés par des perturbations hydriques, thermiques, mécaniques ou chimiques lors du stockage des déchets radioactifs. Il s'intéresse pour cela plus particulièrement aux processus élémentaires à petite échelle (échelle moléculaire, échelle du feuillet argileux, des pores, du réseau de grains ou de pores, ...) qui régissent le comportement macroscopique de ces matériaux. Les études sur les différents matériaux poreux pertinents pour le stockage, pris isolément ou à leur interface, doivent à la fois permettre de dégager des problématiques et approches communes, en particulier la question essentielle du Volume Élémentaire Représentatif (VER) pour la description et la mesure de leurs propriétés, et de souligner les aspects spécifiques à chacun des matériaux.

Le programme propose d'aborder ces questions en encourageant les projets transverses, multi-équipes et pluridisciplinaires, en particulier en établissant des liens forts entre minéralogistes, physico-chimistes, géo-mécaniciens, physiciens du solide, mathématiciens appliqués et numériciens.

THÈMES SCIENTIFIQUES (voir annexe projet scientifique)

Dans le cadre du présent appel à propositions de recherche (APR), seront soutenues des propositions ayant pour objectif de :

- **Caractériser et modéliser la structure interne des milieux poreux.** La compréhension et la prédiction des comportements macroscopiques nécessitent une analyse fine du réseau poreux en termes morphologiques et topologiques. Ceci implique de coupler plusieurs techniques d'observation et de modélisation, en mettant l'accent sur l'échelle sub-micronique où se tiennent de nombreux processus qui impactent la porosité (hydratation et gonflement-retrait, dissolution-précipitation des minéraux conduisant au colmatage des petits pores, déformations micromécaniques...).
- **Caractériser et modéliser les réponses de ces matériaux face à des sollicitations** physico-chimiques, hydrauliques, mécaniques et chimiques, en partant de l'échelle microscopique pour comprendre le comportement macroscopique.
- **Comprendre et modéliser les mécanismes de transfert** dans les matériaux poreux à faible perméabilité, en précisant les mécanismes de transfert de gaz et de solutés mis en jeu aux petites échelles, en lien avec l'organisation porale et minérale.
- **Comprendre et modéliser les interactions fluides-minéraux**, notamment les phénomènes physico-chimiques élémentaires qui découlent de la structure de ces milieux depuis l'échelle du nanomètre jusqu'aux échelles supérieures (micromètre-millimètre). Ceci concerne par exemple l'influence du confinement sur les solutions interstitielles, sur la croissance / dissolution des cristaux, en conditions saturées ou non.

OUTILS ET MOYENS

Les projets pourront mettre en œuvre des approches variées et complémentaires en combinant autant que de besoin observations et expérimentations en milieu contrôlé et/ou *in situ* et modélisation. Ils pourront utiliser les résultats ou des matériaux des laboratoires souterrains existants, des dispositifs expérimentaux en laboratoires conventionnels.

Les propositions peuvent concerner un ou plusieurs des thèmes listés ci-dessus. NEEDS-Milieus Poreux a vocation à favoriser la conduite de recherches impliquant des équipes des différents partenaires ainsi que des projets inter-disciplinaires.

ORGANISATION

● Soumission des projets

Les projets doivent être soumis selon le formulaire de soumission pré-formaté présenté en Annexe 1 de cet AO. Les documents sont à adresser par voie électronique à M. Cathelineau (Michel.Cathelineau@univ-lorraine.fr) et B. Rotenberg (Benjamin.Rotenberg@upmc.fr).

La durée des projets est fixée à un an. Exceptionnellement et sous réserve de la fourniture d'un argumentaire scientifique, la durée du projet proposé peut atteindre 2 ans. Dans tous les cas, il est demandé une proposition de répartition annuelle du budget.

● Financement des propositions et équipes éligibles

Les financements accordés s'établiront entre 20 et 70 k€ HT par projet. Ils concernent des dépenses de fonctionnement, petit équipement (< 4 k€), co-financement d'équipements (moins de 50% du coût total), prestations extérieures et salaires post-doctoraux.

Les projets seront portés de préférence par des UMR CNRS et/ou des associations d'équipes appartenant aux quatre autres organismes fondateurs de NEEDS-Milieus Poreux (ANDRA, IRSN, EDF, BRGM).

● Évaluation des propositions

Les projets seront évalués par le Conseil Scientifique (CS) de NEEDS-Milieus Poreux qui comprend des membres désignés par les organismes fondateurs et des personnalités extérieures. Sur la base de l'évaluation et des propositions fournies par le Conseil Scientifique, le Conseil de Projet (CP) décide des moyens financiers attribués aux projets retenus.

Tous les projets pluriannuels seront réévalués à la fin de chaque année par le CS sur la base d'un rapport d'avancement. Il n'y aura pas de nouvelles demandes à déposer mais ce rapport devra indiquer si des modifications sont à apporter pour la suite du projet. L'acceptation initiale d'un projet pluriannuel n'implique pas son financement sur toute la période prévue, le CP pouvant interrompre ou réduire le budget alloué si l'avancement ne correspond pas aux attentes initiales.

- **Engagement des équipes dont le projet a été retenu**

La convention générale de NEEDS et la convention spécifique de NEEDS - Milieux Poreux fixent le cadre juridique relatif aux propriétés intellectuelles et exploitation, secret et publication/communication.

Par ailleurs, **les équipes financées s'engagent à remettre un rapport d'avancement et un rapport final au Conseil de Projet de NEEDS- Milieux Poreux** ainsi qu'à participer aux réunions de restitution organisées annuellement. Ces réunions sont destinées à faciliter l'échange entre les organismes, à permettre des relations plus étroites entre les équipes et valoriser les travaux du Projet.

Les responsables de projets s'engagent également à **privilégier la publication des travaux dans des revues internationales à comité de lecture, et à faire référence, dans toutes ces publications, au soutien accordé par NEEDS-Milieus poreux.**

ANNEXE de l'appel à propositions de recherche
NEEDS- Milieux Poreux

Programme scientifique du Projet Fédérateur

Comportement aux différentes échelles des milieux poreux pour le stockage

Préambule

En favorisant une forte interaction entre des disciplines diverses (physique et chimie, minéralogie et géosciences, mathématiques appliquées, numérique) sur des matériaux complexes comme les roches argileuses et les matériaux impliqués dans le stockage (bétons, par exemple), le présent projet vise la compréhension des comportements à petite échelle de ces matériaux complexes lorsqu'ils sont soumis à des processus couplés (thermo-hydro-mécanique-chimique), afin de comprendre et de rendre compte des comportements macroscopiques. Pour ce faire, les travaux s'organiseront autour de trois axes : la caractérisation des matériaux en tant que milieux poreux multi-phases, les interactions entre fluides et minéraux et l'évolution des propriétés de ces matériaux sous sollicitations multiples. Ils mobiliseront des approches innovantes de caractérisation, de simulation numérique ou expérimentale au laboratoire.

Introduction

1 - Contexte et objectifs

Le stockage de déchets radioactifs de haute et moyenne activité et à vie longue (HA/MAVL) engendrera dans le temps un ensemble de sollicitations de type thermique, hydraulique/gaz, mécanique et chimique (THMC) en champ proche des ouvrages. Il s'agit d'évaluer si ces sollicitations ont un effet ou non sur les propriétés des matériaux du stockage et de connaître en particulier leur influence sur les propriétés de transfert ou de confinement de ces matériaux.

La connaissance des matériaux poreux complexes, tels que les milieux argileux et cimentaires, s'inscrit bien au-delà du seul domaine d'application du stockage de déchets radioactifs. La caractérisation continue de leur structure interne et l'étude des phénomènes élémentaires physico-chimiques qui en découlent, depuis l'échelle du nanomètre jusqu'aux échelles supérieures au micromètre, constituent un enjeu de recherche fondamentale. Elle doit permettre d'expliquer :

- « l'état initial » de ces matériaux, en particulier pour les formations argileuses la nature des processus mécaniques, hydrauliques et géochimiques mis en jeu, et la manière dont ces processus l'ont été dans le temps,
- les réponses de ces matériaux à l'échelle macroscopique, en s'appuyant sur les processus fondamentaux mis en jeu, face à des sollicitations physico-chimiques, hydrauliques, hydriques, mécanique et chimiques, et en particulier les aspects temporels.

Le projet doit encourager :

- les travaux pluridisciplinaires, aux frontières des savoir-faire dans le domaine de la caractérisation à l'échelle nanométrique et multi-échelles,
- l'établissement de ponts entre des communautés scientifiques diverses, dont les potentiels sont encore insuffisamment en synergie, pour résoudre les problèmes multi-physiques aigus posés par des matériaux aux comportements complexes et très dépendants des conditions physicochimiques (pression partielle des gaz, activité de l'eau, chimie des solutions...).

Le projet fédérateur propose d'aborder ces questions en encourageant les projets transverses multi-équipes, et pluri-disciplinaires, ce qui constitue bien l'objectif d'un programme comme celui de NEEDS, et en particulier en établissant des liens forts entre minéralogistes, physico-chimistes, géomécanciens, physiciens du solide, modélisateurs, mathématiciens appliqués et numériciens. Ces travaux devront permettre de répondre, par des études à petite échelle, aux questions soulevées par les expériences au niveau macroscopique et en particulier in situ.

Les études sur les différents matériaux poreux pertinents pour le stockage (argilite, béton, barrières et bouchons en argile smectitique, ...), pris isolément ou à leurs interfaces, permettront à la fois de dégager des problématiques et approches communes, en particulier la question essentielle du Volume Élémentaire Représentatif (VER) pour la description et la mesure des propriétés, et de souligner les aspects spécifiques à chacun des matériaux. Il s'agira également de préciser les phénomènes en jeu à leurs interfaces.

2 - Caractérisation et modélisation des mécanismes fondamentaux Thermo-Hydro-Mécaniques-Chimiques (THMC) aux petites échelles : enjeux

Les roches argileuses constituent des milieux poreux extrêmement complexes avec un réseau de pores couvrant une vaste gamme de taille allant du nanomètre jusqu'aux échelles millimétriques. Ces matériaux poreux présentent par ailleurs des spécificités propres, notamment le fait que leur structure est évolutive sous l'action de différents paramètres physiques et chimiques (teneur hydrique, température, composition chimique des fluides), et une texture et une organisation dont l'anisotropie peut influencer sur la diffusivité des solutés ou les conductivités thermique et hydraulique. La compréhension et la prédiction des comportements macroscopiques nécessitent une analyse fine du réseau poreux à la fois en termes morphologiques (taille et forme des pores), mais aussi en termes topologiques (organisation, orientation et connectivité des pores). La caractérisation des structures porales et de l'organisation minérale implique de coupler plusieurs techniques d'observations, en mettant l'accent sur l'échelle sub-micronique dont l'importance est primordiale car c'est à cette échelle que vont se tenir de nombreux processus qui impactent la porosité (hydratation des minéraux argileux, gonflement-retrait des argiles, dissolution-précipitation des carbonates conduisant au colmatage des petits pores, déformations micromécaniques, structure et dynamique de l'eau et des ions dans les pores...).

Programme des recherches

Les travaux s'organiseront autour de trois axes : la caractérisation des matériaux en tant que milieux poreux multi-phases, les interactions entre fluides et minéraux et l'évolution des propriétés de ces matériaux sous sollicitations multiples. Ils mobiliseront des approches innovantes de caractérisation, de simulation numérique ou expérimentale au laboratoire.

1 - Améliorer la caractérisation des propriétés des milieux

Les caractéristiques actuelles des matériaux de site résultent de la combinaison de processus géologiques (processus de sédimentation et biologiques lors du dépôt des sédiments, transformations diagénétiques, microdéformations, phases tectoniques, ...) qui ont été peu étudiées quant à leur conséquences sur l'arrangement textural actuel (formation du squelette minéral, évolution et distribution de la taille des pores) et leur propriétés mécaniques et de transfert des solutés dont l'étude reste fondamentale. Les modèles sont en général très simplistes par rapport à la complexité observée à l'échelle de la centaine de nanomètres jusqu'à la dizaine de microns. Il convient donc (a) d'améliorer la caractérisation expérimentale aux petites échelles (les travaux pourront en particulier s'appuyer sur les travaux menés à plus grande échelle dans le cadre de FORPRO et TRASSE), (b) d'améliorer la représentation tridimensionnelle des milieux dans les modèles théoriques et numériques, et (c) de passer d'une description des différentes propriétés depuis les petites vers les grandes échelles.

1.a - Approches expérimentales 2D/ 3D à toutes échelles

L'objectif de caractérisation nécessite l'amélioration des méthodes expérimentales, analytiques et numériques de caractérisation et de représentation de la structure en 3D des argiles compactes, en lien avec l'analyse expérimentale et/ou numériques de propriétés THMC/Transfert. D'un point de vue expérimental, il s'agira de répondre à deux exigences contradictoires : d'une part une haute résolution, d'autre part une représentativité des échantillons étudiés. Le premier aspect bénéficiera du développement récent de nouvelles techniques expérimentales (tomographie ou microscopie X, FIB, MET haute résolution, ...) pour produire des données 3D à l'échelle de quelques centaines de nanomètres. Le second devra s'appuyer à la fois sur l'amélioration des protocoles de prélèvement et de préparation d'échantillons de petite taille afin d'éviter leur perturbation, le développement d'outils statistiques garantissant leur représentativité au sein du matériau réel (définition de VER aux différentes échelles), et sur le couplage entre les méthodologies expérimentales. Ainsi, on exploitera également des techniques plus classiques telles que la diffusion aux petits angles/diffraction des rayons X ou des neutrons qui ne nécessitent aucune préparation particulière de l'échantillon dont la taille peut être importante (centimétrique), garantissant ainsi une bonne représentation statistique, et permettent de couvrir plusieurs ordres de grandeurs en échelle, depuis le nanomètre pour la diffraction (éventuelles évolutions de phase cristallines, fonctions d'orientation des différents minéraux), jusqu'à quelques centaines de nanomètres pour la diffusion (distributions de taille de pores, anisotropies texturales). Par ailleurs l'usage des neutrons permet, grâce à leur important pouvoir de pénétration, de développer des environnements complexes d'échantillons. Enfin, les propriétés mécaniques à petite échelle pourront être précisées grâce à la nanoindentation.

1.b - "Echantillons numériques" : constitution et expérimentation

De nombreuses techniques de caractérisation sont des méthodes indirectes et ne permettent pas de remonter directement à une information structurale ou texturale d'arrangements d'objets. Il est alors nécessaire de faire des hypothèses microstructurales et de vérifier que les réponses mesurées sont compatibles avec ces hypothèses sans aucune assurance sur l'unicité du modèle choisi. Une des voies pour sortir de ces impasses expérimentales est de passer par des méthodes numériques de modélisation de la structure des milieux poreux déformables. Cette démarche indirecte consiste dans un premier temps à développer un milieu poreux virtuel, soit en se basant sur un arrangement tridimensionnel de minéraux et des pores associés, soit en considérant un continuum minéral dans lequel se déploie un réseau poreux, pour ensuite utiliser cet objet virtuel comme prototype numérique sur lequel on peut simuler les expériences menées sur les échantillons réels. La confrontation entre les résultats de la simulation et les résultats expérimentaux doit ainsi apporter une forte contrainte pour valider la morphologie virtuelle choisie. Par ailleurs, la modélisation permettant d'analyser l'influence de différents paramètres, cette confrontation rend possible d'appréhender la sensibilité des techniques expérimentales sur des systèmes expérimentaux aussi complexes et aussi hétérogènes. Enfin, une fois cette étape de validation faite, l'objet numérique (ou l'image 3D expérimentale) devient une structure virtuelle pouvant servir de base à des simulations pour comprendre les réponses macroscopiques comme par exemple les déformations sous contrainte et les transferts d'eau liquide et de gaz. Cette démarche nécessitera de croiser les compétences entre différents champs disciplinaires (mathématiques appliquées, informatique, physique des milieux poreux, géologie, minéralogie) et pourra porter dans un premier temps sur des matériaux modèles avant de considérer les matériaux naturels.

1.c - Modélisation "bottom-up" : simulation moléculaire et physique statistique

De nombreuses propriétés aux petites échelles ne sont pas accessibles expérimentalement. On peut alors avoir recours à une approche complémentaire en les déterminant à partir des simulations microscopiques de type ab-initio ou classiques (dynamique moléculaire ou Monte-Carlo) et en ayant recours aux outils de la physique statistique (équations intégrales, modèles Poisson-Boltzmann ou MSA par exemple). Il s'agit de prédire les propriétés d'un système à partir d'une description à l'échelle atomique et des interactions moléculaires. Ces approches reposent sur une description simplifiée du système (structure, composition) et des interactions et doivent donc d'abord être validées par la comparaison avec les données expérimentales disponibles (spectroscopies, diffraction, micromécanique...). On peut alors avoir une certaine confiance pour la prédiction d'autres propriétés. Cette approche a déjà permis d'étudier notamment le gonflement des argiles ou le transport interfoliaire ou dans les pores de quelques nanomètres. Il s'agira d'étudier les propriétés physicochimiques (effets spécifiques des ions, effet de la teneur en eau, propriétés de l'eau à la surface des argiles et des minéraux carbonatés) et mécaniques afin d'obtenir les éléments constitutifs pour alimenter des modèles à plus grande échelle, par exemple d'homogénéisation des mécaniciens, qui pourront être mis en œuvre avec la structure réelle du matériau. Il sera ainsi possible discriminer entre les modèles de type granulaire ou continu et de comprendre les aspects poro-mécaniques. Parmi les développements souhaitables pour la modélisation microscopique, on peut mentionner l'amélioration des champs de force classiques (il pourra être nécessaire de prévoir des expériences dédiées à la validation de ces modèles), la simulation dans l'ensemble osmotique (μ_{H_2O} , P , T), ou la description des transferts thermiques notamment à l'interface solide/liquide. La modélisation du transport à l'échelle du VER nécessitera le recours à des techniques telles que la dynamique brownienne ou des modèles sur réseau, et aux approches de types "réseaux de pores", pour aller vers des descriptions continues.

2 - Comprendre et modéliser les interactions fluides-minéral

La caractérisation et la modélisation des mécanismes de transfert de gaz et de solutés mis en jeu aux (très) petites échelles, en lien avec l'organisation porale et minérale nécessite aussi d'évaluer comment l'eau présente dans les différents pores interagit avec la phase solide (dissolution, précipitation) et modifie ou non les propriétés de transfert (diffusion, convection) des matériaux.

2.a - Physicochimie des solutions interstitielles des matériaux argileux et cimentaires

Du point de vue physicochimique, il est nécessaire de parvenir à une description quantitative : i) des activités des différentes espèces ioniques ou non dans les nanopores, ii) les pressions partielles des gaz dissous en équilibre avec l'eau de pore, iii) l'état de protonation des surfaces et iv) de la distribution spatiale des différentes espèces dans les pores. L'enjeu ensuite est de modéliser les processus de nucléation et croissance cristalline, et la cinétique des réactions entre les solutions et le squelette minéral. Notamment, les énergies de surface sont des clés de la nucléation et de la croissance cristalline. Or, on est limité actuellement à l'utilisation de formes géométriques. Les surfaces réactives sont un autre verrou pour le développement de la cinétique, et il est nécessaire de prendre en compte des variations des surfaces de réactions.

Sur la base de la description 3D de l'organisation porale et minérale, il s'agit de comprendre les forces et les interactions mises en jeu entre les minéraux, entre les minéraux et l'eau interstitielle, et entre les minéraux, la phase liquide et la phase gazeuse, en termes de nature (forces de contact, forces de Van der Waals, tension superficielle, viscosité...), de localisation, et d'interaction si des modifications physico-chimiques externes se produisent (variation de pH, redox, activité bactérienne, diffusion et arrivée de solutés ou des gaz). Les méthodes spectroscopiques ou la RMN donnent par exemple des informations sur le comportement du solvant et du soluté au voisinage des surfaces minérales et dans la porosité. Ces informations, de nature nanoscopique, pourront être utilisées dans le développement des modèles multiéchelles.

De nombreuses données thermodynamiques et cinétiques manquent pour alimenter les modèles si l'on veut prédire ou reproduire fidèlement les interactions entre la phase fluide et les minéraux, que cela soit du point de vue physique et chimique. Il faut donc poursuivre et encourager la documentation des bases de données actuellement assez riches en thermodynamique mais encore très incomplètes en cinétique pour les approches de nucléation et croissance cristalline. L'extrapolation des bases de données vers le domaine non saturé reste également à clarifier.

2.b - Couplages THMC, auto-cicatrisation

Les interactions fluide-minéral ne sont pas indépendantes des tenseurs de contrainte auxquels les échantillons sont soumis. Les liens éventuels (bilatéraux ou unilatéraux) entre la chimie de l'eau au sens large et les sollicitations thermiques et hydromécaniques sont aujourd'hui peu appréhendés. Il s'agit en particulier d'évaluer les modifications de chimie de l'eau sous l'effet de sollicitations, couplées ou non, thermiques et hydromécaniques, en lien avec les modifications de l'espace poral notamment, et inversement, les effets chimiques induits sur le comportement contraintes-déformations. La description à l'échelle des feuillets du contact eau-argile permettra de comprendre à l'échelle nanométrique le mécanisme et la dynamique qui contrôlent les conséquences du gonflement/dégonflement microscopique sur l'endommagement et/ou fracturation de l'argilite. Cette modélisation pourra être couplée à des contraintes physiques exercées sur les roches argileuses telles que la pression, la température, ...

Dans ces domaines, il est essentiel d'associer systématiquement, dès le début des projets, expérimentations et modélisations : il y a énormément à gagner des allers et retours entre les deux approches, comme il est aussi essentiel d'associer les approches physiques et chimiques des interactions fluides-minéraux-gaz : par exemple, le modèle Nanokin (nucléation et croissance cristalline) est né d'une collaboration suivie entre spécialistes de croissance cristalline, physique des et géochimie. L'implication des équipes NEEDS à des expériences en cours ou programmées par les partenaires du projet (au site de Meuse/Haute-Marne ou Tournemire en particulier) pourra être encouragée, notamment pour la définition de leur mise en œuvre, leur suivi et la mise à disposition d'échantillons lors de leur démantèlement.

3 - Les processus contraintes - déformations et le transfert de gaz aux petites échelles

Le comportement contrainte-déformation des milieux argileux compacts et le transfert des gaz dans ces milieux sont généralement décrits par des mécanismes d'endommagement (fissuration diffuse et/ou fracturation localisée), de gonflement, de fluage et d'interactions fluide-solide de type Biot pour la mécanique et par des mécanismes de type diphasique pour le transfert couplé de gaz et d'eau liquide. Au-delà d'une consolidation des schémas conceptuels macroscopiques, la compréhension des mécanismes contraintes-déformations et de transfert des gaz mis en jeu aux petites échelles sous différents chemins de sollicitations macroscopiques couplées ou non (par exemple de type mécanique : chemins en compression/extension, de type thermique: élévation de température, de type hydraulique : désaturation, mise en charge hydraulique, injection de gaz, ou de type chimique : percolation par un fluide de chimie différente) est une donnée importante pour appréhender la durabilité des matériaux et leur comportement sur de grandes échelles de temps inaccessibles à l'expérience.

3.a - Transferts de gaz

Il s'agira de comprendre comment un gaz exprimé pénètre et migre dans ces matériaux initialement saturés (effets capillaires, effets de disjonction etc.). En particulier, on clarifiera la nature des pores mis en jeu ainsi que celle des interactions entre les solides, l'eau condensée et le gaz exprimé. On précisera également s'il y a déplacement de l'eau condensée, déformation locale des solides et des pores de manière générale. Il faudra de plus vérifier si l'on peut transposer, et si oui, comment et jusqu'à quelle échelle, ces mécanismes élémentaires vers les échelles supérieures pour rendre compte des grandeurs macroscopiques (vitesses, flux, pressions, degrés de saturation), et par quel type de modèle (applicabilité du modèle diphasique, par exemple).

3.b - Comportement contraintes-déformations

On caractérisera la nature de l'endommagement aux petites échelles suivant différents types de sollicitation hydro-mécanique-gaz / chemins de chargement ("décollement" entre minéraux argileux et non-argileux, propagation du décollement dans la matrice argileuse, propagation sub-critique, glissement et extension entre minéraux argileux et non-argileux et/ou au sein de la matrice argileuse, comportement de l'eau liée...). On précisera en particulier où et comment s'organise cet endommagement au sein des milieux, quelles sont les interactions eau condensée-gaz-solides au regard de la nature de l'eau condensée, et quel sens on peut donner à l'approche de Biot (avec quels coefficients de Biot). Il s'agira également de comprendre ce qui pilote le comportement différé suivant les différentes sollicitations macroscopiques, pour expliquer les éventuels effets de seuil. On cherchera ici encore à préciser la validité des comportements macroscopiques (peut-on définir une vitesse de déformation limite, un déviateur seuil) et si les déformations macroscopiques (iso-volumiques ou non) peuvent être expliquées à partir des déformations aux petites échelles.

3.c - Lien avec les autres objectifs

Le lien entre ces objectifs et ceux décrits dans la première section est essentiel, car il est nécessaire d'intégrer la complexité et l'hétérogénéité structurelle du matériau aux échelles supérieures, et de faire le lien avec les modèles de comportement macroscopique utilisés pour évaluer in fine l'évolution phénoménologique du stockage et du milieu géologique. La consolidation de l'ensemble des connaissances concernant le comportement THMC(Tr) et le transfert de gaz acquis à petites échelles vers une échelle macroscopique constitue une étape clé dans ce programme de recherche. En effet, ce n'est que sur des volumes de matériau d'une certaine dimension, généralement centimétrique à décimétrique, qu'est réalisé l'ensemble des mesures des paramètres macroscopiques permettant de valider les prévisions de comportement issues de l'"up-scaling" des modèles "petite échelle" intégrant aussi la réelle complexité des argilites. Des expériences in situ pourront être proposées pour valider des concepts établis à plus petite échelle, mais il n'est pas prévu d'intégrer les expériences in situ comme un objectif en soi dans le programme.