



Sujets des allocations de thèses Andra 2012

Sciences humaines, sociales et économiques

Co-production entre action politique et connaissances scientifiques et techniques

Il s'agit de rendre compte du cadrage juridique, historique et sociopolitique du projet et d'analyser ce cadrage en relation avec les processus de production de connaissances qui participent à sa définition sur le long terme. La question de la préservation des connaissances, vis-à-vis de leur publicisation, mérite notamment d'être abordée : mécanismes de protection juridique, transmissibilité des savoirs et savoir-faire, mémoire du stockage...

Intégration et communication de savoirs à travers les outils de représentation et de modélisation scientifique

L'objet de la thèse serait d'étudier les outils de représentation et de modélisation scientifique de l'Andra en tant qu'instruments d'intégration et de partage de savoirs à la fois au sein de l'Agence et dans ses relations avec l'extérieur. Dans ce cadre, les activités de simulation sont confrontées à une problématique particulièrement intéressante : évolution accélérée de moyens, questionnement des modalités d'appréhension du futur, scénarisation... Une approche comparative des fonctionnalités de ces outils au niveau international est souhaitable.

Transport réactif en milieu poreux : expérimentation, modélisation et outils de simulation

Description et compréhension de la régulation des réactions d'oxydo-réduction dans les environnements de subsurface

Le but du sujet est de comprendre le contrôle des réactions redox dans un environnement de subsurface, de définir les réactions d'oxydo-réduction dominantes et de décrire les couples redox actifs ainsi que leur cinétique réactionnelle au cours du temps. Dans une approche théorique, un seul couple redox devrait définir le potentiel d'oxydo-réduction du système à l'équilibre. Toutefois, dans les sols et sédiments, de nombreux couples redox coexistent en non-équilibre (phénomène transitoire). Pour mener à bien ce travail de recherche, les approches développées seront à la fois naturalistes, au travers de l'interprétation de données de terrain (analogues naturels en milieu argileux), mais également expérimentales sur des systèmes géochimiques, en réacteurs et en colonnes, bien définis et contraints (toxique chimique au contact d'échantillon argileux). Le sujet s'intéresse particulièrement à caractériser, décrire et comprendre le comportement et la mobilité, dans des conditions oxiqes et anoxiques, d'éléments chimiques sensibles au redox et d'intérêt pour l'Andra notamment dans le cadre de la gestion des déchets FAVL (Cr, As, Hg, U...).

Etude expérimentale et de modélisation des fronts réactifs au sein des matériaux argileux compactés et des argilites du Callovo-Oxfordien

Sur la base des acquis concernant la diffusion des radionucléides au sein des argilites, le sujet vise à étendre les conditions à des fronts réactionnels raides tels qu'induits par une précipitation de sels pouvant modifier la géométrie du milieu de transfert (par colmatage, dissolution, taille de la double couche). La démarche expérimentale sera calée dans un premier temps sur un système modèle (e.g. illite compactée), puis portée aux argilites. L'apport de cette thèse serait d'alimenter la démarche mise en œuvre concernant les transferts aux petites échelles et les extrapolations spatiales, via notamment

les modèles de réseaux de pores élaborés par ailleurs. Dans un premier temps, il s'agira de réaliser des expériences de diffusion dites "de référence" servant à caler la modélisation (comme par exemple la précipitation de sels dans la porosité d'illites recompressées à différentes pressions puis traçage HTO/ ^{36}Cl - ^{22}Na) puis de complexifier le système expérimental jusqu'à reproduire des fronts chimiques pénétrant dans le Callovo-Oxfordien.

Transfert réactif des molécules organiques dissoutes au sein des argilites du Callovo-Oxfordien : mécanismes et irréversibilité

Les molécules organiques dissoutes, aussi bien issues de la dégradation des déchets que du stock organique naturel de la roche, sont susceptibles de constituer des composants interagissant avec les radionucléides. Les interactions en solution sont évaluées par les constantes de complexation, selon leur disponibilité dans les bases de données thermodynamiques. En revanche, les interactions des molécules en surface des solides restent le plus souvent non maîtrisées, si ce n'est par des approches globales de type Rd. Pour évaluer l'effet potentiel du stock total en organiques dissouts en champ proche d'un stockage dans les argilites, les mécanismes de transfert réactif doivent être appréhendés en termes d'aptitude à diffuser, à se sorber et à se désorber. Le sujet portera sur la relation entre les sites de surfaces minérales et les fonctionnalités de différentes molécules représentatives de l'inventaire organique, puis sur le degré de réversibilité de la fixation multi-dentate. Les moyens seront des essais de transfert, de sorption afin d'accéder aux bilans de matière, ainsi que toute technique permettant d'accéder à une information directe de la spéciation de surface. Les échantillons d'argilite pourront représenter un état sain de la roche, ainsi que des situations perturbées par une oxydation ou une eau hyperalcaline.

Transfert réactif du calcium ^{41}Ca dans les matériaux cimentaires

^{41}Ca est un radionucléide dont le comportement dans les matériaux cimentaires doit être appréhendé vis-à-vis de sa chimie en surface des phases cimentaires (échange et complexation) et vis-à-vis d'un échange isotopique avec du calcium structural. L'étude de ces deux aspects intègre *de facto* la dégradation cimentaire sous eau, ainsi que la prise en compte de cinétiques très différentes. L'objectif de la thèse vise un modèle de transfert diffusif, couplé à un modèle de rétention chimique distinguant/pondérant les différents mécanismes et leurs degrés de réversibilité respectifs. Les moyens devront reposer sur des mesures de diffusion sur pâtes de ciment à différents états d'altération, et des mesures d'isothermes en batch sur pâtes et pôles cimentaires jugés représentatifs. Des techniques seront utilisées pour accéder autant que possible à une information directe de la localisation et de l'environnement de ^{41}Ca ainsi que de sa spéciation en surface. L'ensemble des travaux doit être orienté *in fine* vers une intégration dans un code numérique de transfert réactif, afin d'évaluer la contribution des paramètres du modèle.

Transport réactif en milieu poreux non saturé (di phasique multi-composant gaz et soluté)

L'objectif premier est de développer des méthodes de résolution et des algorithmes de couplage performants pour traiter le couplage entre la réactivité chimique et le transport eau-gaz multi-composants gaz et soluté, à partir du couplage entre un code de transport di phasique multi-composants gaz et soluté (par exemple Tough2-MP) et un code de chimie (par exemple PhreeqC). Le domaine d'application premier recherché est celui de la carbonatation atmosphérique des ouvrages en béton, en 1D/2D. Cet exemple permet de cibler en particulier le couplage entre la saturation en eau et la réactivité chimique.

Décomposition de domaine en temps et en espace pour simuler l'avancée des fronts de réaction chimique

L'objectif est de développer une méthode numérique de décomposition de domaine espace/temps, permettant de gérer et d'optimiser le pas de temps et les sous-domaines physico-chimiques, en lien avec l'avancée des fronts de réaction chimique dans les différents matériaux, depuis les interfaces. Aujourd'hui, les pas de temps gérant les fronts réactionnels localisés sont appliqués au domaine global et conduisent à des simulations très longues, ce qui limite la représentation. Une optimisation du pas de temps par sous-domaine, permettrait ainsi de diminuer le temps CPU global et d'accroître la capacité de représentation du système chimique.

Transfert de masse et de chaleur: propriétés et simulation

Propriétés de transfert colloïdal dans la roche saine et endommagée

Différents travaux ont été menés dans le but de déterminer un seuil de filtration colloïdale de la roche saine. Cette approche est confrontée aux interactions chimiques des colloïdes modèles, qui entraînent une complexité supplémentaire à l'interprétation des essais et une incertitude quant à la maîtrise des bilans de matière (processus de piégeage irréversibles à l'échelle des essais). Le choix de colloïdes modèles sera fait sur la base des acquis visant la détermination d'un seuil de filtration de la roche. Il s'agira d'évaluer les écarts de mobilité colloïdale entre des échantillons de roche saine et des échantillons initialement endommagés puis resaturés, sous conditions de gradient de pression d'eau. Pour cela, des cellules de percolation et un protocole de fracturation seront aménagés, afin de permettre le suivi des propriétés hydrauliques et de transfert colloïdal, vis-à-vis de l'auto-colmatage de la roche. L'étude de l'influence des colloïdes devra s'attacher à rendre compte des possibilités de remobilisation de radionucléides peu mobiles (e.g. lanthanide, actinide). Les techniques analytiques utilisées seraient de façon non exhaustive : COT-métrie, Chromatographie d'Exclusion, HPLC couplée spectrométrie de masse, diffusion lumière, ICP-MS couplée à l'ablation laser (analyse post-mortem), SLRT, spectrométrie gamma...

Simulation des échanges de masse et de chaleur entre l'air de ventilation des ouvrages souterrains et les milieux poreux associés (roche et composants en béton)

Les études menées par l'Andra dans le cadre de l'estimation de l'humidité relative, de la température, des pressions de gaz et des concentrations en composants gazeux dans le système de ventilation, couplé avec les échanges eau - gaz - température avec les milieux poreux considérés (roche, béton...) sont réalisées de manière simplifiée en découplant les phénomènes. L'objectif de la thèse serait de disposer d'un couplage explicite de masse et de chaleur entre un milieu poreux et un milieu ouvert. Le couplage devra être appliqué/applicable aux outils de simulations de physique milieu poreux de l'Andra (ex. TOUGH2-MP) et aux outils de simulation d'aérodynamique existants.

Comportement mécanique et hydromécanique des milieux argileux : mesure, modélisation et simulation

Comportement hydromécanique des milieux argileux compacts à l'échelle de la structure porale (du nanomètre à la centaine de nanomètres) : interactions solides-solides et fluides-solides aux interfaces (endommagement, gonflement, viscosité...)

Sur la base de représentations 3D de l'espace poral des milieux argileux compacts (du nano à la centaine de nano), l'objectif est d'identifier et/ou de développer des méthodes pour rendre compte des déformations des solides (minéraux argileux et non argileux), au regard des différentes forces d'interactions susceptibles d'être mises en jeu entre les solides et entre les solides et l'eau condensée. Les méthodes seront appliquées à des cas de sollicitation afin de contribuer à la compréhension/validation des processus observés à l'échelle macroscopique, et si possible la détermination des grandeurs macroscopiques du comportement contrainte-déformation instantané et différé.

Méthode de simulation du comportement hydromécanique saturé et non saturé des argilites autour des ouvrages : représentation explicite des endommagements localisés et diffus

Le sujet de thèse porte sur le développement, l'intégration et l'exploitation d'une(de) méthode(s) numérique(s) permettant de simuler explicitement le comportement hydromécanique des argilites : localisation de l'endommagement par (macro)fissures, couplage HM (saturé et non saturé) au niveau des discontinuités et des argilites saines (ou endommagées de manière diffuse), évolution des discontinuités en tant que telles ou en tant que milieu poreux (prise en compte du colmatage par gonflement, cicatrisation hydraulique mais pas mécanique...) etc.. Deux grands types de modèles HM des argilites devront être explorés, ceux basés sur le concept de propagation (sub)critique de fissures avec déformations différées fonction de l'endommagement et ceux basés sur une approche d'endommagement initial de type élastique endommageable, avec déformations différées fonction de

l'endommagement. L'implémentation de la(es) méthode(s) devra(ont) être menée(s) dans un code de calcul opérationnel existant (utilisé par la communauté scientifique ou industrielle).

Endommagement induit autour des ouvrages souterrains : caractérisation et modélisation

La construction d'ouvrages souterrains dans les argilites du Callovo Oxfordien au niveau principal du laboratoire de recherche souterrain de Meuse Haute Marne a mis en évidence l'apparition d'une zone fracturée induite par le creusement. En s'appuyant i) sur des mesures de l'impact hydromécanique des creusements réalisées *in-situ*, et de l'effet de la désaturation/resaturation et ii) sur la caractérisation des propriétés des argilites endommagées sur échantillon, l'objectif sera de mieux décrire le comportement et la réponse hydromécaniques de cette zone fracturée. Deux approches de modélisation sont envisageables i) développer des modèles numériques associés permettant de représenter la formation et l'évolution de ces fractures ii) développer des modèles homogénéisés équivalents afin de mieux prendre en compte les impacts de la fracturation et le changement des propriétés des factures au cours du temps sur les caractéristiques hydromécaniques de cette zone.

Caractérisation de l'endommagement autour des ouvrages souterrains par mesures géophysiques.

Le creusement d'ouvrages souterrains génère la formation d'une zone endommagée (EDZ, pour Excavated Damaged Zone) autour de ces ouvrages dans laquelle les propriétés mécaniques et hydrauliques de la roche sont altérées. Le milieu constitué par la zone endommagée dans les argilites de Bure constitue un milieu particulièrement atténuant, ne permettant souvent pas d'exploiter un signal au-delà d'1 à 2 m de distance. D'autre part, l'analyse de la majorité des mesures effectuées au laboratoire souterrain ne considère que la variation du temps de propagation de l'onde P. Ces mesures permettent une approche quantitative de l'endommagement (extension, intensité moyenne d'endommagement, évolution globale), mais ne donnent pas accès à ses propriétés (densité de fissuration, orientation préférentielle de la fissuration, rechargement mécanique) dont la connaissance est importante pour étudier la perméabilité de la zone endommagée. Le sujet de thèse proposé a pour objectif de définir un mode opératoire de mesures géophysiques, portant à la fois sur le matériel utilisé, la procédure de mesures et le traitement des données, permettant d'améliorer la connaissance que nous avons de l'EDZ autour des ouvrages souterrains.

Comportement différé des argilites saines et endommagées : modélisation et validation

L'objectif de cette recherche est d'améliorer la compréhension du comportement différé du Callovo-Oxfordien et de répondre aux interrogations sur l'évolution du fluage dans le temps en fonction du changement de déviateurs:

- i. quantification de la diminution de la vitesse de fluage dans le temps,
- ii. existence d'une asymptote,
- iii. existence d'une surface de charge correspondant à un arrêt du fluage,
- iv. influence de l'endommagement sur la vitesse de fluage.

Le travail de thèse consistera à définir et à réaliser des essais expérimentaux permettant de répondre à ces interrogations.

Dans un second temps, il aura à développer à partir des connaissances déjà acquises et des résultats de ces essais un modèle de fluage adapté au Callovo-Oxfordien. Les résultats de ce modèle seront comparés aux mesures réalisées dans les galeries du laboratoire de recherche souterrain de Meuse/ Haute-Marne (extensométrie, convergence, contraintes dans les revêtements...).

Simulation numérique du couplage entre la dégradation chimique du béton armé (dégradation du béton et corrosion) et le comportement mécanique du béton armé à l'échelle des ouvrages

A partir des modèles intrinsèques couplés de dégradation mécanique des bétons /armatures, de dégradation chimique des bétons et de corrosion des armatures en saturé / non saturé, l'objectif est de développer une méthode numérique permettant de simuler dans le temps et en 3D le comportement chimico mécanique couplé de structures en béton armé soumises à des sollicitations chimiques et mécaniques : changement d'échelle/homogénéisation, décomposition de domaine en espace.... Le travail sera mené si possible avec les outils mécanique (à définir) et chimique existants (par exemple PhreeqC, Traces, MT3D...). On pourra simplifier les modèles mécanique et chimique au regard de l'objectif *in fine* recherché. On s'attachera à vérifier la capacité de la méthode à reproduire le

comportement macroscopique de structures et avec des temps de calcul raisonnables, sur des cas concrets.

Modélisation du comportement en grandes déformations et de l'endommagement ductile d'aciers de construction non alliés (gamme S235/S355).

L'objectif de cette recherche est de décrire le comportement mécanique "à long terme" des composants métalliques envisagés pour le stockage géologique profond des déchets radioactifs (chemisage et sur-conteneur). Il s'agit notamment de modéliser l'évolution de la déformation plastique ainsi que le mode de ruine de ces composants sous les effets conjoints d'un chargement mécanique de confinement (pression du terrain) et d'une perte d'épaisseur par corrosion. On restera pour cette étude dans le cadre de la corrosion généralisée. Les travaux de thèse incluent la réalisation des essais d'identification des paramètres du modèle qui aura été développé ainsi que la réalisation d'essais éprouvettes permettant de tester sa robustesse.

Evolution physico-chimique de l'argilite dans les jeux fonctionnels

La compréhension de l'évolution du vide annulaire entre la paroi et le chemisage d'une alvéole HA est essentielle pour identifier le chargement du chemisage au cours du temps. Le creusement de l'alvéole crée un endommagement initial et une désaturation de l'argilite. La déformation de l'argilite avec le temps va réduire petit à petit le vide annulaire. La fermeture de l'alvéole va dans le même temps induire une augmentation de l'humidité relative et permettre l'arrivée d'eau dans le vide annulaire. L'objectif est de comprendre les phénomènes physico-chimiques qui se produisent dans ce jeu fonctionnel en lien avec l'arrivée d'eau, le potentiel délitement de la paroi rocheuse et le compactage. Ce travail passe par la réalisation d'essais spécifiques sur échantillons (maquette,...) et s'appuiera sur les expérimentations *in situ* réalisées au laboratoire de recherche souterrain de Meuse Haute Marne. Il devra déboucher sur la caractérisation de l'évolution du vide annulaire et la proposition de modèles permettant de reproduire le comportement poro-mécanique de ce milieu.

Réactivité chimique et mécanique des aciers en conditions de stockage

Caractérisation du chargement mécanique à moyen et long terme du chemisage métallique d'une alvéole HA à partir d'essais maquettes en laboratoire intégrant l'interaction sol/structure.

L'objectif de cette recherche, à caractère essentiellement expérimental, est de simuler en laboratoire les modalités de mise en charge mécanique et de chargement à long terme d'un chemisage d'alvéole de stockage géologique profond (tube en acier non allié). Le banc d'essai à échelle réduite qui sera mis en œuvre devra permettre de reproduire le chargement radial attendu *in-situ* à long terme (12 MPa en moyenne, potentiellement non homogène) ainsi que les conditions de contact acier/argilite et le degré de saturation de l'argilite. Outre la maîtrise du chargement appliqué, la déformation et éventuellement l'endommagement de la maquette de chemisage (localisation et évolution des fissures éventuelles) devront être mesurés au cours de l'essai. Les résultats obtenus serviront de base à l'interprétation des essais *in-situ* réalisés au laboratoire souterrain. Une fois le banc d'essai validé, l'influence de l'état de la maquette (épaisseur, niveau de corrosion, présence d'une liaison vissée, etc.) sera étudiée.

Identification des conditions de passivation des aciers non alliés en milieu argileux

En milieu argileux anoxique, à des températures proches de 90°C et un pH proche de la neutralité, les aciers non alliés se corrodent essentiellement par un processus de corrosion généralisée. Le suivi des cinétiques de corrosion montre que ce système évolue d'une corrosion active (vitesses de plusieurs dizaines de $\mu\text{m}/\text{an}$) vers un système passif (vitesses proches ou inférieures au micron par an). Cette transition est toujours observée dans les expérimentations, mais sa période d'occurrence semble dépendre de plusieurs paramètres (évolution du pH lié au processus de corrosion et aux interactions fer/argile, présence de CO_2 gazeux et/ou de silicium, présence d'un produit de corrosion initialement peu protecteur mais permettant la croissance sous-jacente d'un composé favorisant la passivation...). L'objectif de la thèse consistera à identifier le rôle des différents paramètres et leur influence sur le temps de transition "actif/passif".

Propriétés physico-chimiques des produits de corrosion et produits d'interactions fer/argile

Les produits de corrosion et d'interactions à l'interface fer/argile ont un rôle prépondérant sur les cinétiques de corrosion et la disponibilité du fer dans le milieu géologique. La sidérite, la magnétite et la chukanovite sont les trois principaux produits de corrosion se formant sur les aciers au carbone dans les milieux argileux, ainsi que les silicates de fer quand l'acier est en contact avec l'argile. Les propriétés de ces phases sont mal connues dans les conditions de formation étudiées (milieu argileux anoxique, à des températures proches de 90°C) : conductivité électronique, porosité, perméabilité, coefficient de diffusion... L'objectif des travaux de thèse consistera à caractériser ces produits provenant soit d'expérimentations en cours (essai en laboratoire souterrain), soit d'expériences dédiées à concevoir et à mettre en œuvre.

Corrosion sous contrainte des aciers non alliés

Le développement de la corrosion sous contrainte (CSC) est lié aux propriétés du matériau, à la contrainte et à l'environnement. Dans les conditions anoxiques, en milieu argileux, les aciers non alliés sont plutôt concernés par une corrosion généralisée. Néanmoins, il faudrait vérifier l'influence de la période oxydante et de la piqûration d'aciers non alliés avant et après formation des produits de corrosion à 90 °C sur la résistance à la CSC. Dans le cas de la corrosion localisée (qui peut éventuellement résulter d'une activité bactérienne), il n'est pas exclu que la piqûration initie le processus de CSC.

Les objectifs de la thèse sont donc:

- d'identifier les zones de potentiels d'oxydo-réduction à 90 °C qui favorisent la CSC d'un point de vue amorçage sur des éprouvettes présentant ou non des couches de produits de corrosion dans des milieux anoxiques argileux contenant différentes concentrations d'argilite du Callovo-Oxfordien.
- d'étudier l'influence de la piqûration après formation des produits de corrosion sur l'amorçage de la CSC.

Comportement des déchets

Altération de combustible UOX/MOX en présence de matériaux d'environnement

L'objectif est d'étudier l'altération de combustibles UOX et MOX avec différents teneurs en Pu en présence de matériaux d'environnement (fer et argilite). En effet, il manque à ce jour une expérience intégrale permettant de vérifier la robustesse du modèle d'altération développé selon l'approche électrochimique. En particulier, la caractérisation des phases secondaires sera essentielle afin d'identifier les phases susceptibles de se former en présence d'argilite et de piloter l'altération du combustible via leur limite de solubilité. Enfin, les expériences menées sur différents MOX permettront de vérifier l'applicabilité aux combustibles MOX du modèle d'altération développé initialement pour les UOX.

Altération du verre SON68 en présence de matériaux d'environnement (produits de corrosion / argiles)

L'objectif est de caractériser les interfaces verre/produits de corrosion et verre/argiles à l'aide de techniques à l'échelle nanométrique. On se basera sur les résultats des premiers travaux sur ce sujet, notamment le démantèlement des premières expériences intégrales verre/fer/argilite. Les premières caractérisations ont en effet révélé une altération hétérogène : seule l'altération des premiers grains de verre à l'interface verre/fer/argilite est fortement influencée par les matériaux d'environnement. Les analyses en solution ne reflètent pas cette altération hétérogène, elles permettent seulement d'estimer une altération moyenne, essentiellement due à l'altération des grains de verre éloignés de l'interface. Des caractérisations fines de l'interface verre/fer et verre/argilite doivent permettre de proposer un modèle mécanistique des interactions entre le verre, le gel et les matériaux d'environnement, notamment préciser le rôle du fer dans le gel et l'effet chimie/transport. Les échantillons étudiés proviendront des expérimentations *in situ* ou en laboratoire jour du GL VFA.

Biodégradation des polymères

Les déchets technologiques peuvent contenir une grande diversité de matériaux polymères qui peuvent éventuellement se dégrader à long terme sous l'action de l'activité microbienne. Certains de ces polymères sont très faiblement biodégradables à l'état initial mais leur vieillissement (sous l'effet de la chaleur, de l'irradiation, de l'humidité, etc.) les rendraient généralement plus sensibles à la biodégradation. Il s'agirait donc d'évaluer la biodégradabilité des polymères les plus abondants dans le stockage vieillis préalablement par radiolyse et par hydrolyse en milieu basique. Les polymères qui apparaissent les plus pertinents pour cette étude sont le polyéthylène, le PVC et le polyuréthane.

Caractérisation de la morphologie et de la reprise d'eau des enrobés des boues bitumées

La technique de résonance magnétique nucléaire RMN 1D a été récemment utilisée pour suivre la reprise d'eau des enrobés bitumineux monosels et bisels. Les résultats actuels montrent que la technique de RMN peut fournir des informations intéressantes pour la compréhension de l'évolution de l'eau dans l'enrobé et de la lixiviation des sels. L'objet de la thèse serait d'étudier la reprise d'eau et le relâchement des sels en utilisant la RMN 1-D, en considérant la différence des compositions des sels présents dans deux types d'enrobés. On cherchera à évaluer plus finement les porosités développées en profondeur après la reprise d'eau. Les résultats seront confrontés avec le modèle COLONBO.

Localisation, relâchement et spéciation des produits d'activation et de fission au sein des matériaux métalliques

Les matériaux métalliques représentent une part importante du contenu radiologique des déchets MAVL, en particulier du chlore 36, du carbone 14 et du tritium. Les modèles actuels considèrent un relâchement labile des produits de fission et un relâchement des produits d'activation congruent à la corrosion du métal ou de l'alliage, sans prise en compte du rôle de l'oxyde. Les matériaux considérés sont les gaines en alliage de zirconium, ainsi que les aciers inoxydables (embouts...) et les alliages de nickel (ressorts...). Il s'agira ici, sur la base d'hypothèses quant à l'origine et la répartition des radionucléides, d'évaluer le transfert des radionucléides au sein de la couche d'oxyde et de déterminer la spéciation des radionucléides relâchés par corrosion des matériaux métalliques et leur répartition entre la phase gaz et la phase liquide (spéciation du C14 : formes organiques ou inorganiques, phase gaz/liquide).

Fonctionnement des écosystèmes et transferts dans la biosphère

Comparaison du fonctionnement des écosystèmes forêt, prairie et culture du plateau du Barrois à l'aide de mesures de flux dans le cadre d'ICOS écosystèmes

L'objectif est ici de contribuer à la mise en place d'un site instrumenté au sein du projet d'infrastructure européenne ICOS sur une parcelle en prairie et culture afin de mesurer en continu à l'échelle de la parcelle les échanges d'énergie (rayonnement, flux de chaleur latente/sensible), et de matière (échange d'eau, de carbone, d'azote, ...) entre le sol, la végétation et l'atmosphère. Ces résultats, accompagnés de diverses mesures météorologiques, écologiques et physiologiques, doivent permettre d'estimer les contributions respectives du sol et de la végétation mais également d'étudier les principaux mécanismes responsables de ces flux atmosphériques.

La proximité de trois sites de mesure de flux turbulents en forêt, prairie, et culture constitue une opportunité unique de comparer le fonctionnement des trois écosystèmes différents soumis à des conditions pédo-climatiques similaires. L'objectif est donc également d'évaluer les différences de comportement des écosystèmes en termes d'énergie (albédos, bilans énergétiques, répartition de l'énergie dans l'écosystème), d'utilisation de l'eau (efficacité de l'utilisation de l'eau, rapport de Bowen, conductance stomatique) et de flux de CO₂.

Les résultats des mesures effectuées sur les trois sites pourront être extrapolés à l'échelle régionale pour être comparés à ceux déduits d'une approche « top down » basée sur les mesures du réseau de hautes tours atmosphériques et des modèles d'inversion.

Dynamique de transformation biotique des pools de chlore organique et inorganique au sein des écosystèmes terrestres

Le chlore participe à un cycle biogéochimique complexe qui implique la formation et la dégradation de différentes formes inorganiques et organiques du chlore, par la microflore du sol ainsi que via le recyclage par la végétation. La dynamique de ces phénomènes semble très variable en fonction du type d'écosystème mais les mécanismes à l'origine des changements de spéciation du chlore sont peu documentés. L'étude proposée contribuera à la description quantitative du cycle biogéochimique du chlore dans le sol d'écosystèmes contrastés. Elle précisera en particulier le rôle de la microflore du sol dans les processus naturels de formation et de déhalogénéation des composants organochlorés. L'étude s'appuiera sur des observations *in situ* et des modèles expérimentaux pour comparer à des échelles complémentaires l'activité des populations microbiennes prédominantes et la dynamique de changement de spéciation du chlore.

Etude du cycle biogéochimique du sélénium en fonction des stocks de Se organique et des mécanismes de minéralisation

Une variabilité importante caractérise les transferts du sélénium à la végétation (deux ordres de grandeurs pour une même concentration totale en Se dans le sol). Il convient de rechercher les causes de cette variabilité dans la spéciation des phases labiles du Se, notamment la phase organique. L'étude proposée caractérisera le rôle à long terme de la végétation dans l'incorporation du Se dans le cycle de la matière organique. Elle expliquera le lien entre le Se du sol et son transfert à la plante en fonction des stocks de Se organique et des mécanismes de minéralisation via des manip *in situ* d'apport de Se sous forme organique et inorganique sur les sites expérimentaux de l'Observatoire Pérenne de l'Environnement (forêt, culture, prairie). L'étude expérimentale des mécanismes impliqués s'appuiera autant que possible sur l'utilisation combinée d'isotopes du sélénium et du carbone.

Dynamiques territoriales d'évolution d'usages des sols. Le cas du Barrois

Les activités agricoles (assolements, conduites des peuplements végétaux, conduites d'élevage, réorganisations parcellaires, ...) sont des objets en dynamiques rapides dont l'évolution est de plus en plus souvent invoquée dans les questions de politiques d'aménagement, d'environnement, de qualité des produits et d'épidémiologie (tant végétale qu'animale), qui ont trait au développement durable des territoires. En lien avec les programmes scientifiques de l'Observatoire pérenne de l'environnement de l'Andra, la thèse s'attachera à étudier les dynamiques à l'œuvre dans le territoire du Barrois et à l'optimisation des échanges d'information et de connaissances entre les acteurs concernés.

Effet de différentes modalités de gestion des verses (type de végétation, microbiologie, apports de MO...)

Les matériaux des verses (essentiellement argileuses provenant du Callovo-Oxfordien) vont être entreposés sur de larges surfaces à l'air libre et seront végétalisés. Ils vont alors subir une pédogenèse rapide due à 1) l'exposition en conditions oxydantes de matériaux jusqu'alors à l'équilibre avec les conditions de profondeur et en absence d'O₂ et à 2) l'action des plantes qui, en développant leurs racines, vont provoquer des changements physiques, chimiques et biologiques. Cette pédogenèse aura de nombreuses conséquences sur le devenir des éléments majeurs et mineurs contenus dans les argilites ainsi que sur la minéralogie de ces matériaux.

Ces travaux seraient réalisés dans le cadre du Système d'Observation et d'Expérimentation pour la Recherche en Environnement de l'Observatoire Pérenne de l'Environnement sur le Site expérimental agrosystème verse d'Osnes le Val et sur les verses du laboratoire souterrain. Il s'agira de tester différents couverts végétaux (annuelles, pérennes, Taillis à courte rotation) sur l'évolution des verses, leur impact environnemental et leur effet sur la biodiversité (végétale, animale, microbienne).

Mesures, observation et surveillance

Contrôles non destructifs des gaz et radionucléides gazeux

Les méthodes actuellement les plus utilisées pour détecter et quantifier les gaz émis par les colis de déchets consistent à placer le colis dans une enceinte fermée et à réaliser une analyse des gaz émis directement et/ou après piégeage dans des barboteurs. Cette méthode comporte de nombreuses contraintes de mise en œuvre dues à la variété de colis dont les volumes et masses sont très distincts (de 183 litres à 1,18 m³ et de 330 kg à environ 2300 kg).

L'objectif est d'explorer de nouvelles méthodes plus performantes en termes de sensibilité afin de caractériser les très faibles concentrations (ppb) de radionucléides gazeux directement sur l'ensemble des types de colis MAVL.

Techniques pour la gestion et l'assimilation de données d'observation et de surveillance et outils d'aide à la décision

Afin de répondre aux objectifs de sûreté et de réversibilité, des moyens sont actuellement mis en place par l'Andra pour, d'une part, caractériser dès à présent l'environnement et ses différents milieux (eaux, air, sols, faune, flore) par un maillage de prélèvements, d'analyses et de stations de mesure pérennes de la qualité des milieux, d'autre part, qualifier le système d'auscultation envisagé pour le stockage à travers des démonstrateurs instrumentés par de nombreux capteurs.

Toute cette instrumentation fournira une quantité importante d'informations et de données, complétée par des résultats de simulations numériques du comportement multi-physique du système. Pour obtenir une vision consistante du système dans toute sa dimension spatio-temporelle, l'assimilation de données (data mining) apparaît être un moyen incontournable. Le travail de la thèse consistera à :

- identifier, trier et hiérarchiser l'information pertinente à partir d'une grande masse de données (filtrage, élimination du bruit, etc.), en développant et/ou en comparant des méthodes adaptées aux besoins de l'Andra (étude des corrélations, régression multi-variables, réseaux de neurones, algorithmes génétiques) ;
- confronter les données validées aux modèles de comportement et développer les rétroactions sur le système d'acquisition et sur les modèles et leurs données ;
- fiabiliser le processus calcul - mesures ;
- identifier, construire et optimiser le système expert ou d'aide à la décision, vis-à-vis des anomalies éventuellement repérées.

Modèles thermodynamiques et applications

Propriétés thermodynamiques des phases cimentaires des bétons "bas-pH" altérés (MSH, MASH, et CSH de bas rapport Ca/Si)

L'emploi de bétons « bas pH » est envisagé dans les concepts de stockage de déchets HA-MAVL. Le comportement de ciments « bas pH de référence » dans les conditions de fonctionnement du stockage a été évalué à l'aide de montages expérimentaux mettant directement en contact de l'argilite ou de la bentonite avec des pâtes de ciment « bas pH ». Les analyses minéralogiques des zones d'altération ont montré la présence de phases secondaires magnésiennes de type MSH et MASH et des CSH de très faible rapport Ca/Si. Aucune donnée thermodynamique n'étant actuellement disponible pour ces phases, les objectifs de cette étude seront d'acquérir les données manquantes, de les intégrer dans la base ThermoChimie et de réaliser des simulations numériques des essais déjà réalisés en laboratoire.

Influence de la température sur les équilibres minéraux carbonatés / éléments mineurs et traces dans les conditions du Callovo-Oxfordien

En parallèle à des expérimentations *in-situ*, les équilibres eau/roche en température dans le Callovo-Oxfordien sont étudiés à partir de systèmes restreints, donc simplifiés, à 25°C et 80°C. Le système carbonate sera étudié à l'aide de mise à l'équilibre de systèmes mixtes « calcite/dolomite », « calcite/ankérite » et « calcite/ankérite/dolomite », en utilisant des pôles minéraux purs, en réacteurs chimiques et en autoclaves, pour affiner l'évaluation de l'incertitude de mesure et/ou de prédiction que

l'on peut avoir sur des paramètres clefs comme le pH, l'alcalinité, le carbone inorganique dissous et la pression partielle de CO_2 . De plus, le sujet a pour but de compléter cette approche en étudiant l'influence de la température sur l'incorporation des éléments mineurs (Fe, Sr) et en trace (Ni, Co, Zn, Pb, ...) dans les matrices carbonatées pour des conditions proches de celles modélisées dans la formation du Callovo-oxfordien.