



« INNOVATION POUR UN MONDE DURABLE »
JOURNÉE SCIENTIFIQUE - ED SIE

VENDREDI 28 JUIN 2024

Amphithéâtre Caquot - Bâtiment Coriolis - École des Ponts ParisTech
(Champs-sur-Marne)

2 prix : Meilleure communication & Meilleur poster

Programme

Inscription gratuite obligatoire

Information et inscription

Comité d'organisation :
Tiana Ramaroson (ED SIE)
Abdelhamid Hakkoum (MSME)
Stéphanie Chedid (ICMPE)
Pierre Martinache (LEESU)
Charlotte Dianoux (IEES)
Hassan Hayek (ICMPE)



www.paris-est-sup.fr/ed-sie

Programme journée scientifique 28 juin 2024

	8h30	Accueil des participants		
	9h00	Ouverture par Michael PEIGNEY, Directeur de l'École Doctorale SIE		
SESSION 1 PRESENTATION ORALE	9h15	Fazzal QAYYUM	LISA	p.2
	9h35	Chloé RUDA	NAVIER	p.3-4
	9h55	Eva DE CARVALHO	ICMPE	p.5
	10h15	Hayath ZIME YERIMA	LEESU	p.6-7
	10h35 – 10h50		Pause	
SESSION 2 PRESENTATION ORALE	10h50	Joseph VERNIER	CEREA	p.8
	11h20	Nadjma AKHAL	MSME	p.9
	11h40	Zinism Giovanni KABORE	GERS-SRO	p.10
	12h00	Présentation Xavier CHATEAU , Directeur de recherche au CNRS		
12h30 – 14h15		Pause déjeuner + présentation poster		
SESSION 3 PRESENTATION POSTER		Gaspard BLONDET	NAVIER	p.11
		Lorenzo CASTI	EMGCU	p.12
		Luna GRIMAUULT	LEESU	p.13
		Armand JODON DE VILLEROUCHE	CEREA	p.14
		Laura LARUE	ICMPE	p.15
		Rammiya RAMANATHAN	ICMPE	p.16
		Sitian ZHU	HM&CO	p.17
	14h15	Présentation Davy-Louis VERSACE , Professeur – UPEC/ ICMPE		
SESSION 4 PRESENTATION ORALE	14h45	Siyuan HE	NAVIER	p.18
	15h05	Cléa CHESNEAU	ICMPE	p.19
	15h25	Abderraouf ADJIZI	MSME	p.20
	15h45 – 16h00		Pause	
SESSION 5 PRESENTATION ORALE	16h00	Guilia D'ORIO	NAVIER	p.21
	16h20	Prem MAHESHWARKAR	LISA	p.22
	16h40	Théo DUCHATEAU	ICMPE	p.23
	17h00	Elmedhi OULD MAINA	COSYS IMSE	p.24-25
	17h20 – 17h30		Délibération	
	17h30	Prix et clôture de la journée		

TITLE: Observation of type-discriminated aerosol vertical distributions with multiwavelength lidars of the future Atmosphere Observing System (AOS) mission

AUTHORS

Fazzal QAYYUM⁽¹⁾, Juan CUESTA⁽¹⁾, Abou BARK MERDJI⁽¹⁾, Anton LOPATIN⁽²⁾, Oleg DUBOVIK⁽³⁾, Durgesh NANDAN PIYUSH⁽⁴⁾, Laaziz EL AMRAOUI⁽⁵⁾

⁽¹⁾ Univ Paris Est Créteil and Université Paris Cité, CNRS, LISA, F-94010 Créteil, France

⁽²⁾ GRASP SAS, Lezennes, 59260, France

⁽³⁾ Laboratoire d'Optique Atmosphérique, UMR 8518, Villeneuve d'Ascq, 59650, France

⁽⁴⁾ National Center for Medium Range Weather Forecast, Ministry of Earth Sciences, NOIDA, INDIA, 201309

⁽⁵⁾ CNRM, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, 42 Avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse, France

LABORATORY

Laboratoire Interuniversitaire de Systèmes Atmosphériques (LISA) - UMR 7583

ABSTRACT

Atmospheric aerosols are solid and liquid particles of different sizes in suspension in the earth's atmosphere. They interact directly with shortwave and longwave radiations emitted respectively by the sun and the earth by scattering and absorption (aerosol-radiation interaction). They also change cloud microphysical properties and act as condensation nuclei (aerosol-cloud interaction). Until recently, the space-borne lidar named cloud-aerosol lidar with orthogonal polarization (caliop) onboard cloud-aerosol lidar and infrared pathfinder satellite observation (calipso) satellite was a combined mission between the national aeronautics space administration (nasa) and centre national d'études spatiales (cnes) to acquire three-dimensional distribution of aerosols and clouds during the day and night-time at a global scale. Moreover, the caliop instrument measures attenuated backscatter profiles at 532 and 1064 nm and depolarization at 1064 nm, providing qualitative information on a single dominant aerosol type and limited capabilities to derive profiles of the abundance of aerosols. To overcome these limitations and to provide new insights of the interactions between aerosols, clouds, convective processes and precipitation, the future atmosphere observing system (aos) mission comprised of contributions from nasa, cnes, japanese aerospace exploration agency (jaxa), italian space agency (asi) and canadian space agency (csa) is planned in the coming years.

In this study, we investigate the potential of the new lidars of aos for deriving quantitatively the vertical profiles of several aerosol types (i.e. Desert dust, smoke, continental, oceanic and urban polluted) using the generalized retrieval of atmosphere and surface properties (grasp) algorithm. We will compare the performance of using (i) 2-wavelength attenuated backscatter and depolarization measurements from a lidar called alicat flying in an inclined orbit called aos-storm, (ii) 3-wavelength attenuated backscatter and depolarization measurements from the so-called caligola lidar flying in a polar orbit called aos-sky and (iii) caligola with the addition of a raman channel in the uv that may potentially be used for nighttime measurements. These sensitivity analyses will be done using as pseudo-reality simulations from the modèle de chimie atmosphérique de grande échelle (mocage) the chemistry-transport model. Moreover, we will analyze the potential of implementing an innovative multi-measurement retrieval simultaneously using several adjacent lidar profiles with grasp.

KEY WORDS

AOS; vertical distributions; CALIGOLA; GRASP

TITRE : Stratégie de réemploi des charpentes métalliques de halles : adaptation de la topologie des portiques

AUTEURS

Chloé RUDA^{a,b}, François LECOMPTE^b, Cyril DOUTHE^a, Myriam SAADÉ^a, Olivier BAVEREL^a

LABORATOIRE

^a Laboratoire Navier (UMR 8205), École des Ponts, Université Gustave Eiffel, CNRS, Marne-la-Vallée, France

^b Viry - Fayat Group, Eloyes, France

RÉSUMÉ

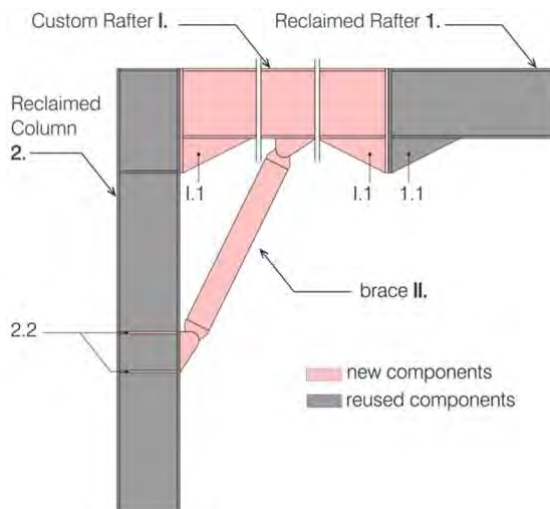


Figure 1 - Connecteur sur mesure pour l'adaptation des portiques

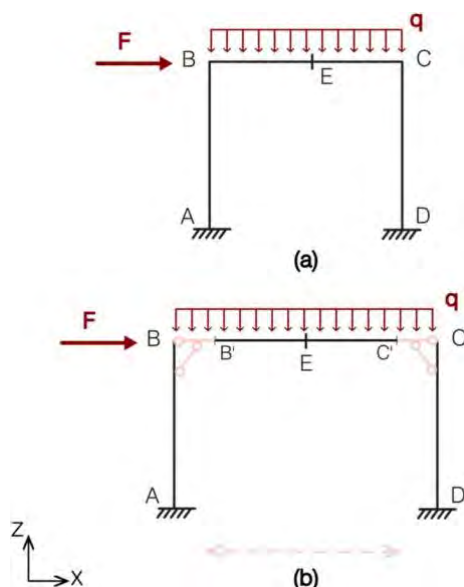


Figure 2 – Adaptation du schéma statique (a) en (b) dans un contexte de réemploi

Dans un contexte d'économie des ressources et de réduction des impacts environnementaux, le secteur de la construction initie des actions d'économie circulaire et parmi elles, le réemploi des structures de bâtiments. L'acier est un matériau pertinent pour le réemploi du fait de sa durabilité. En France, des stocks significatifs d'acier se trouvent dans le parc de bâtiments industriels aux charpentes métalliques en portiques. Ces structures, une fois déconstruites, constituent des stocks de barres à réemployer. Des méthodes de conception algorithmiques, permettant d'optimiser de tels stocks au sein des nouvelles structures, ont déjà été développées. En pratique, elles sont encore peu adaptées au marché du réemploi ainsi qu'aux typologies de structures fléchies, pourtant récurrentes en construction.

A l'interface entre conception et mise en œuvre, la présente étude propose une stratégie de réemploi basée sur l'adaptation des structures fléchies aux contraintes des nouveaux projets. En introduisant un connecteur sur mesure – en acier neuf, en rose sur les Fig. 1 & 2 – aux extrémités de la traverse, on modifie le schéma statique (Fig. 2). Le portique ainsi adapté porte sur une distance plus importante et peut supporter un chargement modifié. Les bénéfices environnementaux découlant de cette stratégie ont été évalués au sein d'une étude de cas, via la méthodologie de l'Analyse du Cycle de Vie (ACV). Une charpente de halle – composée d'un ensemble de portiques et de pannes de toiture – est construite selon différents scénarios : en acier neuf recyclé (Fig. 3, S1), avec des portiques classiques issus du réemploi et un système de pannes neuf (S2), avec une charpente totalement réemployée et adaptée au moyen du connecteur sur mesure (S3) et enfin, avec une charpente 100% réemployée (S4). Les procédés tels que la déconstruction sélective et le reconditionnement étant encore mal connus, chaque scénario est décliné selon différentes hypothèses : intervention faible (*low*), intermédiaire (*med*) et

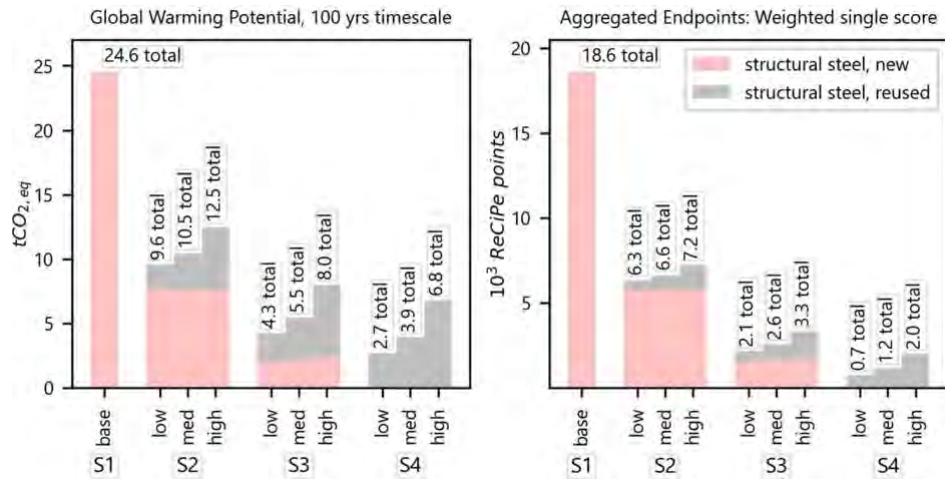


Figure 3 – Résultats de l'étude de cas

conséquente (*high*) sur les structures récupérées. La méthode d'évaluation retenue est ReCiPe 2016 v1.1. Endpoint Hierarchist. Elle permet d'agréger les différentes catégories d'impacts (réchauffement climatique, toxicité etc.) en un indicateur unique pondérant les dommages environnementaux.

Le scénario S3 conduit à une réduction de 80% des impacts environnementaux de la charpente, comparé au scénario neuf recyclé. Le réemploi réalisé au moyen du connecteur sur mesure permet d'atteindre des bénéfices comparables à un scénario 100% réemploi, tout en simplifiant l'approvisionnement en éléments réemployés. La longueur des barres pouvant être adaptée, une seule charpente démontée peut constituer un stock adéquat, sans qu'il soit nécessaire de chercher davantage de références de poutre au sein d'autres stocks.

Cette étude ouvre sur une potentielle cartographie du domaine d'emploi des éléments fléchis (Fig. 4), qui pourrait aiguiller efficacement les possibilités de remise en œuvre des poutres selon les paramètres de *portée L* (en abscisses sur la Fig. 4), de *chargement p* (en ordonnées) et d'*assemblage α* (iso-courbes rouges).

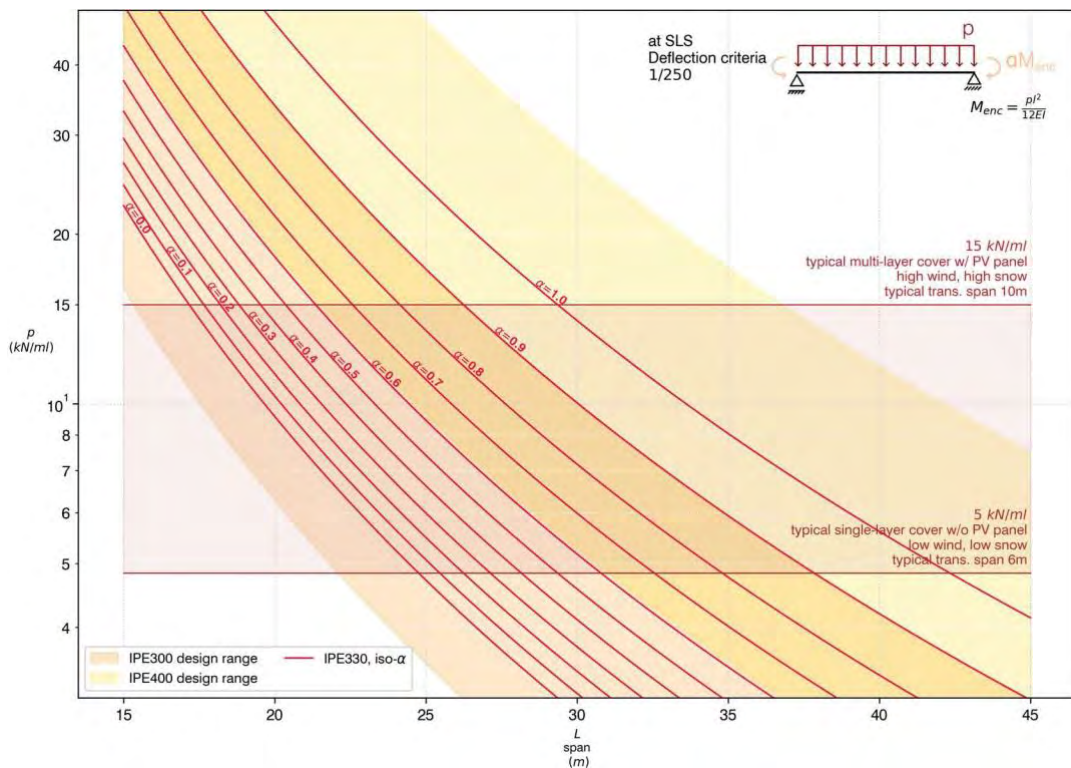


Figure 4 – Exemple de cartographie du domaine d'emploi d'une poutre IPE330

TITLE: Elaboration of highly porous polyhydroxyalkanoates (PHAs)

AUTHOR

Eva DE CARVALHO

LABORATORY

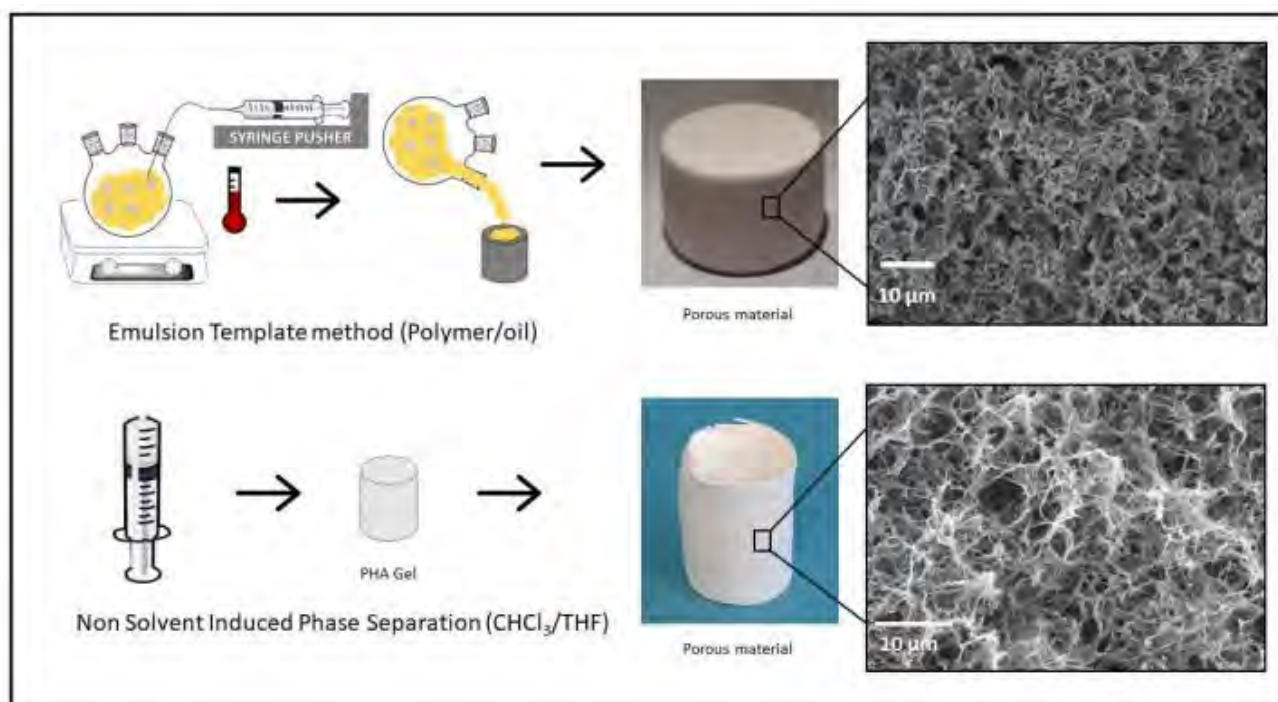
Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) UMR 7182

ABSTRACT

Polyhydroxyalkanoates (PHAs) are semi-crystalline bio-polyesters prepared by biotechnology that have gained significant interest owing to their excellent biodegradability and biocompatibility. We prepared here porous PHA by using two different methods. In the first one, PHA organogels were obtained by adding a non-solvent to PHA/solvent solutions. The phase separation and gelation took place at room temperature. Applying solvent exchange and freeze-drying processes allowed elaboration of highly porous PHAs ($d=0.04 \text{ g.cm}^{-3}$) that can absorb various solvents in a few minutes. Those materials have also very good insulating properties (0.035 W/mK). The second method is a solvent-free process that is based on the emulsion templated method without the use of solvents in presence of PCL and castor oil at 180°C . The porous PHBHHx based material showed the best colonization by *Pseudomonas*, followed by the PHBHV and PHB. This colonization only occurred in the surface and no bacterial diffusion was observed inside the material. The biodegradability study in presence of lipase showed that after 8 days, the weight losses are, respectively, 20% and 75% when the densities decreased from 0.82 g.cm^{-3} to 0.49 g.cm^{-3} . These results showed the importance of the porosity on the biodegradation of PHAs.

KEY WORDS

Biodegradable, bio-based, porous.



TITRE : Gestion des eaux pluviales par les arbres de pluie : cas du dispositif expérimental de SenseCity

AUTEURS

Hayath ZIME YERIMA^{1*}, Martin SEIDL¹, Abdelkader BENSAOUD², Emmanuel BERTHIER³ et Marie-Christine GROMAIRE¹

LABORATOIRE

¹ Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (LEESU), École des Ponts, Université Paris Est Créteil, Marne-la-Vallée, F-77455, France

² Bureau d'étude Hydrasol, 39 avenue du Général Leclerc, 92350 Le Plessis-Robinson

³ Équipe TEAM, Centre d'Études et d'Expertise sur les Risques, l'Environnement, la Mobilité et l'Aménagement (Cerema), 12 rue Teisserenc de Bort, F 78190 Trappes, France

*Auteur correspondant email: hayath.zime-yerima@enpc.fr

RÉSUMÉ

Les trames vertes et bleues sont aujourd'hui reconnues comme des solutions efficaces pour améliorer la résilience de nos villes face au changement climatique. Des solutions fondées sur la nature sont ainsi de plus en plus incorporées dans les nouveaux plans d'aménagements pour la gestion des eaux pluviales (Lähde et al. 2019; Jouin et Mlocek 2020). Ces ouvrages dits de gestion à la source des eaux pluviales favorisent l'infiltration et le stockage de l'eau, c'est le cas des arbres de pluie. Depuis une décennie, cette solution est mise en place, avec divers degrés de complexité, en Australie et aux Etats Unis (EPA 2012; Geronimo et al. 2019) et plus récemment proposée par la communauté de communes de Bruxelles sous le nom « d'arbre de pluie » (IBGE 2014). L'arbre de pluie est un ouvrage qui permet de gérer quantitativement et ou qualitativement les eaux pluviales de surfaces environnantes tout en favorisant la croissance de l'arbre.

La présente étude porte sur un dispositif pilote d'arbre de pluie mis en place fin 2019 au sein de la mini ville de Sense-City (<https://sense-city.ifsttar.fr/en/>), pour mieux quantifier et qualifier le rôle hydrologique des arbres de pluie dans l'espace urbain. La rue canyon de ce dispositif a été équipée avec 3 érables de 3.5 m de chaque côté, dont seulement un côté alimenté par le ruissellement de 88 m² de la voirie. Dans le cadre du programme OPUR, l'ensemble est monitoré par des capteurs mesurant les flux d'eau dans les différents compartiments comme l'illustre la Figure 1.

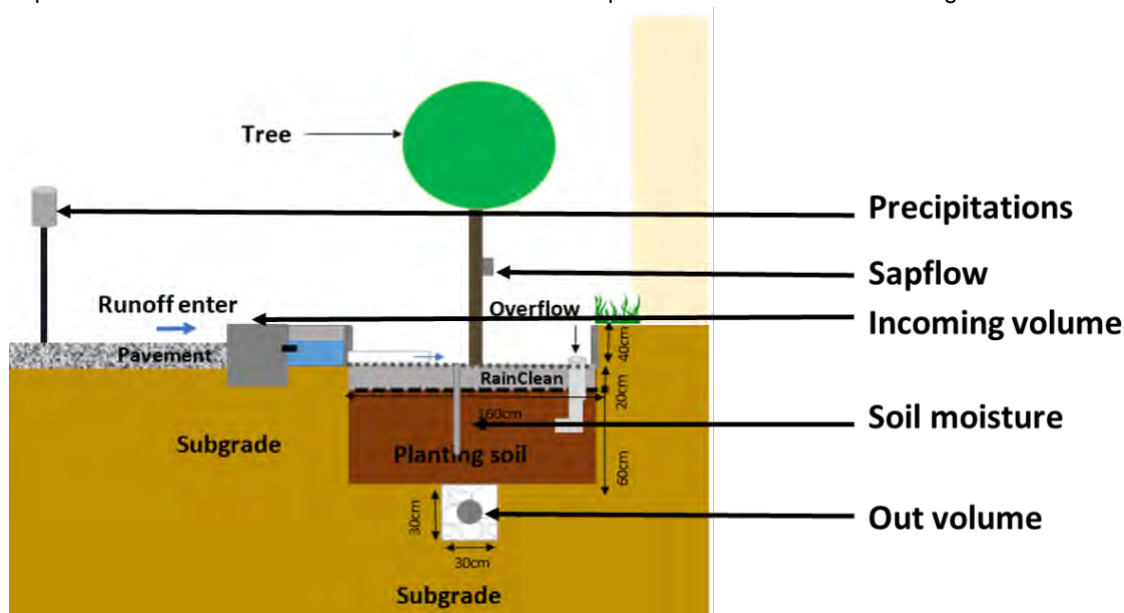


Figure 1: Dispositif d'arbre de pluie de SenseCity

Les performances de cet ouvrage sont évaluées à partir de différents indicateurs tels que l'abattement de volume. Cet indicateur a été évalué pour l'ensemble des événements ayant entraîné ou non un écoulement en sortie de drain sur une année (avril 2022 à mars 2023) et est représenté sur la figure ci-dessous.

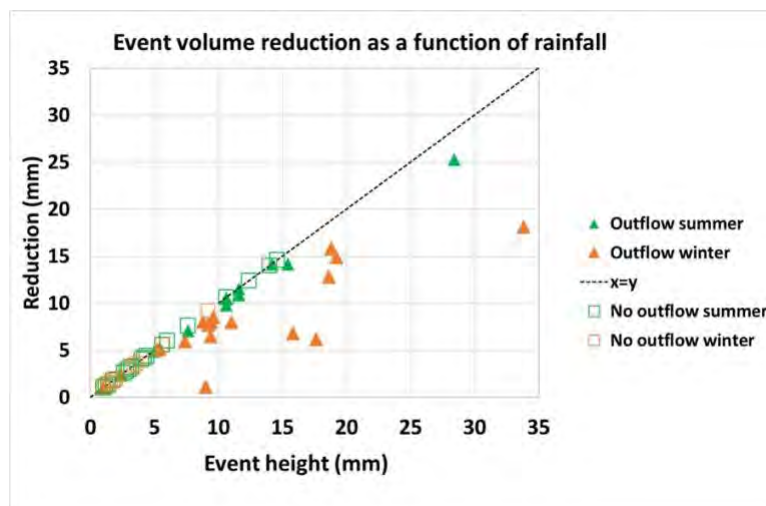


Figure 2: Abattement de volume événementiel

La réduction du volume à l'échelle de l'événement varie entre 12 % et 100 % avec une moyenne de 90 %, ce qui illustre la grande capacité de la technique à réduire le volume. Pour tous les événements, la réduction n'a pas dépassé 25 mm pour les événements d'écoulement. Les événements sans drainage se trouvent sur la ligne $x=y$. On constate que pour des précipitations inférieures à 10 mm, les valeurs de réduction de volume sont proches de la ligne $y=x$. La majorité des événements (65%) avec un volume drainé se produisent pendant l'hiver. Ces taux sont obtenus pour un ratio de surface de 6,4 % (surface d'infiltration par rapport à la surface d'apport). A l'échelle de l'ensemble de la période d'étude, la réduction du volume par rapport au total entrant est attribuée pour 53% à l'exfiltration, pour 27% à la transpiration des arbres et au drainage de 18%. La variation du stock est quasi nulle sur la période (ZIME YERIMA et al., 2023). A titre de comparaison, les résultats de (Gray et al., 2018) ont montré une réduction de 90% du ruissellement annuel à partir d'arbres de pluie sur des surfaces d'apport allant de 100 à 480m² pour des ratios infiltration/surface de bassin versant allant de 2,5 à 8%.

Les résultats ont montré que la majorité des événements pluvieux pouvait être entièrement gérée par les arbres de pluie, 42% des événements ont généré 19% du volume total, le plus souvent en hiver. Le volume drainé est fortement influencé par la saison mais aussi par la durée des périodes sèches entre les événements. Le taux de réduction annuel a été évalué à 90% pour un ratio de surface de 6,4, un taux assez significatif malgré la nature argileuse du sol avec une faible infiltration sur notre site. Les volumes collectés dépendent principalement de la pluviométrie mais aussi de la surface de collecte et de la nature du sous-sol. Il est donc important d'avoir un rapport de surface optimal pour éviter des durées de saturation trop longues qui pourraient être préjudiciables à l'arbre. Les travaux futurs, dans le but d'améliorer la conception des arbres pluviaux, consisteront à estimer un ratio optimal à la fois pour la récupération des eaux de pluie et pour les besoins de l'arbre, qui dépendront également de la nature du sol de plantation ou de l'efficacité d'abattement souhaitée.

MOTS CLES

Ouvrages de gestion à la source, Eaux pluviales ; Ruissellement urbain ; Arbre de pluie.

RÉFÉRENCES

- Berland, A., Shiflett, S. A., Shuster, W. D., Garmestani, A. S., Goddard, H. C., Herrmann, D. L., & Hopton, M. E. (2017). The role of trees in urban stormwater management. *Landscape and Urban Planning*, 162, 167-177. <https://doi.org/10.1016/j.landurbplan.2017.02.017>
- EPA. (2012). *Stormwater to Street Trees Engineering Urban Forests for Stormwater Management* (EPA 841 B 13 001 /epa_p100h2rq.pdf; Numéro EPA 841 B 13 001 /epa_p100h2rq.pdf).
- Geronimo, F. K. F., Maniquiz-Redillas, M. C., & Kim, L.-H. (2013). Treatment of parking lot runoff by a tree box filter. *Desalination and Water Treatment*, 51(19-21), 4044-4049. <https://doi.org/10.1080/19443994.2013.781099>
- Gray, V., Livesley, S. J., Fletcher, T. D., & Szota, C. (2018). Tree pits to help mitigate runoff in dense urban areas. *Journal of Hydrology*, 565, 400-410. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.08.038>
- IBGE. (2014). *LES ARBRES DE PLUIE*. https://environnement.brussels/sites/default/files/user_files/geq08_arbrespluie.pdf
- IFSTTAR. (2019). *Sense-City*. Sense-City. <https://sense-city.ifsttar.fr/>
- Jouin, C., & Mlocek, Z. (2020). Évolutions des techniques alternatives de gestion des eaux pluviales : L'exemple de trois projets à Villeneuve-la-Garenne. *Techniques Sciences Méthodes*, 3, 61-70. <https://doi.org/10.36904/tsm/202003061>
- ZIME YERIMA, H. Z., Seidl, M., Gromaire, M.-C., Bensaoud, A., & Berthier, E. (2023, juillet 3). *Potential of « stormwater trees » for sustainable urban runoff management: Overall assessment of an experimental device within SenseCity*. Novatech 2023. <https://enpc.hal.science/hal-04083207>

TITRE : Modélisation du micro-climat appliqué à l'agrivoltaïsme

AUTEURS

Joseph VERNIER, Mike VAN ISEGHEM, Didier COMBES, Patrick MASSIN

LABORATOIRE

Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement et Atmosphérique (CEREA), École des Ponts ParisTech

RÉSUMÉ

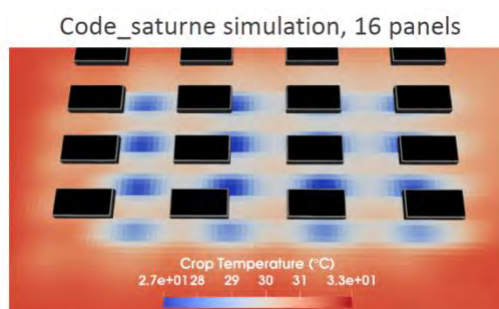
Le climat change, les épisodes de températures extrêmes se font de plus en plus fréquents, et la demande en énergie ne fait qu'augmenter. Il est donc nécessaire de changer notre façon de produire de l'énergie et de la nourriture. L'agrivoltaïsme est la combinaison entre la production électrique par panneaux photovoltaïques ainsi que la production agricole, le tout sur une même surface. Plusieurs études ont montré que le statut hydrique et le statut thermique des plantes sont modifiés sous les panneaux photovoltaïques (H. Marrou, et al., 2013). Par conséquent, le rendement est modifié (S. Edouard, et al., 2022), dans certains cas une baisse de rendement est observée. Dans d'autres cas, le rendement est amélioré car le système agrivoltaïque protège la culture d'évènements météorologiques extrêmes. La prédiction de l'impact des systèmes agrivoltaïques sur les cultures est donc primordiale.

Jusqu'à maintenant, les modèles de cultures classiques (tels que DSSAT ou STICS) ne prennent pas en compte les variations spatiales du micro-climat (rayonnement solaire et thermique, vent, température et humidité de l'air). De plus, ces modèles fonctionnent au pas de temps journalier ce qui masque l'impact des panneaux photovoltaïques sur le micro-climat. Des modèles plus précis, type "Functional-Structural Plant Model" (R. Barillot, et al., 2016), existent. Cependant, ces modèles représentent précisément l'architecture de la culture végétale ce qui rend impossible une étude à grande échelle. Cette thèse a pour objectif de développer un modèle pour simuler des micro-climats complexes, à l'échelle de démonstrateurs agrivoltaïques, pour déduire l'impact de l'agrivoltaïsme sur les cultures à l'échelle de quelques jours.

La CFD (Computational Fluid Dynamique) est la résolution numérique des équations de Navier-Stokes. Elle permet notamment de simuler les échanges d'énergie et de matières dans des cas atmosphériques (E. Bouzereau, 2004). Le solveur code_saturne est un code de CFD hautement parallèle développé en grande partie par EDF et le CEREA. Couplé à un modèle de rayonnement 3D, ce code permet de prendre en compte la présence de panneaux photovoltaïques. Afin d'en déduire l'impact sur les cultures, le modèle SPAC (Soil/Plant/Atmosphere Continuum, A. Tuzet, et al., 2003) y est implémenté. Ce modèle ne représente pas explicitement la culture végétale. De plus, son pas de temps variable permet un couplage simple et efficace avec code_saturne. L'utilisation de code_saturne, d'un modèle 3D de rayonnement, et du modèle SPAC permet d'étudier la modification du micro-climat par un système agrivoltaïque et d'en déduire les conséquences sur la culture.

MOTS CLES

Agrivoltaïsme, Modélisation, Mécanique Des Fluides, Rayonnement, Plantes



TITLE: Subgrid-scale modeling for large-eddy simulations (LES) that preserve the symmetries of the Navier-Stokes equations

AUTHORS

Nadjma AKHAL, Can SELÇUK, Benoît TROUETTE, Stéphane VINCENT

LABORATORY

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Échelle (MSME) UMR 8208

ABSTRACT

Turbulence is a phenomenon characterized by random behavior in both time and space, where different spatiotemporal scales coexist. It is ubiquitous in nature: the breaking of waves, the flow of rivers, the transport of pollutants in the atmosphere... as well as in a variety of industrial fields: nuclear, chemical, oceanographic, aerospace, medical, and hydraulics. For example, in hydraulics, the flow at the outlet of a dam spillway is carried by a channel along which a turbulent boundary layer develops. When the velocities of the turbulent fluctuations near the free surface are large enough to overcome surface tension and buoyancy, the water surface breaks. Bubbles and air pockets are then entrained, resulting in a flow that is both two-phase and turbulent. For a proper understanding of natural phenomena and to ensure optimal design and functioning of numerous industrial processes, it is crucial to study this physical phenomenon.

To achieve this, we use certain numerical approaches that are less costly and much more practical than the experimental approach. One of the numerical simulation approaches for turbulent flows that our present work will focus on is Large Eddy Simulation (LES). This approach is based on the separation of spatial scales by a low-pass filter in frequency. As a result, the large scales are resolved on a finite-sized numerical grid, while the contributions of the small scales are modeled using a subgrid-scale model.

For single-phase flows, a wide range of subgrid models is presented in the literature, based on various mathematical and physical considerations. However, given the diversity of subgrid models, stating that a model is good comes down to defining the requirements for its construction. Among the important requirements that models must meet is the preservation of the symmetries of the Navier-Stokes equations. Yet, most of these models do not respect this requirement.

These symmetries are transformations that leave the governing equations of the flow invariant (unchanged). Examples of such transformations include time translation, rotation, scaling, and various other symmetries. These symmetries can be derived using an algorithmic procedure based on Lie theory. It is important that subgrid models do not break these symmetries since they contain the fundamental elements associated with the physical phenomena governed by the differential equations of the flow: conservation laws, scaling laws, etc.

A set of symmetry-preserving models has been proposed by [1],[2]. As a first starting point, one of these models was tested on a case of natural convection in a cavity using the MSME laboratory's in house code. The first observation that can be deduced is that the results obtained correspond well to the reference results; however, they also match the case without a model. On this fact and in order to evaluate the performance of these models, an a priori analysis will be conducted using finely resolved DNS data. We consider in this study the turbulent natural convection in a square cavity [3], driven by a Rayleigh number of $Ra = 1.5 \times 10^9$.

KEY WORDS

Turbulence, Large Eddy Simulation, subgrid-scale modeling, Symmetries of the Navier-Stokes equations

REFERENCES

- [1] Razafindralandy, D. (2005). *Contribution à l'étude mathématique et numérique de la simulation des grandes échelles* (Doctoral dissertation, Université de La Rochelle).
- [2] Al Sayed, N. (2011). *Modèles LES invariants par groupes de symétries en écoulements turbulents anisothermes* (Doctoral dissertation, Université de La Rochelle).
- [3] Salat, J., Xin, S., Joubert, P., Sergent, A., Penot, F., & Le Quere, P. (2004). Experimental and numerical investigation of turbulent natural convection in a large air-filled cavity. *International journal of heat and fluid flow*, 25(5), 824-83.

TITRE : Étude du comportement physico-chimique et mécanique des graveleux latéritiques traités à l'émulsion de bitume

AUTEUR

Zinisom Giovanni KABORÉ

LABORATOIRE

Laboratoire Géotechnique, Environnement, Risques naturels et Sciences de la Terre – Sols, Roches et Ouvrages Géotechniques (GERS-SRO)

RÉSUMÉ

Les latérites sont des sols formés par altération de roches sous l'action du climat. Elles sont riches en oxydes d'aluminium (Al_2O_3), de fer (Fe_2O_3), et de silicium (SiO_2) et sont majoritairement constituées de quartz, d'hématite, de goethite, de gibbsite et de kaolinite. Les latérites sont abondantes dans les régions tropicales. Les formes graveleuses des latérites, dont 60% ont un diamètre supérieur à 2 mm, sont utilisées dans la construction routière en couche de fondation, de base et de forme. Face à la rareté des graveleux latéritiques de bonne qualité, et dans une perspective de réduction de l'impact environnemental dans le secteur des travaux publics, la thèse vise à améliorer les caractéristiques mécaniques des graveleux latéritiques par ajout d'émulsion de bitume.

Une émulsion de bitume, très souvent acide, est une dispersion de fines gouttelettes de bitume dans une phase aqueuse contenant un tensioactif. Lors du mélange émulsion-latérite, la réactivité de la latérite en milieu acide et son affinité avec le tensioactif de l'émulsion (capacité d'adsorption du tensioactif à la surface de la latérite) peuvent engendrer la rupture de l'émulsion, c'est-à-dire une séparation entre la phase aqueuse et le bitume. Celle-ci se traduit par une diminution de la maniabilité et une augmentation de la cohésion du mélange. La connaissance des propriétés physico-chimiques et mécaniques du graveleux latéritique est donc primordiale pour la prédiction du comportement du mélange latérite-émulsion. Cependant, ces aspects physico-chimiques associant la latérite à l'émulsion de bitume ne sont pas traités dans la littérature, ce qui justifie le travail réalisé dans cette thèse.

Ainsi, dix graveleux latéritiques ont été caractérisés d'un point de vue géotechnique (analyse granulométrique, masse volumique, valeur au bleu de méthylène, limites d'Atterberg), chimique (fluorescence X) et structural (diffraction des rayons X). Ils ont aussi fait l'objet d'une caractérisation physico-chimique via les essais de remontée de pH afin d'évaluer leur réactivité chimique en milieu acide et observer leur éventuelle dissolution.

Les résultats de la caractérisation montrent que les dix latérites étudiées appartiennent à la famille des sols limoneux ou argileux et sableux. Elles se répartissent selon la classification chimique en latérites ferralitiques ($\% \text{SiO}_2 < 50\%$) pour certaines et en latérites ferrugineuses ($\% \text{SiO}_2 > 50\%$) selon leur histoire géologique. Nombre de corrélations entre paramètres de caractérisation ont été mises en évidence. Par exemple, la masse volumique réelle des latérites (mesurée à l'aide d'une méthode simple) diminue avec la teneur en oxyde de silicium et augmente avec la teneur en oxyde de fer (mesure chimique plus complexe et moins accessible sur chantier). La densité est donc un bon paramètre pour prédire d'une certaine manière la composition minéralogique et le comportement des latérites. De plus, la caractérisation géotechnique réalisée au cours de cette première année de thèse a montré que ces latérites sont traitables à l'émulsion de bitume pour un usage en couche de fondation et/ou de base dans la construction routière, sur la base des résultats granulométriques et de limites d'Atterberg. Cependant, les latérites dans un milieu acide à pH 2 montrent une remontée de pH faible, ce qui indique que cet effet pH n'est pas le processus régissant la rupture de l'émulsion. Autrement dit, les effets des réactions acido-basiques entre les latérites étudiées et l'émulsion sont négligeables. Ce premier résultat suggère qu'une autre explication doit être trouvée au comportement spécifique des latérites.

MOTS CLES

Latérite, Emulsion de Bitume, Limites d'Atterberg, Valeur au Bleu de Méthylène, Surface spécifique, Remontée de pH.

TITRE : Modèle numérique pour l'analyse de la rupture des panneaux de bois lamellé croisé.

AUTEUR

Gaspard BLONDET

LABORATOIRE

Laboratoire Navier (UMR 8205)

RÉSUMÉ

Les panneaux de bois lamellés croisés (en anglais Cross Laminated Timber, CLT) sont des produits dérivés du bois, utilisés de plus en plus en construction, notamment pour des projets de grandes hauteurs. Il s'agit d'un assemblage de plusieurs couches de planches de bois collées entre elles, en croisant le sens des fibres entre les couches. Cela permet au panneau de supporter des charges en flexion dans les deux directions (par exemple lorsque le panneau est utilisé en tant que plancher) et des charges dans le plan du panneau (par exemple lorsqu'il est utilisé en tant que mur).

Cependant, le calcul des capacités portantes d'un CLT reste un sujet de recherche, comme le souligne de récentes études [1]. Un des axes majeurs consiste à établir un lien compréhensible entre les propriétés des matériaux constitutifs (les planches de bois) et les propriétés de la structure (un panneau de CLT). Le bois est par essence un matériau très variable, en ajoutant la complexité liée à l'arrangement orthogonal des couches, il en résulte qu'obtenir des valeurs de propriétés mécaniques de CLT nécessite de nombreux essais expérimentaux, ce qui est coûteux.

Pour répondre à ce besoin, ce travail propose un modèle numérique efficace. Efficace car plutôt que d'utiliser un modèle de CLT en trois dimensions, nous choisissons un modèle de comportement en deux dimensions, ce qui réduit le coût numérique. Ce modèle reste précis aux niveaux des contraintes dans le CLT, particulièrement au niveau des interfaces entre les couches, ce qui permet de bien capter les phénomènes de fissuration par délaminage [2]. Pour rendre compte de l'apparition de fissures dans le CLT jusqu'à sa rupture complète, des modèles de zones cohésives sont définis aux interfaces, et des modèles d'endommagement à gradient, anisotropiques, sont définis dans les couches. Le logiciel libre FeniCsx est utilisé pour résoudre les problèmes mécaniques avec ce modèle.

Le travail en cours consiste à valider le comportement du modèle sur des mécanismes de rupture isolés, puis il s'agira de calibrer le modèle et de tester ses prédictions vis-à-vis de différents essais expérimentaux de rupture de CLT.

[1] : Cross Laminated Timber (CLT) : overview and development, *Brandner et al.*, 2018

[2] : Continuum damage analysis of delamination in composite laminate using a stress-based layerwise model, *Bouteiller et al.*, 2022

MOTS CLES

Rupture, Bois, Modèle numérique, Matériau de construction

TITLE: Semi-Probabilistic assessment of existing concrete structures under climate change: Application to a cable-stayed bridge.

AUTHORS

Lorenzo CASTI, Franziska SCHMIDT, Fabio BIONDINI, Nisrine MAKHOUL, Romain PITTET

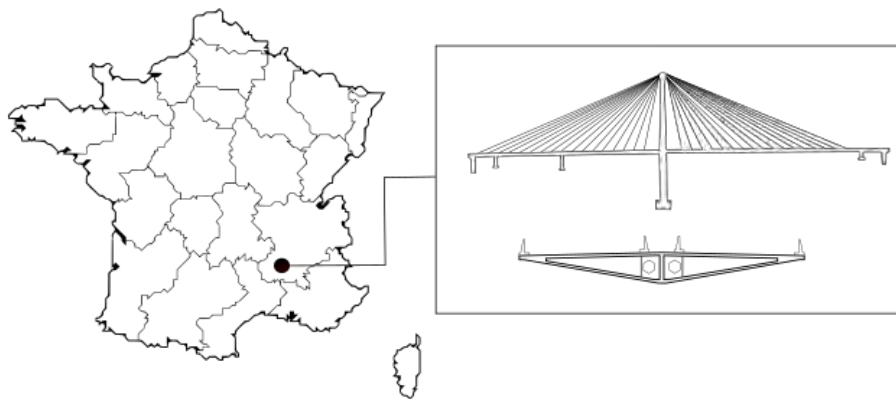
LABORATORY

Laboratoire de Expérimentation et Modélisation du Génie Civil et Urbain (EMGCU), Département MAST

ABSTRACT

Life-cycle assessment of the residual performance of existing structures usually involves a wider spectrum of uncertainties compared to a standard approach for designing new systems. The differences are related to the uncertainties associated with the effects of time-variant aging and deterioration processes, as well as the different lifetime considered in the assessment as in the design stage. Additionally, climate change has a significant impact on this evolution. In order to account for these aspects, full-probabilistic approaches are often exploited for assessing existing structural systems. However, these methodologies are time-consuming and may require significant knowledge and expertise for numerical implementation. Therefore, the development of semi-probabilistic methodologies for existing structures considering the impact of climate change, including proper validation and calibration for incorporation in design codes and standards, is nowadays of essence.

In this poster, the case study of cable-stayed viaduct located in France is presented. Firstly, different methodologies developed for the evaluation of existing structures are presented and applied. Secondly, the minimum and maximum temperatures are evaluated integrating the impact on non-stationarity due to climate change.



The obtained results are eventually compared with the outcomes of the assessment performed according to the original design and the current Eurocodes regulations, with a discussion on the benefits and limits of the presented methodologies.

KEY WORDS

Structural Reliability, Existing Structures, Semi-Probabilistic Approach, Partial Safety Factor, Climatic Actions, Climate Change.

TITRE : Perturbation endocrinienne chez *Daphnia magna* : étude d'un polluant pharmaceutique émergent et ses produits de dégradation

AUTEURS

Luna GRIMAULT, Fidji SANDRÉ, Laure GARRIGUE-ANTAR

LABORATOIRE

Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (LEESU)

RÉSUMÉ

L'élimination partielle d'un grand nombre de composés pharmaceutiques par les stations de traitement des eaux usées (STEP), entraîne leur rejet dans l'environnement. C'est le cas du furosémide (FUR), le diurétique de l'anse le plus largement prescrit en Europe depuis 1965, et ses produits de dégradation (PD) dont le pyridinium du furosémide (PYR) et la saluamine (SAL). Ces 3 substances ont récemment été quantifiés dans le milieu aquatique à des concentrations allant de quelques centaines de ng/L en rivière à plusieurs milliers de ng/L dans les eaux usées. La toxicité aiguë du FUR, du PYR et de la SAL à concentrations environnementales a été démontrée chez différents organismes dont *Daphnia magna*. En revanche, il n'existe pas de données sur leur potentiel effet perturbateur endocrinien (PE). Pourtant, le FUR est suspecté par l'ECHA comme présentant une toxicité pour la reproduction et plusieurs études in vitro ont démontré la capacité du FUR à induire une activité œstrogénique anormale. De plus, des modélisations réalisées au laboratoire ont montré que le FUR, le PYR et la SAL, pourraient se fixer sur des récepteurs androgéniques, thyroïdiens et glucocorticoïdiens humains. Deux hormones de *Daphnia magna*, le méthyl farnesoate et la 20-hydroxyecdysone présenteraient une capacité de liaison similaire à ces mêmes récepteurs. Ceci suggère que nos contaminants d'intérêt pourraient avoir un mécanisme d'action semblable à ces deux hormones endogènes de *Daphnia magna*. Ces dernières sont responsables de processus physiologiques majeurs, dont la croissance, la reproduction et la détermination du sexe, qui pourraient être compromis par l'action du FUR et de ses PDs.

Des modélisations grâce au logiciel Autodock ont permis d'étudier la capacité de fixation de FUR, PYR et SAL sur les récepteurs du méthyl farnesoate et de la 20-hydroxyecdysone de *Daphnia magna*. En effet, des résultats préliminaires avaient suggéré l'existence possible d'impact du PYR sur la reproduction de *Daphnia magna*, à la suite d'une exposition à 200 et 2000 ng/L.

L'objectif principal de cette étude est de confirmer ces tendances en caractérisant la perturbation endocrinienne du FUR et de ses PDs à la suite d'une exposition chronique à concentration environnementale (200 ng/L).

Une exposition chronique de 21 jours de nos 3 contaminants est en cours. Les principaux paramètres suivis seront la fréquence de ponte, le nombre d'individus par ponte, et la taille du corps et des antennes des individus adultes à la fin des 21 jours d'exposition. La stabilité de nos composés d'étude étant encore peu connue, leur dégradation a également été analysée par HPLC-UV dans nos conditions expérimentales. Cette étude sera complétée par une analyse de la mobilité et de la neurotoxicité à la fin de l'exposition. Etant donné le caractère ubiquitaire de ces polluants dans l'environnement, ils pourraient avoir des impacts délétères sur les niveaux trophiques supérieurs.

MOTS CLES

Médicaments, produits de dégradation, écotoxicité, perturbation endocrinienne, HPLC-UV, daphnie

TITLE: Surrogate models for atmospheric dispersion in built-up areas

AUTHORS

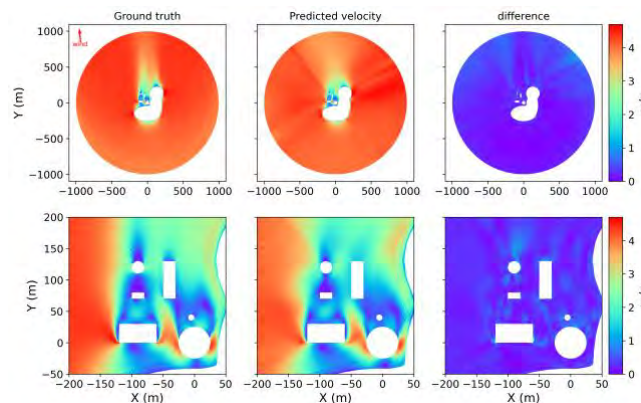
Armand de VILLEROCHÉ (EDF R&D et CERE), Patrick MASSIN (CERE), Rem-Sophia MOURADI (CERE), Vincent LE GUEN (EDF R&D), Marc BOCQUET (CERE), Alban FARCHI (CERE), Sibongwe CHENG (CERE), Patrick ARMAND (CEA-DAM)

LABORATORY

Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement et Atmosphérique (CERE),

ABSTRACT

Studies of atmospheric dispersion of pollutants on a local scale are increasingly performed with Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations. However, CFD computations can be numerically expensive, and are often only performed on a limited number of cases. Machine Learning (ML) approaches offer a promising potential to build meta-models, i.e. approximations to the CFD solver, for faster results, allowing to simulate cases not present in the initial CFD-generated database. Here, a Multi-Layer Perceptron (MLP) is trained on CFD simulation results with varying wind directions. The MLP model can predict accurately the wakes near the buildings but has trouble predicting the correct wakes further downstream. Furthermore, knowledge of the continuity equation is embedded into the network via an additional loss term. This allows to slightly improve the surrogate model's accuracy.



Left: Ground truth CFD data for a test case. Middle: MLP prediction for this case. Right: difference between the two fields.

KEY WORDS

Computational Fluid Dynamics, Deep Learning, Physics-Informed Neural Networks, Graph Neural Networks, Atmospheric Dispersion

REFERENCES

- [1] F. Archambeau, N. Méchitoua, and M. Sakiz. Code saturne: A finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows-industrial applications. *International Journal on Finite Volumes*, 1 (1), 2004.
- [2] Maziar Raissi, Paris Perdikaris, and George E Karniadakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational physics*, 378:686–707, 2019. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>.
- [3] Joseph C Chang and Steven R Hanna. Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 87(1-3):167–196, 2004.

TITLE: Gelatin-based Electrospun Mats Loaded with Hydrophobic Molecule for Biomedical Purpose

AUTHORS

Laura LARUE (laura.larue@u-pec.fr), Dr. Sabrina BELBEKHOUCHE

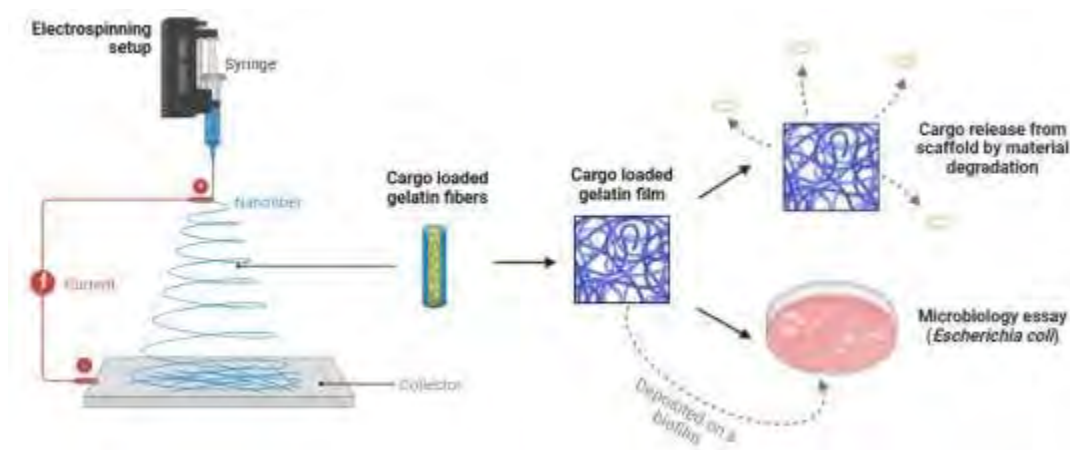
LABORATORY

Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) UMR 7182

ABSTRACT

Antimicrobial resistance is a growing global threat [1]. Infection with antibiotic-resistant bacteria could lead to almost 10 million deaths worldwide by 2050 according to the O'Neill report [2]. As antibiotic-resistant infections in various types of wound have increased, research has accelerated into the development of new antibacterial therapies. In this context, gelatin fibers as a support for the administration of antibiotics has been prepared by electrospinning process (figure 1). We demonstrate that the designed gelatin fibers could be efficiently loaded with hydrophobic cargo (NileRed which is a probe loaded first for the proof-of-concept and then a hydrophobic antibiotic with similar low solubility in aqueous media, namely the ciprofloxacin) [3]. Scanning electron microscopy (SEM) analysis revealed the morphology of the electrospun fibers, with straight, random orientations of entangled fibers with no beads present and diameters between 100 and 300 nm. The incorporation of NileRed into the gelatin fibers was demonstrated by high fluorescence intensity using fluorescence microscopy and by Fourier Transform InfraRed spectroscopy. Differential scanning calorimetry measurements indicated that gelatin-based fibers may have undergone renaturation after electrospinning. The presence of hydrophobic cargo enhanced the mechanical properties of gelatin fibers by improving the mechanical performance of gelatin nanofibers in terms of elasticity and rigidity, as demonstrated by dynamic mechanical analysis measurements. Subsequently, electrospun mats loaded with ciprofloxacin were developed to analyse their antibacterial activity against spectinomycin-resistant *E. coli*. The morphology of the fibers was preserved and the incorporation of the antibiotic was demonstrated by EDX analysis. The *in vitro* antibacterial assay against spectinomycin-resistant *Escherichia coli* showed that the ciprofloxacin-loaded gelatin fibers eliminated and prevented the growth of *E. coli*, with a release rate of the ciprofloxacin as early as 20 minutes at 37°C and pH 7.4 for up to 72 hours. These results demonstrated the potential of the engineered fiber to be used as an antimicrobial material for the prevention and treatment of wound infections, particularly those resistant to antibiotic therapy.

Figure 1: Fabrication of hydrophobic antibiotic-loaded gelatin fibers for biomedical purposes



KEY WORDS

gelatin fibers, hydrophobic, antimicrobial resistance, electrospun mats

REFERENCES

- [1] J. Acar and G. Moulin, Rev Sci Tech, 2012, 31, 23-31.
- [2] J. O'Neill, Rev. Antimicrob. Resist., 2014
- [3] Larue. L et al., Material Advances, 2024,5, 2088-2097

TITLE: *In situ* generated glutaconaldehyde as an efficient reagent for the preparation of pyridiniums

AUTHORS

Rammiya RAMANATHAN, Louis-Antoine BAREL, Joana Filomena CAMPOS, Ghada ASSKAR and Michaël RIVARD

LABORATORY

Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) UMR 7182

e-mail : rammiya.ramanathan@cnrs.fr

ABSTRACT

Pyridiniums are 6-membered cationic nitrogenated heterocycles that can be found in both natural- and synthetic-compounds. The multiple properties associated with these structures make them usable in materials science or for the synthesis of compounds of biological interest.¹ Pyridiniums can also be used as building blocks for the preparation of nitrogenated structures. Among them, piperidines are readily available after reduction of the heterocycle (Figure 1a).

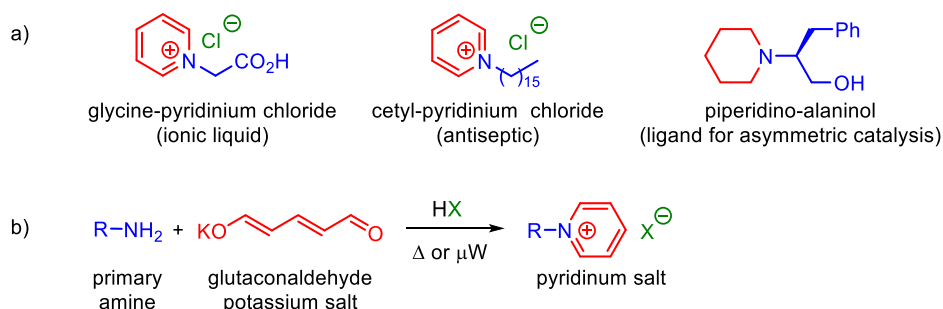


Figure 1. a) valorization of pyridiniums and derivatives. b) preparation of pyridiniums from primary amines by action of *in situ* generated glutaconaldehyde.

Recently, we demonstrated that pyridiniums are readily obtained by treating primary amines with glutaconaldehyde (Figure 1b). Although highly unstable and prompt to polymerize,² we showed that glutaconaldehyde can be effectively used as a reagent when *in situ* generated from its potassium salt in an acidic medium. Applied to anilines and heteroaromatic derivatives, this method yielded the expected pyridiniums in satisfactory yields (40-100%).³

The transformation of amino acids into their corresponding pyridiniums has already been reported.⁴ However, this reaction is associated with poor conversions, decarboxylation, or racemization. In this context, the poster will present the experimental conditions allowing the efficient transformation of amino acids into their corresponding pyridiniums.

KEY WORDS

Pyridiniums, Glutaconaldehyde potassium salt and amino acids

¹ (a) Han Z. *et al.*, *ACS Cent. Sci.* **2017**, 3, 853. (b) Chen S. *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 11312. (c) Chen S. *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 11312. (d) van der Aa L. J. *et al.*, *J. Controlled Release* **2014**, 195, 11.

² (a) Becher J. *Synthesis* **1980**, 8, 589. (b) Klages F. *et al.*, *Chem. Ber.* **1953**, 86 (10), 1327. (c) Becher J. *et al.*, *Tetrahedron* **1979**, 35 (12), 1523. (d) Becher J. *et al.*, *Acta Chem. Scand.* **1975**, B 29 (1), 124. (e) Sanchez-Salvatori M. *et al.*, *Tetrahedron Lett.* **2006**, 47 (31), 5503.

³ Asskar G. *et al.* *J. Org. Chem.*, **2020**, 85, 1232.

⁴ Nguyen T. M. *et al.* *J. Org. Chem.*, **2007**, 72 (15), 5916.

TITLE: Multifractal analysis of $C2nCn2$ scintillometer data and consequences for evapotranspiration estimates in urban areas

AUTHORS

Sitian ZHU, Auguste GIRES, Cedo MAKSIMOVIC, Ioulia TCHIGUIRINSKAIA, and Daniel SCHERTZER

LABORATORY

Laboratoire de Hydrologie Météorologie et Complexité (HM&Co)

ABSTRACT

The cooling efficacy of green roofs in mitigating the urban heat island (UHI) effect within dense cities is largely attributed to evapotranspiration (ET) processes. Hence, accurate understanding and quantification of ET are crucial for optimizing this cooling effect. ET estimation can be achieved either directly (weighing lysimeters) or indirectly (e.g., Penman-Monteith equation). Micro-meteorological approaches have been developed in recent years. Among which scintillometer can evaluate ET by its measurement parameter $C2nCn2$ which corresponds to the fluctuations of air refractive index n in combination with surface energy balance (SEB) and Monin-Obukhov similarity theory (MOST). Hence, improvement in $C2nCn2$ data as well as understanding of its variability across wide range of space-time scale would result in better ET estimation and ultimately optimization. Yet it is often overlooked, and little research has focused on it and notably its variability.

This study explores the ET estimation on a wavy and vegetated green roof covering an area of 1 ha, known as the Blue Green Wave (BGW), which is located in Ecole des Ponts Paristech campus. Data from a large aperture scintillometer (LAS) with 10-minute time step during December 2019 and January 2020 on BGW is used in this study. $C2nCn2$ data variability across scales was analysed with the help of structure function and Universal Multifractal model (UM). The UM framework, widely employed for characterizing and simulating geophysical fields extremely variable across wide range of space-time scales, relies on two parameters with physical interpretation: the mean intermittency codimension $C1 \geq 0$ and multifractality index $0 \leq \alpha \leq 2$. An additional one, which is needed for non-conservative fields such as ET is the non-conservativeness parameter H .

Both structure function and UM approach reveal a good scaling behaviour on scales ranging from 10 min to 2h, confirming the relevance of the framework and demonstrating the potential for upscaling and downscaling. UM analysis conducted through the Trace Moment (TM) method and Double Trace Moment (DTM) method, provided similar values for UM parameters around $C1 = 0.1$, $\alpha = 1.8$. H is approximately 0.44 in our case, which deviates from traditional scaling laws due to the intricate composition of the fluxes and requires further investigations. Indeed,

$C2nCn2$

is influenced by temperature, humidity, air pressure and wind speed. In order to interpret properly structure function analysis from UM analysis, it is necessary to introduce an additional parameter denoted a . It corresponds to the power to which the assumed conservative underlying field should be raised before fractional integration to account for non-conservativeness to retrieve the studied field. Here, through data analysis, we observed that a is around 0.73 to ensure the highest consistency of the outcome from both the structure function and UM analyses. A better understanding of the underlying complexity and variability of

$C2nCn2$

is achieved by our analysis. This, in turn, improves our understanding of the underlying physical processes generating variability and temporal-spatial dynamics in ET, which paves the way for future applications.

KEY WORDS

Scintillometer measurement parameter $C2n$; Structure function; Universal Multifractal; ET.

TITLE: MatAIRials: Inflatable Metamaterials for Freeform Surface Design

AUTHORS

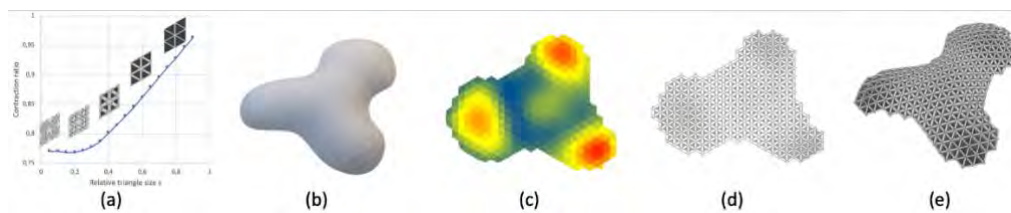
Siyuan HE, Arthur LEBEE, Mélina SKOURAS

LABORATORY

Laboratoire Navier (UMR 8205)

ABSTRACT

Inflatable structures are widespread in human society. Their lightweight, fabricability, and simplicity of deployment make them ideal for diverse applications across different scales, for example, soft robotics, medical equipment, and large-span buildings. Although the associated manufacturing techniques are well known, scientific challenges in design and material modeling still exist, piquing the curiosity of mechanics, physicists, and computer scientists. We introduce a family of periodic inflatable structures composed of welded planar membranes. The welding patterns, being either sealed curves or welded areas repeated and arranged in two-dimensional space, result in complex three-dimensional shape morphing of membranes and structures. We investigate the periodic inflatable pads as architected materials in the finite transformation regime and extract the overall mechanical properties of the representative volume elements through nonlinear homogenization. We develop a simulation-based approach to systematically identify the mapping between the auto-contraction effect and the patterns' geometric parameters for programming the necessary metric frustration. Having found an isotropic pattern parameterization after parametric studies, we build an efficient inverse design approach based on a surface flattening technique for determining per unit cell the desired pattern generating expected metric distortion. The full-scale simulation and fabricated models covering a large range of non-developable surfaces demonstrate the precision and effectiveness of our surface design methodology.



KEY WORDS

Inflatable Metamaterials, Numerical Homogenization, Computational Design.

TITLE: Cerium Oxide Particles: Coating with Dextran Derivative and Drug Loading for Biomedical Application

AUTHORS

Cléa CHESNEAU (clea.chesneau@cnr.fr), Sabrina BELBEKHOUCHE

LABORATORY

Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) UMR 7182

ABSTRACT

Some drugs as antibiotics have the particularity of being poorly stable and soluble in water, reducing their therapeutic effect. It is necessary to develop vectors allowing their efficient administration [1]. Delivery systems using particles are possible to encapsulate an antibiotic, control its release and have a greater effect on bacterial cells [2]. Cerium oxide particles are an example of particles possessing interesting physicochemical and biological properties, notably antioxidant and antibacterial properties. On the other hand, they have the drawback of being unstable and aggregated in an aqueous environment. It is in this sense that we took advantage of their ability to be positively or negatively charged depending on the pH in order to modify the surface of the particles with a charged polysaccharide limiting the aggregation of the particles in water (Figure 1). Polysaccharides are promising biopolymers because of their weak toxicity and their biocompatibility. Additionally, dextran sulfate was chosen due to its ability to retain its charge over a wide pH range. Indeed, we showed a significant reduction in the size and dispersity of the particles in the presence of dextran sulfate and an improvement in the colloidal stability of the particles over the entire pH range [3]. The advantage of these particles is the possibility of loading an antibiotic that is poorly soluble in water (Figure 1), such as ciprofloxacin classically used in the treatment of numerous bacterial infections. We showed the inhibition of bacterial growth of antibiotic-resistant bacteria (spectinomycin-resistant *Escherichia coli*) with cerium oxide particles coated with dextran sulfate and loading ciprofloxacin.

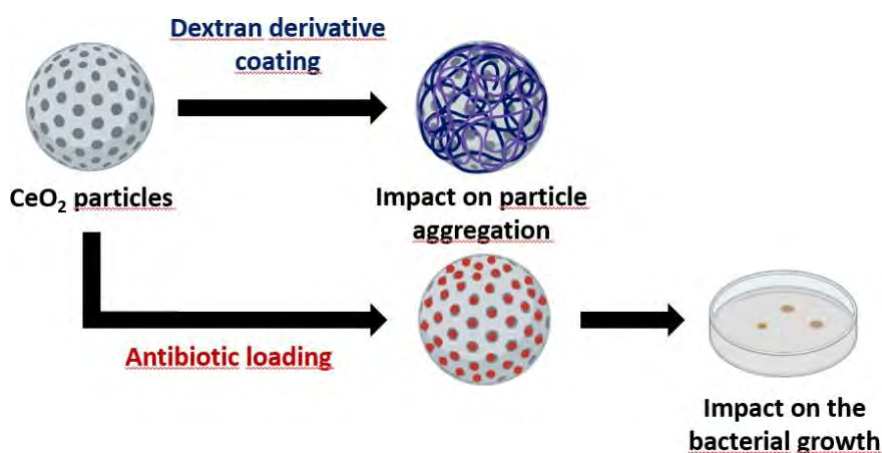


Figure 1. Scheme showing cerium oxide particles loaded with antibiotic and coated with dextran derivative.

KEY WORDS

Cerium oxide particles, Dextran derivative, Drug loading, Antibacterial application

REFERENCES

- [1] Wang, L., C. Hu, and L. Shao, *The antimicrobial activity of nanoparticles: present situation and prospects for the future. International journal of nanomedicine*, 2017. **12**: p. 1227.
- [2] Pelgrift, R.Y. and A.J. Friedman, *Nanotechnology as a therapeutic tool to combat microbial resistance. Adv Drug Deliv Rev*, 2013. **65**(13-14): p. 1803-15.
- [3] Chesneau et al. *RSC Pharm.*, 2024, 1, 98-107

TITRE : Électrification de la pyrolyse de la biomasse pour la production d'énergie

AUTEURS

Abderraouf ADJIZI, Amine CHADIL, Isabelle NAVIZET, Enrica MASI, Ali OZEL, JAMAL CHAOUKI.

LABORATOIRE

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Échelle (MSME)

RÉSUMÉ

Une part importante des émissions de gaz à effet de serre provient de l'industrie et du secteur de production d'énergie. Pour atteindre la neutralité carbone d'ici 2050, fixée par les accords de Paris, il est primordial de décarboner ces secteurs. Cela peut se faire par le remplacement des énergies fossiles polluantes par des énergies vertes ou par la capture des gaz à effet de serre issus des procédés industriels. L'objectif de notre projet est d'optimiser la production de bioénergie tout en réduisant l'empreinte carbone de ses procédés de production. Dans cette étude, nous nous concentrons sur la production de bioénergie à partir de la biomasse. La technique de pyrolyse assistée par la technologie du lit fluidisé a été choisie pour la valorisation thermochimique de la biomasse. La pyrolyse de la biomasse consiste à chauffer les déchets issus de la biomasse à haute température, en l'absence d'oxygène, ce qui permet de produire du biochar, des biohuiles et des gaz synthétiques. L'avantage du procédé de lit fluidisé réside dans l'amélioration des transferts de chaleur et de masse entre les particules de biomasse et le gaz, permettant ainsi une pyrolyse rapide et homogène. Les méthodes traditionnelles utilisent la combustion de gaz naturel pour chauffer le gaz fluidisant, mais cela entraîne des problèmes environnementaux et un rendement énergétique moyen. De plus, l'utilisation de gaz chaud présente des défis en termes de séparation des produits et de transfert de chaleur efficace vers les particules de biomasse.

Pour répondre à ces inconvénients et participer à la décarbonation du procédé de production de cette énergie verte, nous avons opté pour le chauffage par micro-ondes. Cette solution offre un rendement énergétique amélioré et une sélectivité accrue. Elle permet d'éviter les inconvénients du chauffage conventionnel, réduisant ainsi considérablement l'empreinte carbone du procédé. De plus, si l'énergie utilisée pour générer les micro-ondes est renouvelable, le procédé peut contribuer à résoudre le problème de l'intermittence des sources d'énergie renouvelable en permettant le stockage chimique de l'excédent d'électricité généré. L'électrification de ce procédé nécessite de s'appuyer sur des simulations numériques tridimensionnelles et instationnaires. L'approche numérique Euler-Euler, basée sur le modèle à deux fluides, s'avère être la plus fiable et économique pour les régimes denses et sera utilisée dans cette étude avec le code OpenFOAM®. Cette approche permet de surmonter les défis liés à la mise à l'échelle du réacteur à micro-ondes.

L'objectif de cette thèse est d'étudier, par simulation numérique, l'impact de paramètres tels que la température de pyrolyse, la vitesse de fluidisation du lit, le débit et la taille des particules de biomasse, ainsi que leur temps de séjour dans le réacteur, sur le rendement de la pyrolyse de biomasse assistée par chauffage par micro-ondes. Les résultats de cette étude évalueront la quantité et la qualité des produits finaux obtenus. Il sera également nécessaire d'étudier les mécanismes de formation des goudrons, les effets des bulles de gaz et de développer des équations permettant de modéliser les micro-ondes et les écoulements du réacteur. Les simulations numériques permettront de répondre aux questions liées à la mise à l'échelle de ce procédé.

MOTS CLES

Électrification, Biomasse, Pyrolyse, Production d'énergie, Simulation Euler-Euler

TITRE : Comportement du béton armé pour la modélisation et la sûreté des structures de génie civil des ouvrages nucléaires sous sollicitations sismiques

AUTEUR

Giulia D'ORIO

LABORATOIRE

Laboratoire Navier (UMR 8205)

RÉSUMÉ

Dans le cadre des réévaluations de la sûreté des installations de production d'électricité en exploitation et de la conception de nouveaux moyens de production, EDF est amenée à caractériser la tenue mécanique de structures de Génie Civil en béton armé, de grande taille. Il s'agit d'analyser leur capacité de résilience sous l'action en particulier d'événements extrêmes, via la démonstration de marges de conception, par rapport à l'apparition de dégradations dans le béton armé et d'amplifications excessives du mouvement transmis par la structure aux équipements.

Dans ce contexte, notre recherche se concentre sur la création, dans le cadre de la méthode des éléments finis, d'un modèle de plaque multicouche et multi-matériaux conçu pour les structures en BA à grande échelle dans les installations nucléaires. Le modèle vise à refléter les effets de non-linéarité microscopique au niveau macroscopique, en mettant l'accent sur la dissipation d'énergie et les spectres de réponse de la structure. Plus précisément, l'attention est portée sur le comportement de l'interface acier-béton et la manière dont la phénoménologie de cette dernière interagit avec l'endommagement du béton environnant et la plasticité des barres d'armature. Il s'agit d'un aspect essentiel pour bien représenter la redistribution des contraintes et l'équilibre énergétique dans les éléments en BA soumis à des sollicitations sismiques. Un modèle rhéologique simple a été analysé dans diverses conditions de charge (statique, dynamique, monotone et cyclique) afin d'évaluer le rôle des différentes hypothèses de modélisation sur la réponse globale (spectres de réponse, équilibre énergétique) et locale (redistribution des contraintes) [Figure 1].

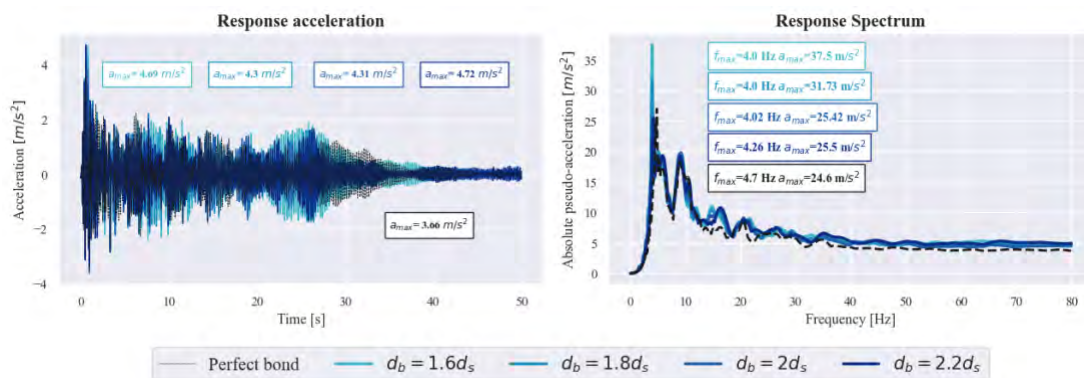


Figure 1: Spectre de réponse du modèle rhéologique pour différentes paramètres de la zone d'interface

Les conclusions de ce modèle guideront les travaux futurs, notamment la création d'une couche de plaque homogénéisée combinant les renforts en acier, le béton et l'interface. En particulier, il sera crucial d'identifier les variables internes microscopiques et les variables macroscopiques correspondantes qui peuvent le mieux représenter les phénomènes d'endommagement, de plasticité et de glissement relatif entre l'acier et le béton.

MOTS CLES

Béton Arme, Endommagement, Modélisation, Charges Cycliques, Séisme

RÉFÉRENCES

- [1] R. Eligehausen, E. P. Popov, V. V. Bertero. "Local bond stressslip relationships of deformed bars under generalized excitations". Earthquake engineering research center (1983).
- [2] G.A. Hegemier, H. Murakami, and L.J. Hageman. "On tension stiffening in reinforced concrete". In: Mechanics of Materials 4.2 (1985), pp. 161–179.
- [3] Ch.Combescure, H.Dumontet, F.Voldoire. Dissipative Homogenised Reinforced Concrete (DHRC) constitutive model dedicated to reinforced concrete plates under seismic loading. International Journal of Solids and Structures, Volume 73–74, November 2015, Pages 78–98.
- [4] E.Lorentz. A nonlocal damage model for plain concrete consistent with cohesive fracture. Int J Fract (2017) 207, Pages 123–159.
- [5] K.Sab. A.Lebée. Homogenization of Heterogeneous Thin and Thick Plates. Wiley-ISTE, 10/2015.

TITLE: TROPOMI Measures Daily 3D Aerosol Distribution: Case Studies and Validation Over the Paris region

AUTHORS

Prem MAHESHWARKAR, Juan CUESTA, Paola FORMENTI, Chenjie YU, Ludovico Di ANTONIO, Claudia Di BIAGIO, Christopher CANTRELL

LABORATORY

Laboratoire Interuniversitaire de Systèmes Atmosphériques (LISA) - UMR 7583

ABSTRACT

Atmospheric aerosols have major impacts on human health, climate and air quality. Monitoring and studying aerosol properties is effectively done with observations derived from satellite remote sensing. However, traditional satellite remote sensing approaches only provides two-dimensional (2D) information about aerosols, which limits our understating of their three-dimensional (3D) distribution and transport in the atmosphere.

In this study, we present new satellite observations of the 3D distribution of anthropogenic and natural atmospheric aerosols at different locations around the world. For this, we use a so-called AEROS5P approach (Lemmouchi et al., 2022) which derives vertical profiles of aerosol extinction for each cloud free TROPospheric Monitoring Instrument (TROPOMI) pixel using hyperspectral top of atmosphere (TOA) reflectance measurements in the visible and near infrared. This method uses a priori knowledge on particle properties, such as their size distribution and refractive index, along with meteorological parameters from meteorological analyses (ECMWF), surface albedo properties, and a unique a priori aerosol vertical profile.

In this study, we present the results from a new multi-type version of the AEROS5P approach for deriving the 3D distribution of several aerosol types, from both anthropogenic and natural origins. This is done by jointly using each TROPOMI spectrum and the co-localised aerosol type derived from the VIIRS aerosol product (derived at practically the same location and within a few minutes with respect to TROPOMI measurements). Then, TROPOMI spectra is processed with AEROS5P with an aerosol model of microphysical and optical properties associated with the aerosol type derived from VIIRS. These aerosol properties models are derived from an AERONET sun photometer inversion climatology. This new multi-aerosol type AEROS5P method is used to study several episodic aerosol pollution events in different parts of the world.

The results from the AEROS5P method were then validated against different independent satellite and in-situ measurements of aerosols taken during the campaign over the Paris region, using the vertical measurement of aerosol distribution from an aircraft. Finally, the sensitivity of AEROS5P retrievals was calculated using the optical properties of aerosols measured during the campaign over the Paris region.

KEY WORDS

Aerosols, Tropomi, 3d, Forest Fire, Urban Pollution

REFERENCE

Lemmouchi, Farouk, et al. "Three-Dimensional Distribution of Biomass Burning Aerosols from Australian Wildfires Observed by TROPOMI Satellite Observations." *Remote Sensing* 14.11 (2022): 2582.

TITRE : Recyclage par voie solide de l'aluminium et la problématique de l'oxydation

AUTEURS

Théo DUCHATEAU^{1,2,*}, Mathilde LAURENT-BROCQ¹, Lola LILENSTEN², Xukai ZHANG^{1,2}, Johannes GEBHARD³, Erman TEKKAYA³

¹CNRS, ICMPE, UMR7182, Univ. Paris-Est Créteil, Thiais F-94320, France

²Chimie ParisTech, CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, PSL University, Paris 75005, France

³Institute of Forming Technology and Lightweight Components, TU Dortmund University, 44227 Dortmund 44227, Germany

LABORATOIRE

Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) UMR 7182

RÉSUMÉ

La production d'aluminium à partir de minerai est très énergivore, le recyclage permet de d'économiser de l'énergie en réutilisant des déchets. Aujourd'hui, le recyclage de l'aluminium se fait par refusion. Après l'étape de fonderie, l'aluminium de corroyage est mis en forme par déformation plastique à chaud ou à froid.

Le procédé de recyclage par voie solide étudié ici exclut la refusion pour réduire la consommation énergétique du recyclage [1]. Le procédé utilisé est en trois étapes : des copeaux industriels sont compactés pour former une billette de copeaux, la billette est chauffée pour atteindre la température de mise en forme et elle est extrudée à chaud (figure). Cependant, dans le cadre du recyclage par voie solide à 550 °C d'un alliage d'aluminium 6060, un réseau d'oxydes de magnésium se forme aux anciens joints de copeaux [2]. Ce réseau est dû à l'oxydation de la surface des copeaux au cours du procédé et entraîne des pertes mécaniques. Dans cette étude, l'objectif est de comprendre les mécanismes d'oxydation de l'alliage AA6060 au cours du procédé pour aider à optimiser les paramètres et réduire l'impact du réseau d'oxydes dans les extrudés recyclés par voie solide.

L'étude se concentre sur le traitement thermique et l'extrusion, les deux étapes responsables de l'oxydation. Deux conditions de traitement thermique sont étudiées, 450 °C et 550 °C pendant 45 min, suivis par une extrusion dans une presse chauffée à 450 °C dans les deux cas. Différentes techniques expérimentales pour quantifier et/ou décrire la nature de l'oxyde sont utilisées en fonction de l'étape du procédé. La concentration d'oxygène est mesurée par fusion réductrice et absorption infrarouge (FRIR) à chaque étape. L'oxydation pendant le traitement thermique est étudiée par analyse thermogravimétrique (ATG) et par spectroscopie photoélectronique X (XPS) pour déterminer la nature et l'épaisseur de la couche d'oxydes. Les extrudés recyclés sont observés par microsonde de Castaing (EPMA) et au microscope électronique à transmission (MET) afin de décrire les dimensions du réseau et celles des oxydes le composant. Ces résultats permettent de quantifier et de décrire précisément l'oxydation pour comprendre les mécanismes d'oxydation à l'œuvre. Pendant le traitement thermique, l'oxyde n'est pas protecteur et la cinétique d'oxydation accélère avec la température. De plus, le MgO apparaît sous forme d'îlots et ne recouvre pas la toute la surface pour des temps de recuit courts. Pendant l'extrusion, l'oxydation est plus rapide et la majorité de l'oxyde se forme à cette étape. La déformation mécanique ou l'augmentation de la pression partielle d'oxygène dans la presse pourraient être responsables de l'importante croissance de l'oxyde en quelque dizaines de seconde.

MOTS CLES

Métallurgie, Aluminium, Recyclage, Extrusion, Oxydation

RÉFÉRENCES

[1] Dufloy, J. R., Tekkaya, A. E., Haase, M., Welo, T., Vanmeensel, K., Kellens, K., Dewulf, W., & Paraskevas, D. (2015). Environmental assessment of solid state recycling routes for aluminium alloys: Can solid state processes significantly reduce the environmental impact of aluminium recycling? *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, 64(1), 37–40.

[2] Laurent-Brocq, M., Lilensten, L., Pinot, C., Schulze, A., Duchaussoy, A., Bourgon, J., Leroy, E., & Tekkaya, A. E. (2023). Solid state recycling of aluminium chips: Multi-technique characterization and analysis of oxidation. *Materialia*, 31.

TITRE : Self-Assembled $Ti_3C_2T_x$ MXene Thin Films for High-Performance Ammonia Sensors

AUTHORS

Elmehdi OULD MAINA², Pingping NI², Kassioyé DEMBÉLÉ^{2,3}, Abderrahim YASSAR², Fatima Z. BOUANIS^{1,2*}

¹COSYS-IMSE, Université Gustave Eiffel, F-77454 Marne-la-Vallée, France

²LPICM, CNRS, École Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris, 91128 Palaiseau, France

³Centre interdisciplinaire de microscopie électronique, École Polytechnique, 91120 Palaiseau, France

LABORATORY

IMSE – Laboratoire Instrumentation, Modélisation, Simulation et Expérimentation

ABSTRACT

Sensing ammonia (NH_3) gas at room temperature (RT) is of paramount significance for various industrial and environmental sectors including, pollution monitoring, commercial safety, and medical services, among others. Two dimensional (2D) materials, such as MXenes, have emerged as a fascinating material for RT gas-sensing applications due to their outstanding properties. This work reports the design and fabrication of a high-performance ammonia sensor based on MXenes material. $Ti_3C_2T_x$ MXene was synthesized through selective etching of Al atoms of Ti_3AlC_2 MAX phase by using the Minimally Intensive Layer Delamination method (MILD).^[1] Specifically, this synthetic way avoids the use of hazardous and corrosive pure HF and provides large MXene flakes with high quality and negligible defects, which makes it suitable for versatile applications such as gas sensing. To improve its sensing performance, a MXene nanosheets thin film with a thickness of ≈ 10 nm was prepared using a scalable self-assembled method. (Figure 1a-c)^[2,3] Specifically, we employed the controlled and enhanced interfacial self-assembled method to fabricate a continuous and conductive MXene ultra-thin film (Figure 1e). The morphology and the structure of the produced MXene materials and their films were characterized by combining multi-characterization tools. Altogether, these highlight the uniform and continuous deposition of the MXene nanosheets film on the glass substrate. The electrical characterization indicates a sheet resistance value of $4.82 \times 10^5 \Omega/sq$. The fabricated devices present good RT sensing performances for NH_3 detection, ranging from 1 to 20 ppm. This demonstrates the outstanding sensitivity of MXene with a value of 1.92% for the lowest concentration (1 ppm), a fast response (179 s) and a recovery time of (612 s) (Figure 1d). The enhanced gas sensing property is related to the high quality of the ultra-thin MXene sensing layer. The utilization of the self-assembly method for manufacturing ultra-thin layers not only broadens the spectrum of available technique tools for fabrication of 2D nanosheets thin films, but also offers a straightforward and efficient approach for designing future wearable gas sensors with enhanced capabilities. This method has many remarkable advantages, including simplicity in processing equipment and low manufacturing costs. Furthermore, it has the ability to control the thickness of ultra-thin films and provides insight into the gas sensing mechanism and behavior of such devices. Moreover, the sensors demonstrate high degree of stability and excellent reproducibility, make them suitable candidate for practical applications like environmental monitoring.

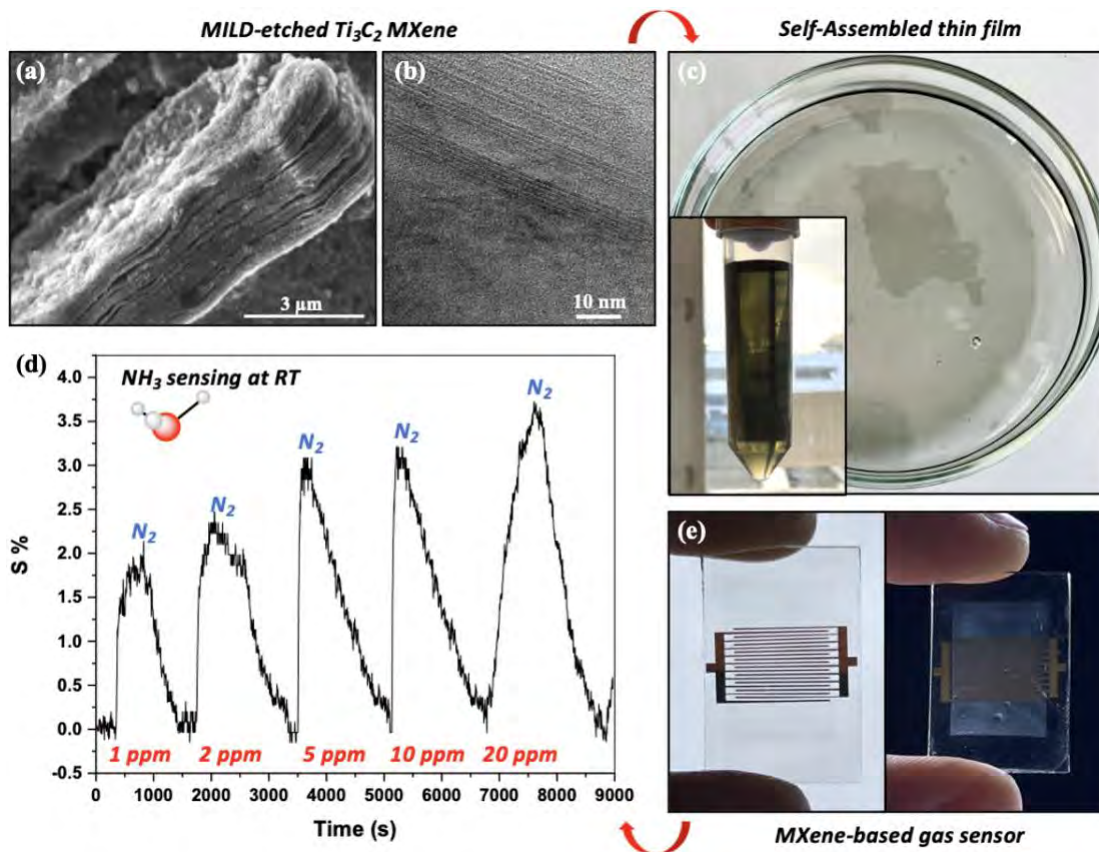


Figure 1: (a) SEM image of multilayered Ti_3C_2Tx ; (b) High-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) images of MXene multilayered structure; (c) Typical dark green color of exfoliated MXene nanosheets colloidal solution and self-assembled film picture; (d) The response of Self-assembled MXene sensor to NH_3 gas under various concentrations ranging from 1 ppm to 20 ppm. (e) Photo of fabricated MXene-based gas sensor.

KEY WORDS

MXene nanosheets, NH_3 gas sensor, Minimally Intensive Layer Delamination Method, Interfacial Self-Assembled Method, Ultra-Thin film, Room Temperature.

REFERENCES

- [1] Alhabeb, M., Maleski, K., Anasori, B., Lelyukh, P., Clark, L., Sin, S., & Gogotsi, Y. Guidelines for Synthesis and Processing of Two-Dimensional Titanium Carbide (Ti_3C_2Tx MXene). *Chemistry of Materials* (2017), 29(18), 7633–7644. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b02847>.
- [2] Mojtabavi, M., Vahidmohammadi, A., Ganeshan, K., Hejazi, D., Shahbazmohamadi, S., Kar, S., van Duin, A. C. T., & Wanunu, M. Wafer-Scale Lateral Self-Assembly of Mosaic Ti_3C_2Tx MXene Monolayer Films. *ACS Nano* (2021), 15(1), 625–636. <https://doi.org/10.1021/acsnano.0c06393>.
- [3] Kim, S. J., Choi, J., Maleski, K., Hantanasirisakul, K., Jung, H. T., Gogotsi, Y., & Ahn, C. W. Interfacial assembly of ultrathin, functional MXene films. *ACS Applied Materials and Interfaces* (2019), 11(35), 32320–32327. <https://doi.org/10.1021/acsami.9b12539>.