

PARIS
EST
SUP — ÉCOLE
DOCTORALE

Sciences, Ingénierie
et Environnement



« LE MONDE DE DEMAIN »

JOURNÉE SCIENTIFIQUE - ED SIE

JEUDI 29 JUIN 2023

Amphithéâtre 4 - Bâtiment I
Université Paris-Est Créteil - Campus Centre

2 prix : Meilleure communication & Meilleur poster

PROGRAMME

Comité d'organisation :

Charlotte Dianoux (IEES)
Syphax Fereka (MSME)
Pierre Martinache (LEESU)
Christelle Nabintu Kajoka (LEESU)
Tiana Ramaroson (ED SIE)

Inscription gratuite obligatoire

Information et programme :

www.paris-est-sup.fr/journee-scientifique-sie

Programme journée scientifique 29 juin 2023

8h30 Accueil de tous les participants
9h00 Ouverture par Xavier CHATEAU, directeur de l'École Doctorale SIE

**SESSION 1
PRESENTATION
ORALE**

9h15 Gauthier FABRE LISA p.3
9h35 Chloé BOUTILLEZ LGE p.4
9h55 Amritesh SINHA MSME p.5
10h15 Julie FOUILLOUX ICMPE p.6
10h35 Présentation Isabelle DAJOZ Invitée p.7

11h05 – 11h20

Pause

**SESSION 2
PRESENTATION
ORALE**

11h20 Shanèze NOËL IEES p.8
11h40 Thomas STARCK LEESU p.9
12h00 Kun LI ICMPE p.10
12h20 Pierre NAVARO-AUBURTIN NAVIER p.11

12h40 – 14h25

Pause déjeuner + présentation poster

**SESSION 3
PRESENTATION POSTER**

Sébastien VISSE CERTES p.12
 Iryna LESKO ICMPE p.13
 Amaury FERNANDES LGP p.14
 Amine LAGZOULI MSME p.15
 Sitian ZHU HM&CO p.16
 Adarsh Jojo THOMAS HM&CO p.17
 Prem MAHESHWARKAR LISA p.18
 Leshan USGODAAARACHCHI IMSE p.19
 Lydia FERDJALLAH CERTES p.20
 Yamoussa TOURE CERTES p.21
 Angel GARCIA GAGO HM&CO p.22

**SESSION 4
PRESENTATION
ORALE**

14h25 Présentation Jérémy BLEYER Invité p.23
14h55 Balakumara VIGNESH IMSE p.24
15h15 Brian BARBER NUNEZ ICMPE p.25-26
15h35 Frederico LARA DINIZ OLIVEIRA ICMPE p.27

15h55 – 16h15

Pause

**SESSION 5
PRESENTATION
ORALE**

16h15 Mbaye DIENG IMSE p.28
16h35 Gauthier BERNIER-TURPIN LEESU p.29-30
16h55 Flavien TURPIN LGE p.31-32

17h15 – 17h30

Délibération

17h30 Prix et clôture de la journée

TITRE : UTILISATION DE LA SPECTROSCOPIE INFRAROUGE DANS L'ETUDE DE L'ALTERATION DES VERRES EN PHASE VAPEUR

AUTEURS

Gauthier FABRE^{1,2} ; Aurélie VERNEY-CARRON² ; Christophe JEGOU¹ ; Marie FENART¹

1 CEA, DES , ISEC, DPME, SEME, LEMC, Univ Montpellier, Marcoule, France 2 Université Paris-Est Créteil, Université Paris Cité, CNRS, LISA, 94010 Créteil, France

LABORATOIRE

Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA)

RÉSUMÉ

Les déchets nucléaires hautement radioactifs sont actuellement vitrifiés et destinés à être enfouis en couche géologique profonde. Afin de garantir la sûreté de cette solution de gestion, il est nécessaire de comprendre l'altération des colis de verre lors de leur stockage. Les scénarii actuels prévoient qu'initialement, le verre sera au contact de l'eau sous forme de vapeur. En effet, La génération importante d'hydrogène par la corrosion anoxique du conteneur en acier ralentira sensiblement la resaturation du site en eau liquide sur des périodes pouvant atteindre plusieurs dizaines de milliers d'années. Ainsi, les verres subiront une étape d'hydratation par la vapeur d'eau avant qu'ils ne soient altérés par l'eau liquide du site de stockage.

Cependant, l'étude de l'altération du verre en phase vapeur est un défi. Tout d'abord, les taux d'hydratation observés sont très faibles. Une couche de gel d'altération se forme généralement lors de l'exposition à la vapeur d'eau pendant de longues périodes entre 50 et 90°C [1]-[3]. Ensuite, contrairement aux études d'altération en milieu aqueux, l'absence de lixiviat des protocoles expérimentaux en phase vapeur rend difficile la mesure de l'hydratation. Enfin, les mécanismes de formation des couches d'altération ainsi que leurs propriétés sont encore largement méconnus. L'objectif général de la thèse est donc de mieux comprendre les mécanismes de sorption et d'hydratation des verres nucléaires et de déterminer les cinétiques associées en fonction de différents paramètres (température, état de surface, irradiation, composition du verre).

Pour cela, il est nécessaire de développer des techniques de caractérisation adaptées afin d'évaluer l'hydratation des verres en phase vapeur. Ce travail présente donc une méthode rapide et efficace basée sur la spectroscopie infrarouge et associée à des techniques de caractérisation du solide (ToF-SIMS) et de microscopie (MO, MEB) permettant de suivre et d'évaluer in situ le degré d'altération du verre exposé en phase vapeur.

L'hydratation des verres SON68 (substitut non radioactif du verre R7T7, verre nucléaire industriel français de référence), AVMV4 (« Atelier de Vitrification de Marcoule ») et ISG (International Simple Glass) a ainsi été étudiée à 50 et 90°C sous une humidité relative de 95%. L'effet d'un dommage dû à l'irradiation sur la durabilité chimique du verre en présence de vapeur d'eau a également été investigué. Les premiers résultats mettent en évidence le rôle des différents paramètres.

A terme, les résultats obtenus dans le cadre de ce travail permettront de proposer un modèle mécanistique de l'altération des verres nucléaires en phase vapeur permettant de prévoir le comportement des verres sur le très long terme.

[1] J. Neeway et al., « Vapor hydration of SON68 glass from 90°C to 200°C: A kinetic study and corrosion products investigation », *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 358, no 21, p. 2894-2905, oct. 2012, doi: 10.1016/j.jnoncrsol.2012.07.020.

[2] R. Bouakkaz, A. Abdelouas, Y. El Mendili, B. Grambow, et S. Gin, « SON68 glass alteration under Si-rich solutions at low temperature (35–90 °C): kinetics, secondary phases and isotopic exchange studies », *RSC Adv.*, vol. 6, no 76, p. 72616-72633, 2016, doi: 10.1039/C6RA12404F.

[3] C. Jegou, S. Narayanasamy, et F. Angeli, « Short communication on the Influence of the temperature between 30 and 70°C on the hydration of SON68 nuclear waste glass in a vapour phase », *J. Nucl. Mater.*, vol. 545, p. 152738, mars 2021, doi: 10.1016/j.jnucmat.2020.152738.consultables sur Internet.

MOTS CLES : Verre, spectroscopie infrarouge, vapeur

TITRE : ALTERATION DE VITRAUX : INFLUENCE DES BACTERIES SUR LA DISSOLUTION DE 5 VERRES MODELES

AUTEURS

Chloé BOUTILLETZ, Anne PEREZ, Aurélie VERNEY-CARRON, Stéphanie ROSSANO

LABORATOIRE

Laboratoire Géomatériaux et Environnement

RÉSUMÉ

Depuis plusieurs siècles, les surfaces externes et internes des vitraux médiévaux s'altèrent sous l'effet de leur exposition à l'eau (épisodes de pluie, humidité, cycle condensation/séchage). Ces conditions favorisent le développement de micro-organismes tels que les champignons, les bactéries et les algues qui contribuent à l'altération. De par leur composition, les verres médiévaux peuvent être des substrats attractifs pour le développement de biofilms, car ils représentent une source de nutriments pour les micro-organismes. Cependant, en raison de la multiplicité des paramètres impliqués, ces interactions sont mal connues et encore peu documentées.

Afin de tester l'influence des substrats vitreux sur les processus de colonisation et d'altération, un panel de 5 verres médiévaux synthétiques a été soumis à des expériences d'altération en milieu saturé, à court (système fermé, 7 jours) et moyen-terme (bioréacteur, 1 mois). Les 5 verres ont une base silico calco-potassique commune et des teneurs variables en Mn et Fe (entre 0 et 2 % massique d'oxyde). Dans le but de cibler, dans un premier temps, le rôle du Mn et du Fe, ainsi que la pathologie de brunissement typique de vitraux contenant du Mn, la souche *Pseudomonas putida* connue pour son affinité pour le Fe et ses propriétés d'oxydation du Mn a été choisie. Dans un second temps, des expériences avec la souche *Athrobacter cristallopoietes*, prélevée sur des vitraux exposés présentant des altérations brunes et connue pour son potentiel altérant, ont été également réalisées.

Les 5 verres ont été altérés dans un milieu liquide minimaliste à 25°C en présence de microorganismes. Les solutions de milieu de culture ont été périodiquement analysées par ICP-OES et les échantillons solides ont été caractérisés par MEB. Les résultats des expériences à court-terme mettent en évidence que la présence de Mn, même de l'ordre de 1 ou 2 % en poids dans le verre, semble augmenter significativement sa durabilité. La présence de la souche bactérienne *P. putida* en croissance dans le milieu liquide n'a pas de réel impact sur la vitesse d'hydrolyse à court terme des verres, mais modifie significativement le comportement des éléments du verre relâché en solution. Mn, Fe et P ont un comportement modifié du fait de leur mobilisation par le métabolisme de la bactérie. Ensuite, le développement de la souche est fortement lié à la composition des verres : l'augmentation de la teneur en Fe/Mn des verres inhibe/stimule la croissance bactérienne, respectivement. De plus, la diminution de la teneur en Fe déclenche la production de sidérophores. Enfin, la présence d'oxydes de Mn en solution et dans les biofilms en surface du verre a été détectée dans toutes les expériences impliquant des verres contenant du Mn. Une première série d'expériences à moyen-terme sur un verre manganésien en présence de *P. putida* a permis le développement d'un biofilm consistant.

MOTS CLÉS : Bioaltération, vitraux, bactéries

TITLE: AERO-ACOUSTIC LINER IMPEDANCE METAMODEL CONSTRUCTION FROM A SMALL DATASET USING PROBABILISTIC LEARNING

AUTHORS

Amritesh SINHA¹, Christian SOIZE¹, Christophe DESCELLIERS¹, Guilherme CUNHA²

LABORATORY

¹Laboratoire Modélisation et Simulations Multi-Échelle MSME UMR 8208, ²Airbus Operations SAS (Toulouse, France)

ABSTRACT

The framework of this work is the optimisation of aero-acoustic noise reduction for Ultra High ByPass Ratio (UHBR) engines. Such an optimisation is done for low frequency tonal acoustic noises by means of tailored aero-acoustic liners. In order to avoid the prohibitively high computational and experimental costs for the design optimisation of these liners, a metamodel has to be constructed and is chosen as a neural network. In general big dataset is required for training the neural network. Since only small dataset is available, we propose to use a probabilistic learning tool for generating this big dataset and then training the neural network.

For supervised or unsupervised cases, with or without constraints, Probabilistic Learning on Manifolds (PLoM) [1,2] is a machine-learning tool that allows a learned set to be generated from a given training set whose points are realisations of a non-Gaussian random vector whose support of its probability distribution is concentrated in a subset (a manifold). This approach allows for discovering the geometric properties of the probability measure support and preserves the concentration of the probability measure for the learned set. This approach has specifically been developed for the case of small training sets as opposed to big datasets. In a first step PLoM is used for constructing a probabilistic metamodel of aero-acoustic liner impedance for which a training set has been constructed with a high fidelity computational aero-acoustics (CAA) model [3]. Conditional statistics of the real and imaginary parts of the frequency dependent random impedance are estimated, which allows the metamodel to be constructed. This probabilistic metamodel is robust, has been validated through conditional statistics and measure of concentration.

References:

- [1] C. Soize, R. Ghanem, Probabilistic learning on manifolds, Foundations of Data Science, American Institute of Mathematical Sciences, 2 (3), 279-307, 2020, doi: 10.3934/fods.2020013
- [2] C. Soize, R. Ghanem. Probabilistic learning on manifolds (PLoM) with partition, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 123, 268-290, 2022, doi: 10.1002/nme.6856
- [3] M, Lavieille, T. Abboud, A. Bennani, N. Balin, Numerical simulations of perforate liners: Part I – Model description and impedance validation, 19th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference, pp.2269, 2013, doi :10.2514/6.2013-2269

MOTS CLÉS : Aero-acoustic liner impedance, metamodel, Probabilistic Learning on Manifolds, PLoM

TITLE: A STRAIGHTFORWARD WAY TO PROVIDE ANTIBACTERIAL PROPERTIES TO HEALTHCARE TEXTILES THROUGH CHITOSAN CROSSLINKING.

AUTHORS

Julie FOUILLOUX, Estelle RENARD, Lasâad DAMMAK

LABORATORY

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

ABSTRACT

Recent diseases outbreaks such as COVID-19, have brought to light the need to prevent the spread of infections. This is especially visible in medical fields where patients and medical workers are subjected to the risk of contracting nosocomial infections. Those infections are caught during healthcare delivery related to a different reason than the infection. They mainly spread through surface contamination. Demand for personal protective equipment (PPE) has strongly increased after the pandemic. This also led to the elaboration of antimicrobial treatments to prevent indirect contaminations. Thus, the development of textiles such as facemasks, bed sheets and medical gowns, that are active against bacterial contamination, is a crucial issue to fight the spread of nosocomial diseases.

To meet this challenge, this work aimed to reinforce facemask mechanical filtration with antibacterial action. For this purpose, a surface functionalization treatment was developed by ammonium function grafting on fabrics.

As the masks were made of polypropylene, a polymer with no reactive functions, we used chitosan, a biosourced polymer [1] extracted from shrimp shells, to functionalize the supports. Different strategies were used: either pre-functionalization of the chitosan followed by cross-linking around the PP fibres, or post-functionalization of the chitosan previously cross-linked around the PP fibres. The crosslinking reaction ensures the support to be physically trapped and the coating to resist washing abrasion.

The quaternized derivative of chitosan was synthesized under microwave irradiation by grafting glycidyltrimethylammonium (GTMAC). The polymer was then crosslinked using a diisocyanate. In the second strategy, the chitosan is deposited around the PP fibers and cross-linked in water with tannic acid as the cross-linking agent. The free functions of the chitosan can then react with GTMAC to generate ammonium functions on the surface.

Supports were mainly characterized by IR spectroscopy, SEM imaging and EDX. The efficiency of these new antibacterial systems was evaluated by in-vitro studies against the two major strains of bacteria gram negative (*E. coli*) and gram positive (*S. aureus*). The results showed a significant reduction of *S. aureus* colonization. However, no action was observed on *E. coli*.

KEYWORDS: chitosan, crosslinking, antibacterial activity, sustainable textiles, nosocomial infections

REFERENCES:

[1] J. LI, S. ZHUANG, *EUROPEAN POLYMER JOURNAL*, 2020, 138, 109984.

THÈME : ECOLOGIE URBAINE DE LA POLLINISATION

Intervention Isabelle DAJO, Professeure à l'Université de Paris

Institut d'écologie et des sciences de l'environnement de Paris

TITRE : L'INVASION D'OBAMA NUNGARA (PLATHELMINTHES : GEOPLANIDAE) EN FRANCE METROPOLITAINE ET SON IMPACT SUR LES COMMUNAUTES DE VERS DE TERRE.

AUTEURS

S. NOËL¹, V. ROY¹, Y. FOURCADE¹, L. DUPONT¹

LABORATOIRE

¹ Institut d'écologie et des sciences de l'Environnement de Paris (IEES-Paris),
Université Paris Est Créteil, Créteil, France

RÉSUMÉ

Obama nungara (Plathelminthes: Geoplanidae) est un ver plat terrestre, natif d'Amérique du Sud et considéré comme espèce exotique envahissante en France, avec une présence déclarée dans 72 départements en métropole. A ce jour, il n'a été observé que dans des milieux anthropisés comme des jardins de particuliers. Cette espèce est un prédateur de vers de terre, or ces derniers jouent un rôle essentiel dans l'écosystème du sol, par exemple à travers la décomposition de la matière organique ou en creusant des galeries qui assurent une bonne aération du sol.

Dans les zones tempérées, les espèces de vers de terre peuvent être principalement triées en trois écotypes selon leurs caractéristiques morphologiques, comportementales et fonctionnelles (i.e. épigés, anéciques et endogés) bien que ces catégories de soient pas strictes, certaines espèces pouvant avoir des caractéristiques de plusieurs écotypes. Parce que les anéciques et les épigés passent plus de temps à la surface du sol, on suppose que la prédation par *O. nungara* impactera plus ces écotypes que les vers de terres endogés qui vivent en permanence dans le sol. Cette différence de pression de prédation selon les écotypes pourrait modifier la structure des communautés de vers de terre et ainsi le fonctionnement du sol .

Cette étude s'inscrit dans un projet qui vise à prédire les trajectoires à long terme des écosystèmes envahis par *O. nungara*. Ici, l'objectif principal est de décrire la dynamique des populations d'*O. nungara* sur plusieurs sites d'introduction en France métropolitaine, et de mettre en évidence un éventuel lien avec la structure des communautés de vers de terre. Pour ce faire, nous avons suivi deux fois par an (à l'automne et au printemps) l'abondance d'*O. nungara*, l'abondance de vers de terre et la structure de la communauté de vers de terre, sur 10 sites différents (jardins privés, serre, et toit potager) dans quatre régions de France de 2021 à 2023.

De plus, nous avons analysé des données de suivi quotidien, obtenues par un particulier dans son jardin. Les données disponibles étant un décompte quotidien de l'abondance d'*O. nungara* depuis juin 2020 combiné à des données météorologiques nationales. Ceci nous a fourni un jeu de données très détaillé qui nous a permis de décrire la dynamique de la population d'*O. nungara* sur une échelle très fine à l'aide de modèles linéaires Bayésien. Ce jeu de donnée a permis de tester quels facteurs ont des conséquences sur l'abondance d'*O. nungara*. Nous avons fait l'hypothèse que la température n'a un impact que le jour même alors que la pluie a un impact plus durable sur le sol. Ainsi, l'effet de la pluie sur l'abondance d'*O. nungara* pourrait être différé dans le temps.

MOTS CLES : Espèce envahissante, dynamique des populations, vers de terre, *Obama nungara*, travail de terrain

TITRE : BILAN AZOTE ET PHOSPHORE DU DEVENIR DES EXCRETIONS DES FRANÇAIS

AUTEURS

STARCK Thomas, FARDET Tanguy, ESCULIER Fabien

LABORATOIRE

Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (LEESU)

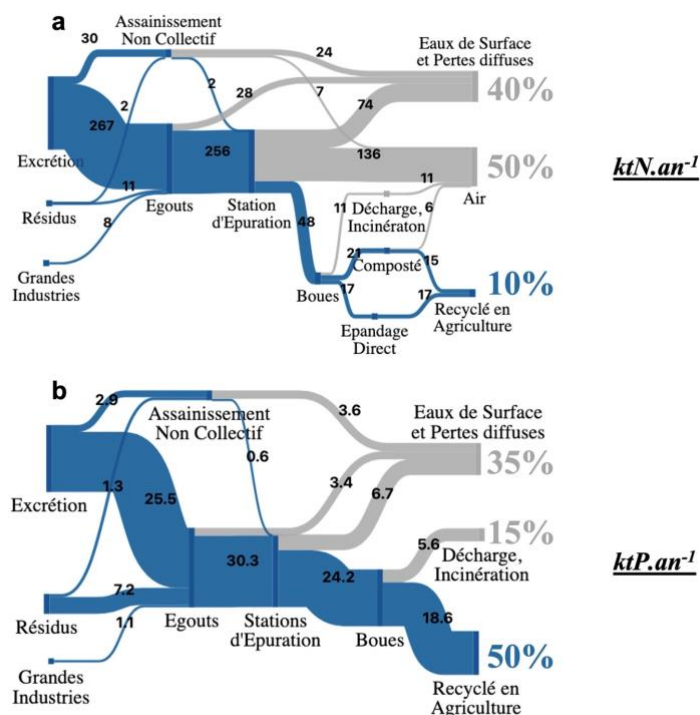
RÉSUMÉ

Les émissions d'azote (N) et de phosphore (P) en provenance des agroécosystèmes et des stations de traitement des eaux usées (STEU) entraînent de multiples pollutions. Le N et le P des excréments humains présentent pourtant un potentiel pour la fertilisation agricole. Dans cette étude, nous utilisons pour la première fois les données opérationnelles des plus de 20 000 STEU françaises sur deux décennies pour produire un bilan des flux de N et P dans les systèmes d'assainissement.

Bien que les $\frac{3}{4}$ des boues de STEU soient épandues sur les cultures, seulement 50% du P et 10% du N excrétés sont réutilisés en agriculture. 35% du P et 40% du N sont émis dans les eaux de surface ou de manière diffuse et souterraine. Enfin, 15% du P est incinéré ou mis en décharge, tandis que 50% du N est dispersé dans l'atmosphère, en majorité suite à la dénitrification en STEU.

Bien que le rendement épuratoire des STEU a augmenté dans les années 2000, atteignant une valeur nationale de 80% pour le P et 70% pour le N, cela a été suivi d'une décennie de stagnation. Cette stagnation finale du rendement épuratoire, de 60% à 85% selon les bassins, est étroitement associée au classement réglementaire en zones sensibles N et P.

Les différences de recyclage N et P sont dues au procédé de dénitrification qui détruit la ressource azotée, résultant en la production de boues au ratio N:P non adapté aux besoins des cultures. Bien qu'il soit possible d'augmenter le recyclage du P en se concentrant sur les pertes hors station et en augmentant le rendement épuratoire, une nouvelle approche sera nécessaire pour le N. La séparation à la source des urines pourrait répondre à ces problématiques, en récupérant les nutriments avant dilution et contamination par les eaux urbaines.



MOTS CLES : AZOTE ; PHOSPHORE ; STATION DE TRAITEMENT DES EAUX USEES ; SYSTEME ALIMENTAIRE ; BOUES

TITLE: POLYMER METAL-ORGANIC FRAMEWORK SELF-ASSEMBLY (PMOFSA) TO GENERATE WELL-DISPERSED POLYMER-MOF HYBRID NANOPARTICLES IN WATER.

AUTHORS

Kun LI, Zhihao Yu,] Iurii DOVGALIUK, Clémence LE COEUR, Viviane LÜTZ-BUENO, Eric LEROY, Blandine BRISSAULT, Yoann de RANCOURT de MIMERAND, Mathilde LEPOITEVIN, Christian SERRE, Jacques PENELLE, Benoit COUTURAUD*

LABORATOIRE

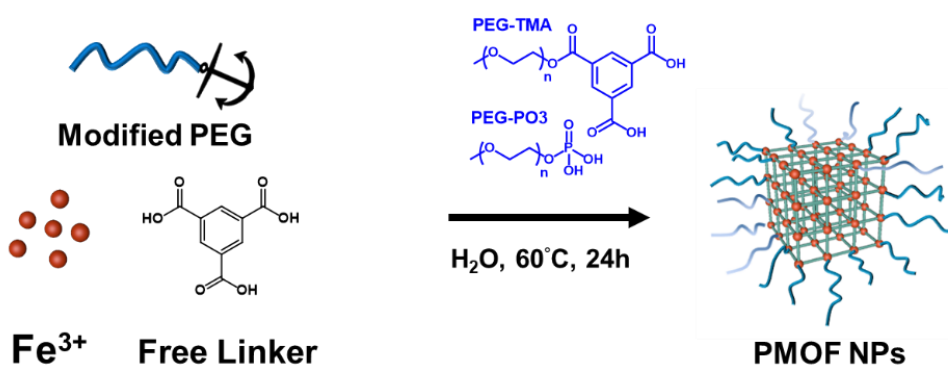
Département Chimie Moléculaire et Matériaux Macromoléculaires (C3M)

ABSTRACT

The combination of polymer and metal-organic frameworks (MOFs) has garnered significant attention in the fields of chemistry and materials science due to their unique properties. Polymer compounds offer several advantages, such as processability, sustainability, and various properties like water solubility, low toxicity,[1] and biocompatibility,[2] owing to their soft nature. Meanwhile, MOFs are highly controllable in structure, possess a high surface area, and exhibit selective adsorption, making them an important material. The hybridization of MOFs and polymers through polymer-grafted methodologies provides unprecedented functions and unexplored properties that are challenging to achieve using individual components.

We here developed Polymer-Metal-Organic Frameworks Self-Assembly (PMOFSA) to generate well-dispersed hybrid Nanoparticles in water in one pot. this method can control particles' size and improve their colloidal stability in water. In this study, we focused on modifying commercially available PEGs with molecular weights of 2k and 5k by esterifying them with a functional group, such as Trimesic acid (TMA) or a phosphate end-group (PEG2k-TMA, PEG5k-TMA, PEG2k-PO3, and PEG5k-PO3). The resulting particles were characterized using dynamic light scattering (DLS) and transmission electron microscopy (TEM), and demonstrated excellent colloidal dispersion stability. Moreover, the size of the polymer-MOF (PMOF) hybrid nanoparticles in aqueous solution could be adjusted by varying the amount of modified PEG polymer ligands added. XRD has shown the usual formation of MOF lattice. BET proves the porosity of Polymer-MOF hybrid materials.

MOTS CLÉS : Polymer-MOF(PolyMOF) ; nanoparticles ; one-pot ; PMOFSA.



Scheme 1. Classic methods for the preparation of polymer-MOF nanoparticles by One-step polymer Metal-Organic Framework Self-Assembly (MOFSA).

- [1] Y. Jiaying, S. Bo, W. Xiaolu, Z. Yanyan, W. Hongjie, S. Nan, G. Bo, W. Linna, Z. Yan, G. Wenya, L. Keke, J. Shan, L. Chuan, Z. Yu, Z. Qinghe, Z. Haiyu, *Drug Deliv* **2023**, *30*, 2177362.
- [2] C. Caddeo, L. Pucci, M. Gabriele, C. Carbone, X. Fernandez-Busquets, D. Valenti, R. Pons, A. Vassallo, A. M. Fadda, M. Manconi, *Int J Pharm* **2018**, *538*, 40-47.

TITRE : IMPACT ENVIRONNEMENTAL DES CHOIX DE CONCEPTION DE STRUCTURES DE BATIMENTS

AUTEURS

P. NAVARO AUBURTIN^{2,3}, M.SAADE¹, M.MANTHEY², M.LOUËRAT², J-L.MARTIN³, O.BAVERELI¹

1 Laboratoire Navier, UMR 8205, ENPC, IFSTTAR, CNRS, 6-8 Av. B. Pascal, F-77455 MLV Cedex 2. France

2 Centre Scientifique et Technique du Bâtiment (CSTB), France

3 AREP, 16 Av. d'Ivry, F-75013 Paris Cedex 13. France

LABORATOIRE

Laboratoire Navier ; Equipe MSA

RÉSUMÉ

En France, les émissions de gaz à effet de serre liées à la production des matériaux et équipements de construction représente 35% (Pellan et al., 2022) des émissions totales du secteur de la construction. Cette proportion peut atteindre jusqu'à 70 % si l'on considère les bâtiments récents ("Performance Énergétique des Bâtiments Neufs", n.d.). La réduction des impacts environnementaux de la construction et de la démolition des bâtiments s'avère nécessaire pour atteindre les seuils fixés par les accords européens en matière d'environnement. En particulier, les éléments structurels représentent une grande partie de la quantité de matériaux et des impacts environnementaux (Qarout, 2017). Cette étude quantifie les impacts des structures de bâtiments afin de déterminer l'importance des décisions prises au stade de conception pour la construction d'immeubles de logement.

Pour étudier l'influence du choix de matériaux, de portée et de la trame, l'étude combine une méthodologie en analyse de cycle de vie (ACV) et du calcul de structure à l'aide d'outils paramétriques construits avec un ensemble d'éléments précalculés composés de poutres, de poteaux, de systèmes de planchers et de fondations. L'approche ACV se base sur les scénarios français trouvés dans la base de donnée INIES (base de référence des produits de construction français) en utilisant des données environnementales de la base de donnéeecoinvent. La méthode de calcul d'impact est RECIPE 2016 ce qui permet de réaliser un calcul sur des indicateurs midpoints et endpoints.

Les résultats montrent que l'impact environnemental est principalement influencé par la typologie structurelle et les matériaux, et dans une moindre mesure par le choix de la grille et la portée. Les solutions structurelles peuvent également être plus performantes pour un indicateur particulier tout en présentant des impacts plus importants pour un autre indicateur. Cela prouve la nécessité pour les concepteurs d'effectuer une analyse holistique. L'étude permet aussi d'identifier les poutres et planchers planchers comme les éléments les plus impactant de la structure alors que les poteaux représente une maigre part de l'impact. Ce sont donc les éléments sur lesquels les concepteurs doivent trouver le plus de levier de réduction d'impact.

MOTS CLES : Structure, Analyse de cycle de vie, Conception, Multicritère, Bâtiment

[1] Pellan, M. et al. (Sept. 2022). "A Holistic Perspective on the French Building and Construction GHG Footprint". In: IOP Conference Series: Earth and Environmental Science 1078.1, p. 012049. issn: 1755-1315. doi: 10.1088/1755-1315/1078/1/012049. url: <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1078/1/012049>

[2] « Performance Énergétique des Bâtiments Neufs ». consulted 14/10/2022. url : <http://observatoire.batiment-energiecarbone.fr/statistiques/experimentation-en-chiffres/#>.

[3] Qarout, Layla, "Reducing the Environmental Impacts of Building Materials: Embodied Energy Analysis of a High-performance Building" (2017). Theses and Dissertations. 1530. url : <https://dc.uwm.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=2535&context=etd>

TITRE : OPTIMISATION DES PERFORMANCES ÉNERGÉTIQUES ET ENVIRONNEMENTALES POUR LA RÉALISATION DE NOUVEAUX BÂTIMENTS INDUSTRIELS

AUTEUR

Sébastien VISSE

LABORATOIRE

Laboratoire de CERTES

RÉSUMÉ

La présente thèse s'intéresse aux stratégies et technologies permettant d'optimiser les performances énergétiques et environnementales des nouveaux bâtiments industriels, dans le contexte de la transition énergétique et des changements climatiques. L'analyse des performances énergétiques et environnementales des bâtiments industriels existants révèle des écarts importants selon l'âge et la typologie des bâtiments.

Les stratégies d'optimisation proposées incluent la conception bioclimatique, l'intégration de technologies et systèmes énergétiques performants, la gestion optimisée des ressources et des déchets, et la sensibilisation des acteurs impliqués dans la construction et l'exploitation des bâtiments industriels. Des études de cas de projets exemplaires et des retours d'expérience permettent d'illustrer les bénéfices environnementaux, économiques et sociaux de la construction durable.

Enfin, la thèse formule des propositions pour l'évolution des réglementations, des normes et des mécanismes d'incitation et de soutien à la construction durable, afin d'accélérer la transition vers une construction industrielle éco-responsable. La coopération entre les acteurs du secteur et la poursuite des efforts de recherche et d'innovation sont essentielles pour relever ce défi majeur pour l'avenir de notre planète et la compétitivité des entreprises

MOTS CLES : bâtiments industriels, performances énergétiques, environnement, construction durable, efficacité énergétique, gestion des ressources.

TITLE: ELECTROCHEMICAL CARBOXYLATION OF ARYL AND HETEROARYL HALIDES AND TRIFLATES: FROM BATCH TO FLOW TECHNOLOGY

AUTHOR

Iryna LESKO

LABORATOIRE

Laboratoire de l'ICMPE

Supervision: LEONEL Eric

Supervision: LE GALL Erwan

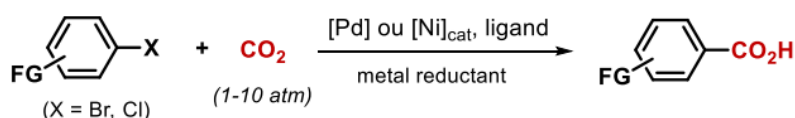
Co-supervision: SENGMANY Stéphane BELTRAN Raphaël (SANOFI Project Leader)

Funding: CIFRE (SANOFI)

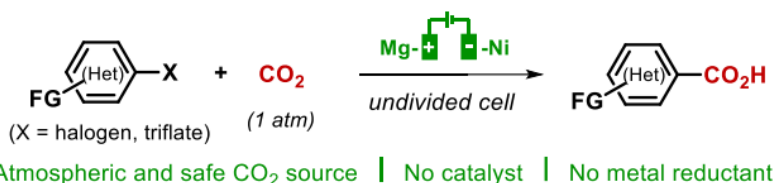
ABSTRACT

Carboxylated substrates are extremely useful in the pharmaceutical field as they are perfect building blocks for more complex molecules. Carbon dioxide (CO₂) is considered an ideal C1 building block for organic synthesis due to its non-toxicity, low cost, and availability as a renewable resource. However, it is not easy to activate under mild conditions due to its thermodynamic stability and kinetic inertness. Therefore, efficient chemical carboxylation of aryl halides using transition metal catalysts is very attractive.^[1] Palladium^[2] and nickel^[3] represent the most widely used transition metals in carboxylation, often requiring an additional stoichiometric amount of metallic reductants such as zinc or manganese, which represents an important constraint for an industrial scale development (Scheme 1). Moreover, the price of transition metals catalysts continues to rise.

■ Chemical carboxylation approach



■ Thesis project: electrochemical carboxylation approach



Scheme 1. Comparison of chemical and electrochemical carboxylation methods

Based on the knowledge of the laboratory in organic electrosynthesis,^[4] the objective of the project is to develop a general electrochemical carboxylation of arenes and heteroarenes method using CO₂, which will avoid adding sacrificial reductant metal and catalyst. The first part of the work consisted in the examination of experimental parameters. The optimized conditions were then applied to various aryl and heteroaryl halides substrates. A comparative study with the conventional chemical method of carboxylation using palladium catalyst will be performed in order to evaluate the performances and the cost. Voltamperometric analysis will be carried out to elucidate the mechanism. The last part of the work will be focused on the transposition of the electrochemical approach in batch to a larger scale through flow technology. The association of flow technology and electrochemistry will provide a better control of reaction conditions, improving thus the reproducibility of the reaction.

[1] A. Tortajada, F. Juliá-Hernández, M. Börjesson, T. Moragas, R. Martín. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 15948-15982.

[2] A. Correa, R. Martín. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 15974-15975.

[3] T. Fujihara, K. Nogi, T. Xu, J. Terao, Y. Tsuji. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 9106-9109.

[4] O. Sock, M. Troupel, J. Périchon, *Tetrahedron Lett.* **1985**, *26*, 1509-1512.

TITRE : APPROCHE GEOMORPHOLOGIQUE DES DYNAMIQUES FLUVIO-EOLIENNES HOLOCENE DANS L'OASIS D'ALULA DANS LE NORD-OUEST DE L'ARABIE : APPROCHE CARTOGRAPHIQUE

AUTEURS

Amaury FERNANDES¹, Laurent LESPEZ², Gourguen DAVTIAN³, Hatem DJERBI⁴, Claude ROUVIER⁵, Louise PURDUE⁶

1 Université Paris-Est Créteil, LGP UMR CNRS 8591 a.fernandes1@yahoo.fr

2 Université Paris-Est Créteil, LGP UMR CNRS 8591 laurent.lespez@lgp.cnrs.fr

3 CEPAM UMR CNRS 7264 gourguen.davtian@cepam.cnrs.fr

4 CEPAM UMR CNRS 7264 hatem.djerbi@cepam.cnrs.fr

5 Chercheur indépendant clauderouvier.022@gmail.com

6 CEPAM UMR CNRS 7264 louise.purdue@cepam.cnrs.fr

LABORATOIRE

Laboratoire de Géographie Physique (LGP)

RÉSUMÉ

Les oasis sont des milieux anthropisés formant des réponses adaptées aux contraintes hydroclimatiques en milieu aride. Elles offrent l'opportunité unique de comprendre l'interaction entre les dynamiques agraires et sociales, et les changements climatiques. L'oasis d'AlUla en Arabie Saoudite est une oasis fluviale, occupée et exploitée depuis le Néolithique. Afin de comprendre le cadre environnemental dans lequel les sociétés agro-pastorales se sont développées, il est nécessaire de comprendre les dynamiques qui impactent les ressources en eau et en sol disponibles dans l'oasis. L'objectif étant, à terme, de comprendre les causes de transformations socio-environnementales et les adaptations des sociétés agricoles à ces changements. Pour cela, nous avons cartographié l'organisation spatiale des formes fluviales et éoliennes dans le paysage ainsi que leurs dynamiques au cours de l'Holocène. La construction de la carte géomorphologique repose sur une combinaison d'approches de terrain, de géomatique, de télédétection et de photo-interprétation diachronique. Elle s'appuie sur (i) l'inventaire des formes de reliefs et leur organisation, (ii) des données topographiques et géologiques (1 : 500 000), (iii) des travaux de géomatique dérivés du DEM (Digital Elevation Model), (iv) de la télédétection sur des images satellites (Corona, Google). La combinaison de ces approches a mis en évidence (i) que les accumulations dunaires sont le plus souvent représentées par des dunes vives ou anciennes, ainsi que des trains de dunes paraboliques. Certaines de ces formations ont une orientation préférentielle, notamment les trains de dunes orientées sud-ouest nord-est ; (ii) que les accumulations alluviales sont marquées par la présence de grands glacis plus ou moins modifiés et anthropisés que révèlent l'importance des apports en sédiments des wadis latéraux vers le wadi AlUla au cœur de l'oasis. Il semblerait que ces accumulations sédimentaires soient influencées par la présence plus abondante de petits massifs gréseux Précambrien dans la partie amont du bassin versant. Concernant (iii) les terrasses, nous observons dans le cœur de l'oasis des terrasses complètement anthropisées ayant pour origine la chenalisation du wadi AlUla, qui servent à la fois de protection contre les crues (rehaussements de berges) ainsi que de gain de surfaces agricoles (principalement pour la palmeraie). Pour ce qui est relatif aux formes plus anciennes, elles se retrouvent dans les wadis latéraux et plus en aval de l'oasis, notamment où le glacis sont préservés de l'urbanisation galopante et permettant d'avoir une idée précise de la topographie originelle avant les modifications anthropiques. Ces premiers résultats tendent à être améliorés et étoffés au cours de l'avancement du projet et des collaborations avec les équipes archéologiques.

MOTS CLES : oasis, milieu aride, dunes, terrasses, wadi, SIG, photo-interprétation, carte géomorphologique

TITLE: DEVELOPMENT OF AN AUTOMATED IMAGE SEGMENTATION-REGISTRATION ALGORITHMS FOR BONE REMODELING ASSESSMENT USING MACHINE LEARNING.

AUTHORS

LAGOUZLII Amine, SANSALONEVittorio, PINVOKA Peter

LABORATOIRE

Laboratoire MSME, UPEC

ABSTRACT

We seek to better understand how cortical bone is affected by osteoporosis and drug treatments. The goal is to use machine learning techniques to assess morphological changes in cortical bone and to track bone remodeling units over time using co-registration techniques based on synchrotron imaging data. Additionally, we will develop a computational model to predict changes in cortical porosity and effects on bone matrix properties due to osteoporosis and other treatment regimens developing state-of-the-art bone adaptation algorithms.

The thesis has the following objectives:

- Development of machine learning (ML) and artificial intelligence (AI) based algorithms to analyse morphological parameters of cortical bone from synchrotron microcomputed tomography (micro-CT) data.
- Development of automated co-registration algorithms to track resorption cavities in cortical bone from 4D synchrotron imaging data.
- Development of computer models of bone remodeling and adaptation capable of predicting changes in cortical porosity and bone mineral density distribution.

Currently, the micro CT segmentation of rabbit cortical bone is done manually which can be time exhausting, and resources consuming. Our proposed solution is able to automatically detect the cortical bone quickly and with precision, by developing and training a new state-of-the-art architecture for the deep neural network on the synchrotron micro CT data collected by Prof David Cooper (USASK) at the Canadian synchrotron. Having an accurate segmentation of the cortical bone, we will develop an algorithm of image registration to align the images accordingly between the two-time points. Once the images are registered, we will develop algorithms to extract bone remodeling/adaptation parameters automatically and accurately.

- [1] Harrison, K. D., Hiebert, B. D., Panahifar, A., Andronowski, J. M., Ashique, A. M., King, G. A., ... & Cooper, D. M. (2020). Cortical bone porosity in rabbit models of osteoporosis. *Journal of Bone and Mineral Research*, 35(11), 2211-2228.
- [2] Harrison, K. D., Sales, E., Hiebert, B. D., Panahifar, A., Zhu, N., Arnason, T., ... & Cooper, D. M. (2022). Direct Assessment of Rabbit Cortical Bone Basic Multicellular Unit Longitudinal Erosion Rate: A 4D Synchrotron-Based Approach. *Journal of Bone and Mineral Research*, 37(11), 2244-2258.
- [3] Martin, M., Sansalone, V., & Pivonka, P. (2019). Development of a Computational Modelling Platform for Patient-specific Treatment of Osteoporosis. In *Computational Biomechanics for Medicine* (pp. 85-107). Springer, Cham.
- [4] Li, W., Xu, J., Zhang, S., Guo, H., Sun, J., Wang, Y., & Zhao, J. (2021). Study and Prediction of Bone Strength of Osteoporosis Model Based on Synchrotron Radiation.
- [5] Caron, R., Londono, I., Seoud, L., & Villemure, I. (2023). Segmentation of trabecular bone microdamage in Xray microCT images using a two-step deep learning method. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 137, 105540.

MOTS CLÉS : Micro-CT, Deep learning, Image processing, 4D-synchrotron, osteoporosis

TITLE: MULTIFRACTAL ANALYSIS OF C_n^2 SCINTILLOMETER DATA AND CONSEQUENCES FOR EVAPOTRANSPIRATION ESTIMATES IN URBAN AREA

AUTHOR

Sitian Zhu

LABORATOIRE

Laboratory of Hydrology Meteorology & Complexity (HM&Co)

ABSTRACT

The cooling impact of green roofs is highlighted in the context of urbanisation and urban heat island (UHI) effect. And it is usually described and quantified by evapotranspiration (ET) processes. Understanding ET process is the key to optimize 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 C_n^2 (which corresponds to the fluctuations of air refractive index n) in combination with surface energy balance (SEB) and Monin-Obukhov similarity theory (MOST). Hence, C_n^2 improvement in data would result in better ET estimation. But it is often overlooked and very little research has focused on it. In this project, the research area lies on the top of the Carnot and Bienvenue buildings in Ecole des Ponts Paristech. Covering an area of 1 ha, it is a wavy and vegetated large green roof, known as the Blue Green Wave (BGW). 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. Three estimates of C_n^2 (Cn2_UCn2, Cn2_PUCn2 and Cn2_Var) were analysed with structure function and universal multifractal analysis (UM). Such framework has been widely used to characterize geophysical fields extremely variable across wide range of space-time scales. There are two relevant parameters in an UM analysis, the mean codimension of intermittency $C_1 \geq 0$ and multifractality index $0 \leq \alpha \leq 2$. $\alpha = 0$, indicates monofractal; $\alpha = 2$, indicates log-normal model. Data in UM framework is analysed by Trace Moment (TM) method and Double Trace Moment (DTM) method. All of estimates demonstrated scale invariance, which could be used for upscaling and downscaling. The values of α varies between 1.8 and 1.9 and C_1 roughly equals to 0.11 show a good consistency with other studies in related field. This research provides a grasp of the properties of C_n^2 and sets the stage for its future application in precise ET estimates.

MOTS CLES : Scintillometer measurement parameter C_n^2 , Universal Multifractal, ET

TITLE: CLIMATE NETWORKS AT VARIOUS SCALES

AUTHORS

Adarsh Jojo THOMAS, Jürgen KURTHS, Daniel SCHERTZER

LABORATOIRE

Laboratory of Hydrology Meteorology & Complexity

ABSTRACT

Precipitation is a complex process that is extremely variable over a wide range of space-time scales. More specifically, it is strongly intermittent: the heaviest precipitation is increasingly concentrated on sparser and sparser fractions of the space-time domain. At the same time, precipitation is a key variable of urban geosciences. Multifractals have been developed to analyse and simulate across scales this multiscale intermittency, while the climate networks can detect and characterise event synchronisation. In contrast to multifractal analysis, climate networks are usually performed at a given scale, defined by the resolution of the data. In this communication, we present how to overcome this dichotomy and propose multiscale climate networks in the hope of reaching scales relevant to urban geosciences.

Specifically, we study theoretically and/or numerically the scale dependance of different centrality measures of climate networks determined at different scales by coarse graining the precipitation data, as is done for multifractal analysis. Among the preliminary results, we show how to modify some of the parameters of the climate networks to force scale invariance of their structure.

MOTS CLÉS : Universal Multifractals, Climate Networks, Multiplicity of Scales

TITLE: THREE-DIMENSIONAL DISTRIBUTION OF ANTHROPOGENIC AND NATURAL AEROSOLS OVER FRANCE MEASURED USING TROPOMI SATELLITE OBSERVATIONS DURING THE ACROSS CAMPAIGN

AUTHORS

Prem MAHESHWARKAR, Juan CUESTA, Paola FORMENTI, Chenjie YU, Farouk LEMMOUCHI, and Christopher CANTRELL

LABORATOIRE

Laboratoire Interuniversitaire de Systèmes Atmosphériques (LISA) - UMR 7583

ABSTRACT

(ACROSS is an extensive field campaign that was conducted over the greater Paris region in summer 2022 to study the interaction between the urban pollution plume and biogenic volatile organic compounds emitted from the surrounding forests. This is mainly done by synergism of in-situ ground-based and airborne observations of the composition of the atmosphere (Cantrell and Michoud, 2022). Satellite observations are complementary to these measurements, providing a regional and continental framework of the atmospheric composition.

In this study, we present new satellite observations of the 3D distribution of anthropogenic and natural atmospheric aerosols over France during the ACROSS campaign. For this, we use a so-called AEROS5P approach 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 and refractive index, along with meteorological parameters from meteorological analyses (ECMWF), surface albedo properties, and a unique a priori aerosol vertical profile. The initial version of AEROS5P was able to monitor the 3D distribution of biomass burning aerosols over Australia, which is a single aerosol type (Lemmouchi et al., 2022).

In this study, we present a new version of AEROS5P for deriving the 3D distribution of several aerosol types present in the same atmospheric scene, from both anthropogenic and natural origins. This is done by taking for each TROPOMI pixel the co-localised aerosol type from the VIIRS aerosol product and then processing it with an associated aerosol model of microphysical and optical properties. These aerosol properties are taken from an AERONET sun photometer inversion climatology (Dubovik et al., 2002). This new multi aerosol type AEROS5P method is used for studying dust transport from North Africa, urban pollution from the Paris region, and smoke aerosol transport from South France during the ACROSS campaign. These results are compared against total aerosol extinction from MODIS, vertical aerosol backscatter from CALIOP, airborne and ground-based measurements of aerosol composition, optical and microphysical properties performed in the framework of ACROSS.

References:

Cantrell, Christopher, and Vincent Michoud. "An Experiment to Study Atmospheric Oxidation Chemistry and Physics of Mixed Anthropogenic–Biogenic Air Masses in the Greater Paris Area." *Bulletin of the American Meteorological Society* 103.8 (2022): 599-603.

Dubovik, Oleg, et al. "Variability of absorption and optical properties of key aerosol types observed in worldwide locations." *Journal of the atmospheric sciences* 59.3 (2002): 590-608

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.

MOTS CLÉS : PM pollution, 3D, ACROSS, dust, forest fire

TITLE: POLYVINYLTRIAZOLE-FUNCTIONALIZED SWCNT INK FOR PRINTING OF ARSENIC (III) CHEMISTOR FOR APPLICATION TO TAPWATER MONITORING

AUTHORS

Leshan USGODAARACHCHI, Balakumara VIGNESH, Benoît PIRO and Bérengère LEBENTAL

LABORATOIRE

IMSE (Laboratoire Instrumentation, Modélisation, Simulation Et Experimentation) - Université Gustave Eiffel
ITODYS (Interfaces – Traitement – Organisation et Dynamique des Systèmes) – Université Paris Cité

ABSTRACT

Though arsenic is the 20th most abundant element on earth, WHO recommends only 10ppb in drink water, because long-term exposure to water contaminated above this threshold can cause serious health problems, including cancer. Arsenic contamination in drinking water is a serious issue tens of millions of people in worldwide were affected by arsenic-contaminated water.

The development of a low-cost, user-friendly transduction method for arsenic will allow for on-site testing and real-time monitoring of arsenic contamination in water sources, which will help reduce people's exposure. The EU-India Lotus project aims to create such a solution. It will be included in a low-cost, portable, and simple real-time electrical sensor array monitoring pH, chlorine concentration, arsenic concentration, conductivity, and temperature. For pH, chlorine, and arsenic, the transduction strategy is based on functionalized single-walled carbon nanotubes (SWCNT) chemistors. SWCNT has strong intrinsic sensitivity to a wide range of chemicals but lacks selectivity. In LOTUS, polymer functionalization of SWCNT is used to achieve selectivity.

In this work, an ink based on Polyvinyltriazole (PVT118)-functionalized SWCNT was developed and studied for arsenic sensing. First, the ink was intensively characterized by UV-Vis to assess its stability. Then the ink was printed on interdigitated electrodes on Kapton using inkjet printing technology by using KELENN DMD100, then annealed. A batch of 10 devices was fabricated by inkjet printing and achieved mean, standard deviation, and coefficient of variation of 109 k Ω , 28.75 k Ω , and 27%, respectively. This is a relatively low standard deviation for carbon nanotube resistors. The parameter of printing (traveling and printing pressure, traveling and printing speed, and printing temperature) were optimized to achieve this result. Before the printing, the ink contact angle on the substrate was measured. After printing, the thin film morphology was examined using an optical microscope.

Six sensors were assembled into a Lotus sensor head assembly for characterization, including two pristine SWCNT sensors, two polyfluorenes (FFUR) functionalized-SWCNT sensors, and two PVT118 functionalized SWCNT sensors. The two pristine SWCNT sensors and two FFUR functionalized-SWCNT sensors are sensitive to pH and chlorine. They serve as reference sensors and are not expected to respond to arsenic. The sensor head is connected to the analog front end (AFE) which excites the sensors one after the other continuously and measures their responses.

Upon exposure to arsenic (III), PVT118 functionalized SWCNT sensors displayed changes in their resistance. Between 20 to 90 ppm, we observed for one sensor a linear response of 61 Ω /ppm and a linear regression coefficient of 0.98. The limit of detection was below 10 ppm. Work is presently ongoing to decrease the limit of detection down to the ppb level.

MOTS CLÉS : Single-walled carbon nanotubes (SWCNT), Arsenic sensing, Inkjet printing, functionalized SWCNT, chemistors

TITRE : ETUDE DE MATERIAUX A CHANGEMENT DE PHASE PAR ANALYSE THERMIQUE

AUTEURS

Lydia FERDJALLAH, Magali FOIS, Laurent IBOS

LABORATOIRE

Univ Paris Est Créteil, CERTES, F-94010 Créteil, France

RÉSUMÉ

Avec la croissance démographique, les besoins en énergie dans le monde ne font qu'augmenter et face à une diminution des ressources et un dérèglement climatique qui s'accélère des solutions pérennes doivent être trouvées. Les principales sources d'énergie reposent aujourd'hui sur l'utilisation de combustibles fossiles, dont les quantités sont limitées. Le principal inconvénient de l'utilisation excessive des ressources fossiles est l'émission élevée de CO₂, qui contribue au réchauffement climatique à l'origine des îlots de chaleur urbaine.

Afin de lutter contre les îlots de chaleur urbains, les matériaux à changement de phase peuvent être utilisés pour refroidir les surfaces des infrastructures urbaines, nos travaux se limitent au refroidissement de zones de circulation douces ou piétonnières en utilisant un échangeur de chaleur.

Dans cet article, nous avons caractérisé trois types de paraffines dont les températures de fusion sont de 28, 31 et 35°C afin de choisir les paraffines dont les températures de fusion et de cristallisations seront les plus adaptées. Les enthalpies de fusion et de cristallisation ont été mesurées en DSC. La RT28HC stocke le plus d'énergie avec une enthalpie de fusion de 253 J/g, viennent ensuite la RT35HC et la RT31 avec 236 J/g et 144.7 J/g (à 10°C/min). Les températures de cristallisation dépendent de la vitesse de refroidissement, il existe plusieurs pics de cristallisation pour toutes les paraffines.

Pour toutes les paraffines on observe deux phénomènes distincts lors de la cristallisation, l'existence d'une phase intermédiaire dite rotator phase est à l'origine du dédoublement du pic de cristallisation. Dans les paraffines en général, les rotator phase existent entre la phase liquide isotrope et la phase ordonnée à basse température.

La microencapsulation des paraffines conduit à l'augmentation du nombre de rotator phase et par exemple pour la PCM28-S50 on observe trois pics de cristallisation distincts ce qui élargit la gamme de température de cristallisation. L'encapsulation est donc un frein à la recristallisation et diminue l'enthalpie de fusion. L'étude des 3 paraffines microencapsulées a également été réalisée, la position et la forme des pics de cristallisation n'est pas toujours reproductible.

Ces températures et enthalpies seront utilisées ultérieurement pour modéliser les transferts de chaleur dans les composites Paraffine-Matériaux classique d'ingénierie civile urbaine.

Afin de déterminer la gamme de températures dans laquelle les paraffines peuvent être exploitées, les températures de dégradation ont été mesurées en Analyse ThermoGravimétrique.

Les résultats ont montré que les paraffines ont une bonne stabilité thermique pour l'application prévue. Le principal inconvénient des paraffines est leur faible conductivité thermique. Les mesures de conductivité et diffusivité thermiques ont également été réalisées.

[1] Global Energy & CO2 Status Report 2017; International Energy Agency 2018.

[2] M. K. Rathod, Phase change materials and their applications, Phase Change Materials and Their Applications (2018), 37-57.

[3] D. Fu, Y. Liu, et al., « Confined crystallization of binary n-alkane mixtures : stabilization of a new rotator phase by enhanced surface freezing and weakened intermolecular interactions, Phys. Chem. Chem. Phys., 2011, 13, 15031-15036.

[4] N. Sahan, M. Fois, H. Paksoy, «Improving thermal conductivity phase change materials- a study of paraffin nanomagnetite composites », Solar Energy Materials & Solar Cells, 137 (2015) 61-67.

MOTS CLES : MATERIAUX A CHANGEMENT DE PHASE, STOCKAGE D'ENERGIE, ILOTS DE CHALEUR

TITRE : ÉTUDE DE LA DEGRADATION DE PERFORMANCE D'UN MODULE PHOTOVOLTAÏQUE EN SILICIUM MONOCRISTALLIN EN CONDITIONS EXTERIEURES

DOCTORANT : Yamoussa TOURÉ

Encadrant : Mahamadou Abdou TANKARI (MCF génie électrique)

Directeur : Pierre-Olivier LOGERAIS (MCF HDR énergétique)

LABORATOIRE

Univ Paris Est Créteil, CERTES, F-94010 Créteil, France

RÉSUMÉ

Les systèmes photovoltaïques en conditions extérieures subissent des dégradations tout au long de leur durée de vie. La détérioration des modules PV engendre une réduction de la puissance électrique produite à des degrés différents suivant la sévérité du climat. Il est important de quantifier l'impact du vieillissement sur la performance d'une installation PV pour prévoir sa production effective dans le temps et envisager sa maintenance préventive. Il est aussi nécessaire de mettre en place des outils d'analyse pour mesurer l'évolution de performance suivant les paramètres climatiques et les relevés de monitoring. Par exemple, afin d'étudier l'efficacité d'un système de production d'énergie photovoltaïque, la norme européenne 61724 de la commission électrotechnique internationale (CEI) précise des lignes directrices pour les mesures, les échanges de données et les analyses destinées à la surveillance et à la détermination des performances électriques. Ne décrivant la performance des composants directs, celle-ci se concentre plus précisément sur l'évaluation des performances d'un générateur en tant que partie d'un système fournissant un résumé de performances adaptées à la comparaison d'installation photovoltaïque de différentes tailles fonctionnant sous différents climats. Notre étude concerne un module photovoltaïque installé sur la plate-forme de l'observatoire SIRTÀ à Palaiseau, de technologie silicium monocristallin et de puissance crête 244 Wc. Les données de production du module sont disponibles pour une période de cinq mois sur trois années différentes 2017, 2018 et 2019. Une interface graphique qui permet l'analyse et la visualisation des données des productions du module étudié a été réalisée. L'évolution montre une diminution de performance globale du module de 0,20%/an pour l'échantillon des jours choisis, une augmentation de la résistance série de 0,257%/an, une diminution de la résistance parallèle de 0,023%/an, une dégradation du courant maximale de 0,229%/an, une augmentation de la tension maximale de 0,002%/an et une diminution de la puissance maximale de 0,226%/an.

TITRE: CHARACTERIZING AND SIMULATING SMALL-SCALE WIND VARIABILITY FOR WIND TURBINE TORQUE CALCULATIONS

AUTHOR

Ángel GARCIA GAGO

LABORATOIRE

Laboratoire de Hydrologie Météorologie et Complexité, Ecole des Ponts

ABSTRACT

Wind fields exhibit significant variability in both space and time across a wide range of scales. This inherent variability has a direct impact on the torque experienced by wind turbines and consequently affects wind energy production. The Universal Multifractal (UM) framework offers a powerful approach to characterise and simulate the extreme variability observed in geophysical fields. With only three physically interpretable parameters (α , C_1 and H), the UM framework enables comprehensive analysis and simulation of geophysical fields at different scales. The fourth parameter, the power a of a conservative flux, is absorbed by the empirical estimation of the mean singularity over a non-conservative field.

Accurately simulating 2D spatio-temporal vector fields that capture the actual variability of wind fields presents a major challenge. Our simulation approach combines two classes of stochastic processes, as Levy stable processes and Clifford algebra, to generate simulated fields that cover the spatial dimensions of wind turbines and a duration of seventeen minutes. Input parameters for the simulation are derived from multifractal analysis of high-resolution data collected at two different anemometers located in a meteorological mast. The data is obtained from the RW-Turb measurement campaign (<https://hmco.enpc.fr/portfolio-archive/rw-turb/>), supported by the French National Research Agency (ANR-19-CE05-0022).

To analyze the effects of wind variability we focus on the range 4s-17 min, where we compare the torque obtained from the three modelling chains of increasing complexity. The first chain considers only temporal variability by averaging the wind field and applying it to the hub height. The second chain incorporates both spatial and temporal variability by calculating the torque at each point of the blade and integrating it along the radius for each time step. The third chain utilizes the OpenFAST software developed by the US National Renewable Energy Laboratory (NREL), providing a realistic representation of wind turbine dynamics. We found that the second modelling chain exhibits the strongest fluctuations followed by the first one and OpenFAST.

Author greatly acknowledges the help from Auguste Gires, Daniel Schertzer, and Ioulia Tchiguirinskaia

MOTS CLÉS : wind variability, wind modelling, turbulence, universal multifractals, torque

TITRE : CHATGPT : RISQUES ET OPPORTUNITES POUR LA RECHERCHE

AUTEUR

Jérémy BLEYER

LABORATOIRE

Laboratoire Navier – Ecole des Ponts – Université Gustave Eiffel - CNRS

RÉSUMÉ

L'arrivée sur le devant de la scène de modèles d'IA conversationnelle tels que ChatGPT a récemment mis en lumière à la fois les opportunités que ceux-ci offrent et promettent d'offrir dans le futur, mais également les risques associés à leur utilisation sans recul ou esprit critique. Après un bref éclairage sur le fonctionnement de ces modèles, je discuterai d'un exemple d'utilisation de ChatGPT dans un contexte de programmation scientifique. On montrera en particulier le potentiel offert en termes de gain de productivité dans la programmation d'un code informatique mais également les limites apparaissant pour des problèmes compliqués. Néanmoins, avec quelques bonnes pratiques d'utilisation, les performances de programmation semblent extrêmement prometteuses et suscitent de nombreuses questions sur l'utilisation de tels outils dans un futur proche.

TITLE: ASSESSING THE EFFECTIVENESS OF A LOW-COST MULTIPARAMETRIC SENSOR FOR REAL-TIME WATER QUALITY MONITORING IN A CONTROLLED LAB-SCALE WATER DISTRIBUTION NETWORK

AUTHORS

Balakumara VIGNESH MUPPIDATHI^{1, 2}, Stéphane LAPORTE¹, Yan ULANOWSKI¹, Senthilmurugan SUBBIAH², Bérengère LEBENTAL¹

LABORATOIRE

1. COSYS IMSE Université Gustave Eiffel, France;
2. Water and Energy Nexus Lab, Chemical Engineering Department, Indian Institute of Technology Guwahati, India.

ABSTRACT

Ensuring access to good quality water is crucial for sustainable development, particularly in developing nations. However, the lack of affordable and reliable solutions for monitoring water quality remains a significant challenge. This study focuses on addressing this issue through the LOTUS project (<https://www.lotus-india.eu/>), which introduces a low-cost, compact, and versatile multiparametric chemical sensor for real-time monitoring of chlorine, pH, temperature, and conductivity in potable water.

The proposed solution features a tube-like structure, measuring 21 cm in length and 3.5 cm in diameter. It comprises a replaceable sensor head that integrates temperature sensors, conductivity sensors, and a sensor array of multi-walled carbon nanotube (CNT) chemistors. These CNT chemistors, arranged in random networks between interdigitated electrodes, can be non-functionalized or functionalized with a dedicated polymer [1].

To evaluate its performance, seven units of the LOTUS sensor were tested in the Sense-city facility (located at Université Gustave Eiffel, France - <https://sense-city.iftstar.fr/>), a 44m water loop. Operating conditions included a flow rate of 25 m³/h, pressure of 1 bar, and temperature ranging between 15°C and 20°C, with variations in conductivity (870 µS/cm to 1270 µS/cm) and chlorine levels (0 to 5 mg/L). However, due to high levels of electromagnetic interferences and limited shielding, the sensor signals were noisy, requiring denoising techniques for analysis.

Results showed that the CNT-based chemistors exhibited sensitivity to pH and active chlorine (HClO) with distinguishable responses between functionalized and non-functionalized devices. However, due to the high noise level, the estimation of pH and chlorine had mean absolute errors (MAE) of 0.12 and 0.13 mg/L, respectively. The real-time water temperature estimation achieved a MAE of 0.2°C in flowing water and 0.1°C in static water, based on data obtained from chip 141. Chip AS001 demonstrated a MAE of 73.2 µS/cm for conductivity variations over 80 hours.

Overall, these preliminary results demonstrate the proof of operation of the LOTUS sensor in a realistic environment, albeit with limitations imposed by the high noise level. Future work aims to design a new version of the system to mitigate noise interferences and conduct further testing in the Sense-city facility in 2023.

[1] Cousin, P. et al. (2022). Improving Water Quality and Security with Advanced Sensors and Indirect Water Sensing Methods. Springer Water. https://doi.org/10.1007/978-3-031-08262-7_11

MOTS CLÉS : Multiparametric, Carbon nanotubes, chemistor, Sense-city, realistic validation

TITLE: FUNCTIONAL BIPOROUS POLYMERS AS A VERSATILE FUNCTIONALIZATION PLATFORM TOWARDS SMART (BIO)MATERIALS

AUTHORS

Brian BARBER NUÑEZ, Benjamin Le DROUMAGUET, Benjamin CARBONNIER, Daniel GRANDE

LABORATOIRE

Univ Paris Est Créteil CNRS, ICMPE UMR 7182, 2 Rue Henri Dunant, Thiais F-94320, France

ABSTRACT

Human body is constituted from a complex system of different tissues that must fulfil specific roles for a proper function of the body. Through the increase of population and life expectancy, every year, the need for diverse tissues also increases. The principal limitation of current treatments relies on the scarce of donor's tissue, the immune rejection, and infections [1]. To overcome such shortcomings, artificial tissues have been developed notably from polymeric materials (scaffolds), cells, and growth factors. In this regard, functional porous polymers have found an increasing interest to prepare such scaffolds for implantation into the body [2-3]. Generally, materials implemented to this end are based on biocompatible and biodegradable monoporous polymers; however, the presence of two distinct porosity levels would be beneficial to the cell ingrowth, likely due to improvement in nutrient and waste flow through the material [4]. In this project, we aim at developing novel hierarchically structured, biodegradable, and biocompatible polymeric scaffolds with two porosity levels for tissue engineering applications. The preparation of different series of porous biodegradable materials relies on the free-radical copolymerization of a cyclic monomer, namely 2-methylene-1,3-dioxepane (MDO), with a crosslinking agent, i.e. divinyl adipate (DVA), and a functionalizable monomer, i.e., chloroethyl vinyl ether (CEVE) or azidoethyl vinyl ether (AzEVE) in the presence of two distinct porogenic agents, a 3D template made of sintered and preliminary sieved NaCl particles and n-hexane (double porogen templating approach). Functional MDO-based materials have been successfully prepared with two porosity levels (Fig. 1a) presenting large pores of $\approx 250 \mu\text{m}$ and smaller pores of $\approx 1,8 \mu\text{m}$. Another important factor relies on the biodegradability of the materials; complete degradation of the scaffolds was observed under accelerated conditions (5 wt.% NaOH in ethanol) in 15 min while they were stable in PBS for more than 3 months (Fig. 1b). Interconnectivity of the porosity levels was evidenced by the synergic effect on water uptake in biporous materials (Fig. 1c) when compared to those of the monoporous materials.

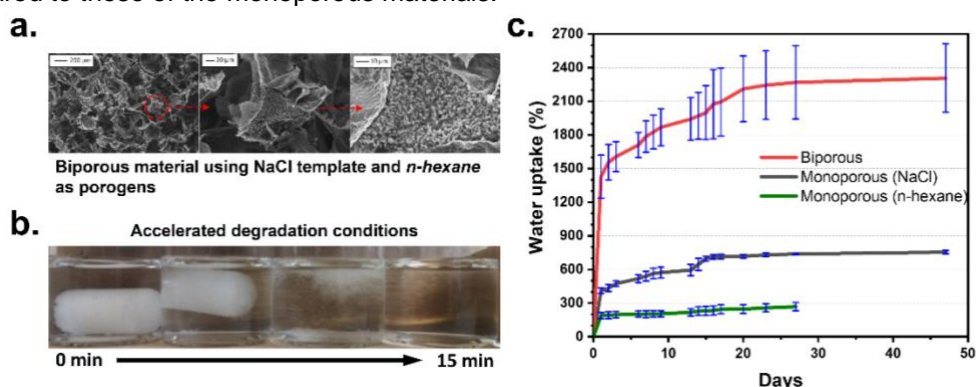


Figure 1. a) SEM pictures of MDO-based biporous materials, b) Degradability tests of the materials in accelerated conditions and c) Water uptake assays

Depending on the targeted application, the functionalization of the pore surface has been assessed with different alkyne or amine-derivatized (macro)molecules, e.g. poly(ethylene glycol), nitrobenzofurazan fluorescent dye or tris(2-aminoethyl)amine, through nucleophilic substitution or Huisgen 1,3-dipolar cycloaddition. The obtained results showed that the presence of azide or chlorine moieties at the pore surface constitutes a versatile functionalization platform for the derivatization of such biporous polymers towards antibacterial activities, supported heterogeneous catalysis or tissue engineering (Fig. 2).

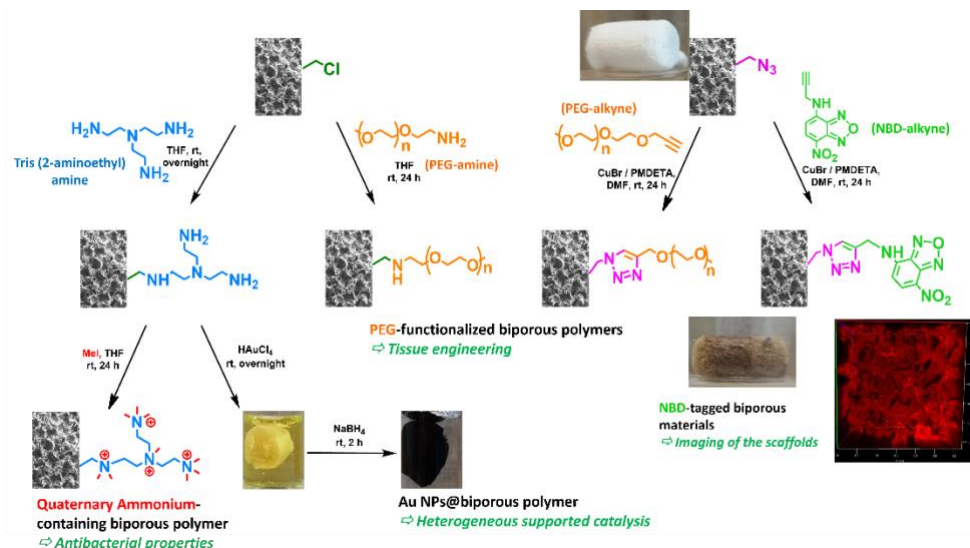


Figure 2. Synthetic pathway implemented for the functionalization of MDO-based biporous materials for various applications.

1. M. C. Socci et al., "Polymeric Materials, Advances and Applications in Tissue Engineering: A Review", *Bioengineering*, 10, 218, **2023**.
2. A. Haider et al., "Advances in the scaffolds fabrication techniques using biocompatible polymers and their biomedical application: A technical and statistical review", *Journal of Saudi Chemical Society*, 24, 186, **2020**.
3. H. B. Ly et al., "Facile fabrication of doubly porous polymeric materials with controlled nano- and macro-porosity", *Polymer*, 78, 13, **2015**.
4. V. Karageorgiou and D. Kaplan, "Porosity of 3D biomaterial scaffolds and osteogenesis", *Biomaterials*, 26, 5474, **2005**.

MOTS CLÉS : Biporous materials, functional polymers, biomaterials, tissue engineering

TITLE: INFLUENCE OF DIFFERENT SUPPORT SYSTEMS ON DRIFTS CLOSURE EVOLUTION IN CALLOVO-OXFORDIAN CLAYSTONE

AUTEURS

Frederico LARA¹, Lina-María GUAYACÁN-CARILLO¹, Jean SULEM¹, Jana JABER², Jan CORNET², Gilles ARMAND²

LABORATOIRE

1. Laboratoire Navier / Équipe Géotechnique, École des Ponts, Univ Gustave Eiffel, CNRS, Marne-la-Vallée, France
2. ANDRA, Laboratoire Souterrain de Meuse/Haute-Marne, Bure, France

ABSTRACT

The French National Radioactive Waste Management Agency (Andra) began the construction of the Meuse/Haute-Marne Underground Research Laboratory in 2000 with the first objective to study the feasibility of radioactive waste deep geological repository in the Callovo-Oxfordian claystone. It was designed as a means to test and optimise the excavation methods for the repository by using different construction methods (conventional tunnelling, TBM) with drifts following the principal horizontal stresses (with $\sigma_h \sim \sigma_v$ and $\sigma_H \sim 1.3 \times \sigma_h$). That generates a large amount of data from in-situ monitoring which permits to analyse the response of the host rock and of different support systems tested. Continuous monitoring revealed the development of a dissymmetrical fractured zone around the drifts induced by the excavation and anisotropic closure of drifts which depends on the drifts' orientations (Armand et al. 2014).

This study aims to analyse in-situ measurements performed on a supported drift, excavated in the direction of the minor horizontal principal stress (Lara et al. 2023). For drifts following this direction, the initial stress state is anisotropic in the cross section plane. This particular drift was divided in distinct sections with different support systems. It is thus of interest to analyse the effect of the installation of compressible wedges in some sections and of the installation of a final rigid concrete lining on the evolution of the drift's closure. Previous studies considered that the observed anisotropic deformation of drifts could be represented by an elliptical evolution of the drift's closure (Guayacán-Carrillo et al. 2016). Then the convergence data is fitted to the equation of the semi-empirical convergence law (Sulem et al. 1987). Following the same approach, the effect of each support system and installation delay on the evolution of the convergence is discussed. Furthermore, extensometers measurements and the stresses on the temporary support are analyzed in different zones of the drift. Finally, the results are compared to those obtained from drifts with similar supported systems.

MOTS CLES : Convergence measurements, Tunnel excavation, Tunnel lining, Deep geological repository, Callovo-Oxfordian claystone.

RÉFÉRENCES

- Armand, G., Leveau, F., Nussbaum, C., de La Vaissiere, R., Noiret, A., Jaeggi, D., Landrein, P., & Righini, C. 2014. Geometry and Properties of the Excavation-Induced Fractures at the Meuse/Haute-Marne URL Drifts. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 47(1), 21–41. <https://doi.org/10.1007/s00603-012-0339-6>
- Guayacán-Carrillo, L.-M., Sulem, J., Seyedi, D. M., Ghabezloo, S., Noiret, A., & Armand, G. 2016. Analysis of Long-Term Anisotropic Convergence in Drifts Excavated in Callovo-Oxfordian Claystone. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 49(1), 97–114. <https://doi.org/10.1007/s00603-015-0737-7>
- Lara F., Guayacán-Carrillo L.-M., Sulem J., Jaber J., Cornet J., & Armand G. (2023). Influence of different support systems on drifts closure evolution in Callovo-Oxfordian claystone, *Proceedings of the 15th ISRM Congress 2023 & 72nd Geomechanics Colloquium, Salzburg*. (Accepted)
- Sulem, J., Panet, M., & Guenot, A. 1987. Closure analysis in deep tunnels. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 24(3), 145–154. [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(87\)90522-5](https://doi.org/10.1016/0148-9062(87)90522-5)

TITLE: NON-COVALENTLY FUNCTIONALIZED GRAPHENE BASED MATERIALS FOR GAS SENSING AND CATALYTIC WATER DECONTAMINATION APPLICATIONS

AUTHORS

M. DIENG^{1,2,3}, F. BOUANIS^{1,3}, B. CARBONNIER², S. MAHOUCHE-CHERGUI², D. GRANDE², A. YASSAR³

¹Univ. Gustave Eiffel, COSYS-IMSE, 77454 Marne-la-Vallée, France

²Univ. Paris Est Creteil, CNRS, ICMPE, UMR 7182, 2 rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France

³Laboratory of Physics of Interfaces and Thin Films, CNRS, UMR 7647, Ecole Polytechnique, IP Paris, 91128 Palaiseau, France

Correspondence: mbaye.dieng@polytechnique.edu or mbaye.dieng@cnrs.fr

ABSTRACT

Due to the increasing extent of environmental pollution, the global warming issue has created a global crisis of air and water quality, becoming one of the main challenges to overcome. To address this challenge, the development of gas sensors to monitor toxic gases and catalytic materials to reduce water pollution is proven as a promising strategy. Thanks to its high electrical conductivity, large specific surface area, and low electrical noise and ability to transport electrons, graphene has become one of the potential and promising material for the development of gas sensors (1) and also a good catalytic material to improve the performance of catalysts (2).

In this study, we first propose the development of a simple NO₂ sensor based film network of functionalized graphene (G) with Co-porphyrin (Co-Por) and Fe-phthalocyanine (Fe-Phc) with improved sensitivity (3). In parallel, we propose an easy method to fabricate an heterostructure based on 'graphene (G)-polyethyleneimine (PEI)-copper nanoparticles (CuNPs)' for use as an efficient and reusable heterogeneous catalyst for the reduction of various organic pollutants.

The graphene-based sensors functionalized by Co-Po (13.1%) and Fe-Phc (8.3%) showed high sensitivities compared to graphene (7.8%) at a concentration of 500 ppb NO₂. G-PEI-CuNPs heterostructures showed a high catalytic activity towards the complete reduction of various hazardous organic micropollutants, such as p-nitrophenol (0.6 min⁻¹), (rhodamine (1.4 min⁻¹), nitropyrene (0.4 min⁻¹), nitrofen (0.04 min⁻¹) and dinitrotoluene (0.05 min⁻¹) in the presence of excess sodium borohydride after a few minutes.

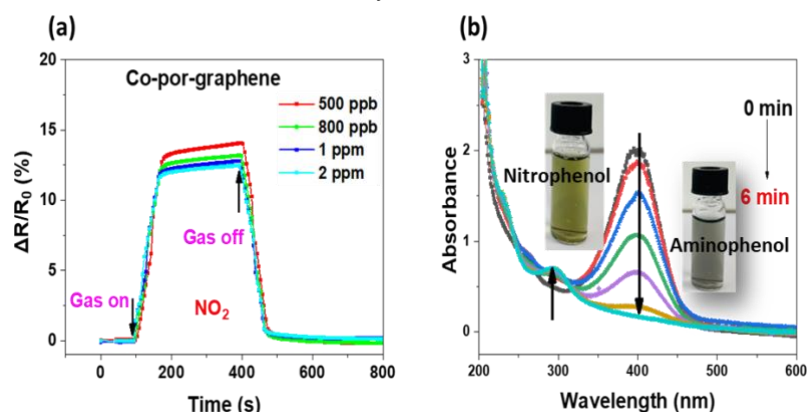


Figure 1) : (a) Co-Por-graphene based sensors respond to NO₂ gas at concentrations ranging from 0.5 ppm to 2 ppm. (b) Results of the kinetic catalysis of nitrophenol in the presence of the G-PEI-CuNPs catalyst

- (1) Schedin F, Geim AK, Morozov SV, Hill EW, Blake P, Katsnelson MI, et al. *Nature Mater.* **2007**, 6, 652–655.
- (2) Mahouche-Chergui S, Oun A, Haddadou I, Hoyez C, Michely L, Ouellet-Plamondon C, Carbonnier B. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2021**, 13, 44673-44685.
- (3) Dieng M, Sankar S, Ni P, Florea I, Alpuim P, Capasso A, et al. *Sensors.* **2023**, 23,1831.

MOTS CLES : graphene, porphyrin, polyethyleneimine, sensor, NO₂, catalyst.

TITRE : DÉVELOPPEMENT D'UN PROTOCOLE D'ANALYSE POUR LA MISE EN PLACE D'UN SUIVI ÉPIDÉMIOLOGIQUE BASÉ SUR LES EAUX USÉES PAR HPLC-MS²

AUTEURS

Gauthier BERNIER_TURPIN ¹, Thomas THIEBAULT ², Vincent ROCHER ³, Sam AZIMI ³ Fabrice ALLIOT ², Régis MOILLERON ¹

LABORATOIRE

¹ Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (LEESU) – ² UMR METIS – ³ Direction Innovation du SIAAP

RÉSUMÉ

L'épidémiologie basée sur les eaux usées repose sur l'hypothèse que l'analyse quantitative de divers traceurs présents dans les réseaux d'assainissements (à travers les matières excrétées) peut servir de reflet des pratiques de consommation et d'exposition des populations concernées. Développée initialement pour le suivi des consommations de drogues illicites (Zucatto *et al.*, 2008), cette approche s'est aujourd'hui élargie à de nombreux composés (produits pharmaceutiques, stress oxydatif, traceurs du bol alimentaire, etc.) pouvant servir de témoins du mode de vie et du bien-être des populations. Ici, le projet ANR EGOUT vise à instaurer un observatoire géochimique à long-terme de l'agglomération parisienne, afin d'étudier les trajectoires socio-économiques et ainsi servir d'outil de prise de décision pour les politiques publiques.

Le présent travail s'attelle à détailler le développement de la chaîne analytique permettant une quantification fiable, dans les eaux usées brutes, d'une soixantaine de traceurs permettant de répondre aux problématiques abordées dans le cadre du projet (santé, bien-être, nutrition...). Le protocole dédié à cette liste de composés présentant des propriétés physico-chimiques très larges repose sur la chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse en tandem (HPLC-MS²), cette technique permettant l'analyse de contaminants organiques à l'état de traces (de l'ordre du ng au µg/L). La nature des échantillons impliquant des matrices complexes et réactives des étapes de traitement sont nécessaires préalablement à l'analyse. L'extraction en phase solide (SPE) est la technique couramment utilisée pour l'analyse des eaux usées (Pico *et al.*, 2021) car elle amène la purification nécessaire pour traiter ce type d'échantillon. Le choix de la phase d'extraction étant dépendante du type de composé à analyser, il s'agit d'un des premiers paramètres à optimiser. Après plusieurs tests, c'est ici la phase universelle HLB qui a été retenue. En ce qui concerne l'aspect chromatographie liquide, la phase inverse est à prioriser pour l'étude de composés modérément polaires (comme, par exemple, les produits pharmaceutiques). Certains traceurs étant de nature très polaires, la chromatographie par interaction hydrophile (HILIC) a un temps été envisagée. Finalement l'utilisation d'une colonne chromatographique standard (type C18) possédant des greffons polaires demeure suffisante pour une élution convenable de l'ensemble des composés ciblés. L'intégralité de la démarche analytique sera détaillée au cours de la présentation.

De plus, les premières chroniques de flux sur les premiers mois d'échantillonnage (mars-mai 2023) seront aussi présentées (cf. figure 1) et commentées au regard des données disponibles dans la littérature spécialisée, permettant ainsi de dégager de premières tendances sur différents traceurs.

Zucatto, E., Chiabrand, C., Castiglioni, S., Bagnati, R., & Fanelli, R. (2008). *Estimating Community Drug Abuse by Wastewater Analysis. Environmental Health Perspectives*, 116(8), 1027-1032. <https://doi.org/10.1289/ehp.11022>

Picó, Y., & Barceló, D. (2021). *Identification of biomarkers in wastewater-based epidemiology : Main approaches and analytical methods. Trends in Analytical Chemistry*, 145, 116465. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116465>

MOTS CLES : Epidémiologie basée sur les eaux usées, traceurs, HPLC-MS², SPE

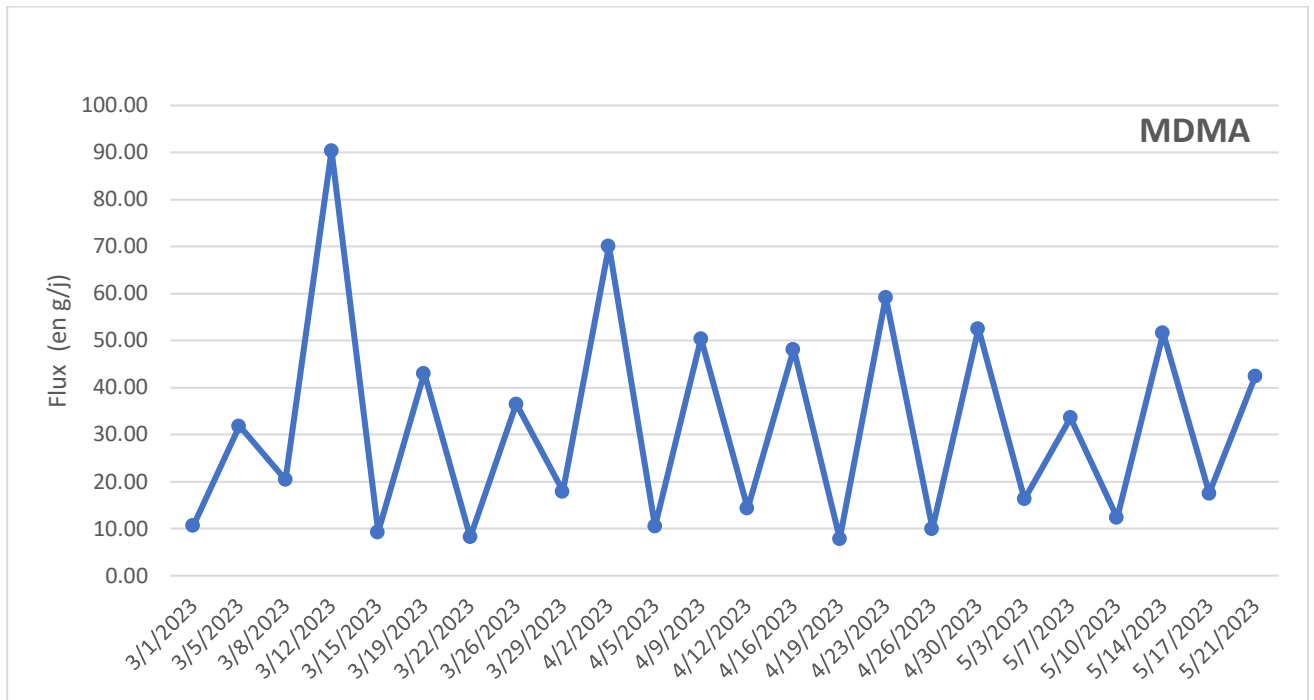


Figure 1 : Flux (en g/j) de MDMA (drogue illicite) à l'échelle de l'agglomération parisienne

TITRE : BIOREACTEUR A MEMBRANE ELECTRO-ACTIVE : COMPREHENSION DES MECANISMES A L'INTERFACE ELECTRODE LIQUIDE

AUTEURS

Flavien TURIN, Yoan PECHAUD, Nihal OTURAN, Mehmet OTURAN, Stéphanie ROSSANO, Clément TRELLE

LABORATOIRE

Laboratoire Géomatériaux et Environnement

RÉSUMÉ

Les eaux usées représentent un réservoir d'eau massif constituant une ressource potentiellement rentable et indépendante des sécheresses saisonnières. Les stations d'épuration ne permettent pas d'atteindre une qualité d'eau suffisante pour sa réutilisation et son retour à un bon état écologique et chimique dans l'environnement aquatique. Mon sujet de thèse s'intègre dans le projet ANR REMemBer visant à développer une technologie durable de traitement des eaux usées en intégrant des membranes électro-actives dans un bioréacteur à membrane. L'électro-activité du matériau a pour objectif d'améliorer la qualité chimique et microbiologique de l'eau ainsi que de limiter la problématique du colmatage membranaire lors de la séparation de la biomasse et de l'eau traité.

Premièrement, nous avons sélectionné des matériaux poreux en Ti_4O_7 comme électrode. Une collaboration avec l'Institut Européen des Membranes de Montpellier a permis la synthèse de différents échantillons. Ces derniers ont été caractérisés électrochimiquement par voltampérométrie cyclique et linéaire, nous permettant ainsi de déterminer leur surface électro-actives et leurs propriétés pour la réaction d'évolution de l'oxygène. Ce travail permettra de sélectionner le matériau optimal pour sa mise en place au sein du réacteur.

Ensuite, nous avons évalué l'efficacité d'un matériau en Ti_4O_7 pour le traitement électrochimique d'une solution synthétique représentative d'un effluent de BRM. Une série d'expériences a été réalisée en réacteur discontinu afin de comparer notre matériau avec une électrode en diamant dopé au bore et une électrode en RuO_2/IrO_2 (Fig. 1). Pour cela, l'abattement de la DCO (initialement à 24 mg/L, de l'ordre d'une sortie de BRM), du COT et de la concentration en acide téréphtalique (molécule modèle) ont été suivis en fonction de la densité de courant appliquée (1, 3 et 6 mA/cm²). Ces expériences ont aussi permis de quantifier la formation des chlorates (Fig. 2) et des perchlorates (sous-produits indésirables) en fonction de la concentration initiale en chlorures (20, 100 et 300 mg/L).

Enfin, une dernière série d'expériences consistait à mettre en place le matériau d'électrode poreux dans un réacteur immergé, en flux continu, proche du système industriel. L'objectif de ces expériences est d'identifier et quantifier les phénomènes clés pour la mise en place de ce type de procédé. Dans cette optique, la dégradation de la matière organique ainsi que l'évolution du débit ont été suivies

Nos résultats nous ont ainsi permis de quantifier l'efficacité des différentes électrodes et de les comparer entre elles tout en mesurant la formation de sous-produits néfastes.

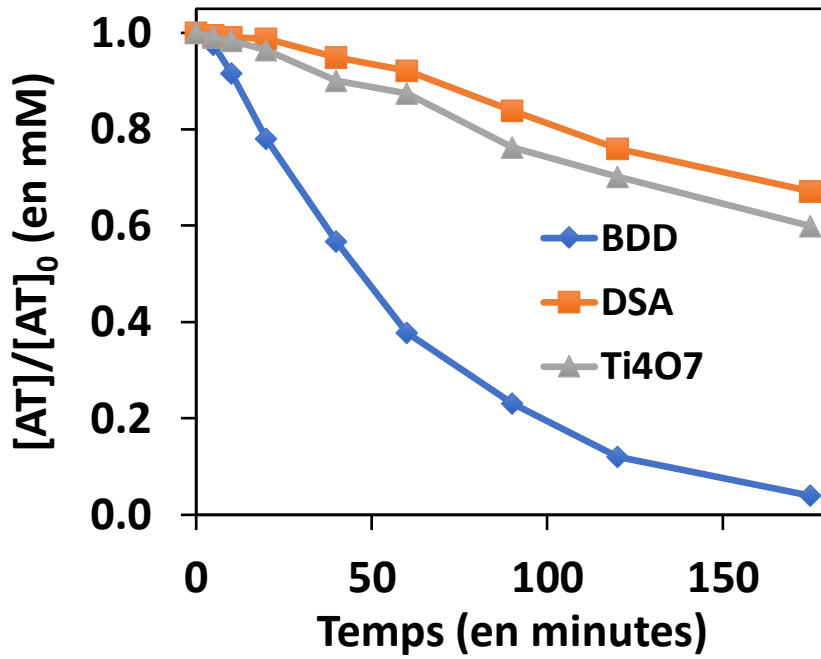


Figure 1 : Evolution de la concentration en acide téréphthalique (AT) au cours du temps en utilisant différents types d'électrode ($I = 72 \text{ mA}$)

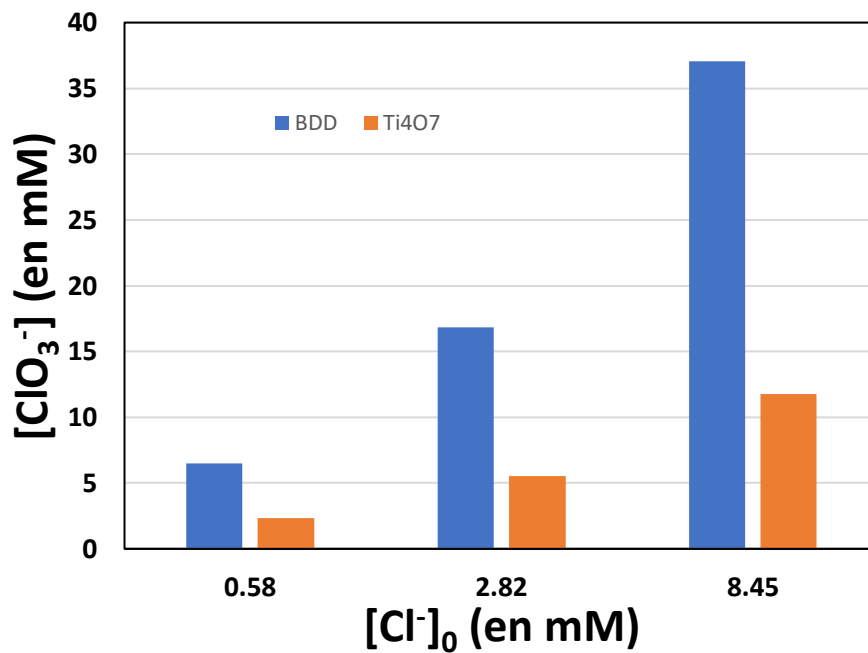


Figure 2 : Concentration en chlorates formés en fonction (i) de la concentration initiale en chlorures et (ii) du matériau d'électrode utilisé ($I = 72 \text{ mA}$; temps de traitement de 175 min)

MOTS CLES : Eaux usées – Ressource en eau – Technologie durable – Traitement électrochimique – Membrane électroactive – Matériaux poreux