

JOURNÉE SCIENTIFIQUE  
**25 JUIN 2021**

2 PRIX :  
MEILLEURES  
COMMUNICATIONS

# ÉNERGIE ET DÉVELOPPEMENT DURABLE

**INSCRIPTION  
GRATUITE  
OBLIGATOIRE !**

En partenariat avec



**Comité d'organisation :**

Christelle BÉROL (ED SIE), Dahia CHIBOUTI (MSME),  
Julie FOUILLOUX (ICMPE), Paul REGNAULT (MSME),  
Fidji SANDRE (LEESU), Mohamed TELMOUDI (LISIS)

**APPEL À  
COMMUNICATIONS  
JUSQU'AU 07 JUIN 2021**

Information et programme :

**WWW.PARIS-EST-SUP.FR/JOURNEE-SCIENTIFIQUE-SIE**

25  
06

## Programme journée scientifique – 25 juin 2021

**8h45** Ouverture par M. Alexandre MAITROT DE LA MOTTE  
*Président Université Paris Est*

**9h00** **Conférence de Mme Myriam SAADE**  
*Chargée de Recherche EMGCU, Université Gustave Eiffel*

9h25 Fannie LE FLOCH ICMPE p.2

9h40 Sebastián LÓPEZ RETAMALES NAVIER p.3

9h55 Fidji SANDRE LEESU p.4

10h10 Natalia ANGELOTTI LEESU p.5

**10h25-11h** **Pause**

**11h00** **Conférence de M. Michel LATROCHE**  
*Directeur de Recherche ICMPE*

11h25 Insaf ECHERRADI NAVIER p.6

11h40 Estephanie ALHAJJ MOUSSA LISA p.7

11h55 Ambre DELATER LISA p.8

12h10 Hector GALANTE AMINO CEREAL p.9

**12h25-14h** **Pause**

**14h00** **Conférence de Mme Isabelle BOUESSAY**  
*Directrice Technique, Zinium*

14h25 Maxime DECHESNE LEESU p.10

14h40 Dahia CHIBOUTI MSME p.11

14h55 Léo DELMARRE EMGCU p.12

15h10 Lamia REBIAI ICMPE p.13

**15h25** **Conférence de Mme Valentina VALBI**  
*Lauréate du prix L'OREAL-UNESCO*

15h45 **Clôture et remise des prix**

## Titre : Nanocapsules biosourcées, stimuli-répondantes et déformables : une approche innovante pour la thérapie génique

### AUTEURS

Fannie Le Floch, Benjamin Carbonnier, Sabrina Belbekhouche

### LABORATOIRE

Université Paris Est, ICMPE (UMR 7182), CNRS, UPEC, F-94320 Thiais, France

### Résumé

Certains composés chimiques à fort potentiel thérapeutique ne peuvent être exploités du fait de leurs propriétés physico-chimiques, qui restreignent leur devenir in vivo. Leur piégeage au sein de vecteurs particulières type « principe actif/transporteur » et répondant à un environnement spécifique, permet de les administrer efficacement et durablement tout en réduisant ainsi les risques toxiques liés à leur délivrance systémique.

Dans ce contexte, de nouveaux nanovecteurs ont été développés via des procédés physico-chimiques simples, efficaces et industrialisables. Sur un gabarit de taille contrôlée, des polymères de charge opposée sont successivement adsorbés via des interactions électrostatiques pour former le vecteur. Le gabarit est ensuite sélectivement retiré pour obtenir des vecteurs déformables, appelés « capsules » (Figure 1) [1]. Le contrôle des conditions physico-chimiques au sein de cet assemblage multicouche a un impact direct sur l'efficacité thérapeutique. En effet, la déformabilité des vecteurs améliore l'incorporation des vecteurs dans les cellules où la molécule thérapeutique est spécifiquement libérée sous l'effet d'un stimuli.

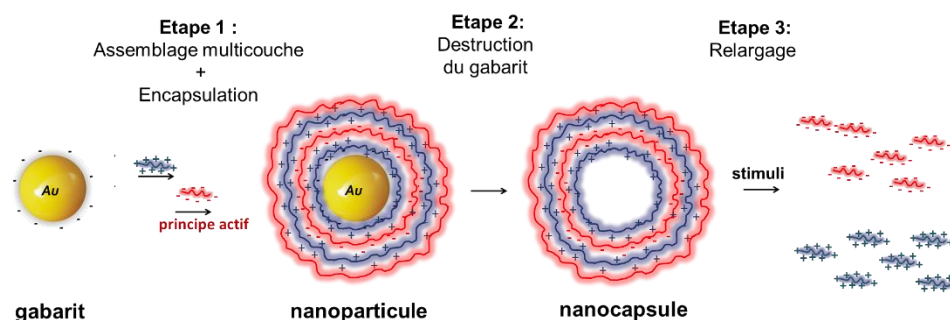


Figure 1 : Processus d'élaboration de vecteurs thérapeutiques. En bleu, le polycation et en rouge, le polyanion. L'ADN est à la fois le polyanion et le principe actif. Il est piégé lors de l'assemblage multicouche et est relargué sous l'effet d'un stimulus. La caractéristique « stimuli-répondant » et la déformabilité des vecteurs est contrôlée via la thiolation du chitosan via l'ajout de liens entre les couches de l'assemblage.

Les polysaccharides, macromolécules biocompatibles et biodégradables, apparaissent comme des candidats d'intérêt pour la construction de ces vecteurs. Le chitosan en particulier est chargé positivement et comporte des fonctions chimiques aisément fonctionnalisables. [2] Dans le cadre de ce projet, une stratégie avec une unique étape de modification chimique du chitosan apporter à la fois le caractère « stimuli-répondant » et déformable afin d'améliorer la pénétration des vecteurs dans les cellules où la molécule thérapeutique est spécifiquement libérée.

**MOTS CLÉS** : chitosan – vecteur thérapeutique – déformable – délivrance contrôlée

[1] H. Sun, F. Caruso, *Chemical Science*, **2015**, 6, 3505

[2] J. Oniszczuk, S. Belbekhouche, *Nanocapsules*, *Chemical Engineering Journal*, **2020**



## Titre : Dynamic Driving Analysis for Penetrometers in Sandy Soil

### AUTEURS

Sebastián LÓPEZ RETAMALES

### LABORATOIRE

Laboratoire NAVIER, Ecole des ponts ParisTech

### Résumé

Dynamic penetration equipment allow in situ tests to be carried out quickly and economically, however, the analysis and interpretation of the results may present different values for the same control point due to multiple factors, among which we can mention the characteristics of the equipment, mode of operation and methodologies used in the analysis of the results. For this reason, the establishment of a method of analysis and evaluation based on a general frame of reference would allow obtaining characteristic parameters of the soil, whose magnitude could be independent of the dynamic penetration equipment used and the mode of operation.

The purpose of this presentation is to show the results of the application of a methodology to evaluate the results of a dynamic penetration test based on the evaluation of the dynamic driving by analyzing the waves generated at each impact of the hammer. The method is based on the application of a decoupling technique of incident and reflected waves, the reconstruction of the dynamic signals at the conical tip, and from these the construction of a dynamic stress-strain curve associated to the soil response. Both the dynamic signals and the dynamic curve are analyzed and used for the geotechnical characterization of the soil.

Penetration tests were performed using a light dynamic variable energy penetrometer (PANDA3) on specimens of Fontainebleau NE34 and Hostun HN31 sand, reconstructed in a  $K_0$  calibration chamber. The specimens were reconstructed at different density index levels, and different levels of effective vertical stress were applied to them.

From the dynamic penetration tests, parameters associated with dynamic resistance, elastic response, mechanical impedance and energy used in sand penetration were evaluated. The parameters showed sensitivity to the different boundary conditions imposed.

The results show that the dynamic penetration resistance  $q_d$  is sensitive to the density index and vertical effective stress levels, however, it is not possible to identify and/or differentiate soils using only this parameter, so a multiparametric approach is necessary for the characterization and identification of a soil by means of a dynamic penetration test. This feature would allow more efficient and accurate use of dynamic penetration tests in the solution of various geotechnical problems, such as the evaluation of soil liquefaction potential.

**MOTS CLÉS** : Penetrometer, in situ test, calibration chamber, dynamic penetration test, soil characterization

**Titre :** Evaluation écotoxicologique d'un polluant pharmaceutique (le furosémide) et de ses produits de dégradation.

**AUTEURS**

Fidji SANDRE, Laure GARRIGUE-ANTAR, Christophe MORIN

**LABORATOIRE**

Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (LEESU)

**Résumé**

De nombreux composés pharmaceutiques se retrouvent dans l'environnement en raison d'une élimination incomplète par les stations de traitement des eaux usées (STEU). Certains composés sont parfois présents à des concentrations importantes et représentent alors un risque pour l'environnement aquatique. C'est notamment le cas du Furosémide, un puissant diurétique, parmi les médicaments les plus vendus dans le monde. Il est très fréquemment détecté dans les eaux de surface et des concentrations importantes sont retrouvées en aval de STEU (2 000 ng/L) ou d'hôpitaux (30 000 ng/L). Plusieurs produits de dégradation du Furosémide ont été identifiés : la Saluamine et le Furfural, connus depuis longtemps, ainsi que le Pyridinium du Furosémide (PoF), récemment découvert. Ces composés présentent une toxicité plus importante que le Furosémide sur différents organismes et une étude récente montre que le PoF est capable d'induire des marqueurs biologiques caractéristiques de la maladie de Parkinson à fortes doses dans des modèles animaux. Cependant, la dose utilisée ne permet pas d'extrapoler l'exposition environnementale. L'objectif principal de ma thèse est alors d'acquérir des données sur ces composés pharmaceutiques afin de pouvoir caractériser le risque qu'ils représentent pour l'environnement. Des bioessais sont réalisés sur différents modèles in vitro et in vivo (poisson-zèbre, daphnies, cellules, mitochondries) à des concentrations pertinentes pour l'environnement. Les premiers résultats mettent pour la première fois en évidence un impact du Furosémide à des faibles concentrations (50 ng/L), mais également du PoF sur le comportement des larves de poissons-zèbres et sur leur développement en induisant des torsions du squelette ainsi que des œdèmes. De plus, le PoF inhibe également la chaîne respiratoire mitochondriale à des faibles concentrations (3 ng/L). Ainsi, ces résultats montrent que le Furosémide et le PoF présentent un risque pour les écosystèmes aquatiques. Ce projet souligne l'importance de mieux caractériser les produits de dégradation, parfois plus toxiques que leurs molécules parentales.

**MOTS CLÉS :** Médicament, produit de dégradation, écotoxicité, poisson zèbre, micropolluant émergent

## Titre : Baignade en eau libre : modélisation hydrodynamique et microbiologique pour l'évaluation des risques sanitaires

### AUTEURS

Natalia Angelotti de Ponte Rodrigues, Brigitte Vinçon-Leite, Rémi Carmigniani

### LABORATOIRE

Laboratoire Eau, Environnement et Systèmes Urbains (Leesu)

### Résumé

Dans les grandes villes européennes, la baignade en eau libre est une pratique de plus en plus populaire. A Paris, dans le cadre du programme Paris-Plage, une baignade est ouverte dans le bassin de la Villette depuis l'été 2017. Très fréquentée, elle a reçu en 2019 environ 70 000 baigneurs. Selon la réglementation européenne transposée en droit français, un contrôle des risques sanitaires doit être mis en œuvre. Un indicateur réglementaire des microorganismes pathogènes est l'*Escherichia coli* (*E. coli*), une bactérie indicatrice de contamination fécale. L'analyse de la concentration de cet indicateur peut prendre plus de 10 heures *in situ* et plus de 24 heures au laboratoire.

Dans ce contexte, mon travail de recherche porte sur le suivi et la prévision des conditions sanitaires dans des sites de baignade urbaine, en vue de prévoir leur éventuelle fermeture et sa durée. Le site d'étude est le bassin de la Villette situé dans le nord-est de Paris. Le système a 1500 m de long et une profondeur moyenne de 3 m. Il est composé par le canal de la Villette (largeur 25 m, longueur 800 m) et le bassin de la Villette (largeur 70 m, longueur 700 m). Actuellement, le système de surveillance est composé par une station de mesures microbiologiques située à environ 1000 m en amont de la baignade.

Afin d'estimer le temps de transfert des contaminants microbiologiques entre la station de surveillance à l'amont et la zone de baignade, un modèle hydrodynamique, Telemac3D, est mis en œuvre. Les résultats de température de l'eau et de vitesse de courant sont comparés avec des données de terrain, obtenues à partir de capteurs de mesures en continu et des campagnes régulières.

Les résultats de modélisation thermique ont montré un bon accord avec les températures de l'eau mesurées. En particulier, les écarts de température entre la surface et le fond observés lors des épisodes de forte chaleur sont bien reproduits. La stratification thermique entraîne une hétérogénéité des vitesses d'écoulement selon la profondeur, à l'origine de temps de transfert différents des contaminants. Le risque existe alors d'ouvrir la baignade quand la contamination est encore présente en profondeur.

En parallèle, afin d'avoir une détection des contaminations bactériennes et identification plus rapides d'un risque sanitaire potentiellement élevé, des proxies d'*E. coli* sont cherchés. Les paramètres envisagés doivent être faciles à mesurer en temps réel, permettant une réaction immédiate afin de protéger les baigneurs. Avec cela en vue, l'évolution de la conductivité et de la fluorescence de composés organiques d'origine bactérienne sont étudiés et seront comparés avec les concentrations d'*E. coli* mesurées par le système de surveillance microbiologique.

**MOTS CLÉS** : modélisation Telemac3D, risque sanitaire, baignade, stratification thermique, *Escherichia coli*

## Titre : Fatigue des polycristaux : une analyse probabiliste incluant des descripteurs statistiques des microstructures

### AUTEURS

Insaf ECHERRADI

### LABORATOIRE

Laboratoire Navier de l'école des Ponts ParisTech

### Résumé

La durée de vie des structures étant essentielle doit être correctement prédite en fonction des chargements en partie aléatoires. Cependant, les phénomènes de fatigue dans les polycristaux sont eux aussi probabilistes : pour un même chargement cyclique, deux éprouvettes macroscopiquement identiques ont en général des durées de vie différentes. Ceci provient du fait que les microstructures présentent une certaine variabilité.

L'approche traditionnelle consiste à établir expérimentalement des courbes S-N, qui relie le nombre de cycles à rupture et l'amplitude du chargement cyclique. Du fait de la nature aléatoire des phénomènes de fatigue, cette procédure expérimentale doit être répétée sur un grand nombre d'éprouvettes pour être statistiquement représentative. On considère en général (Eurocode-3) que la prédiction sécuritaire de la durée de vie pour un niveau de chargement donné se situe à la moyenne du nombre de cycles à rupture moins deux fois l'écart-type. Non seulement cette approche est extrêmement lourde en termes d'efforts expérimentaux, mais elle est aussi insuffisante du point de vue de l'analyse des risques.

L'ambition principale du projet est alors de développer une approche entièrement probabiliste, qui permette de quantifier les densités de probabilité de rupture en fonction de la microstructure ainsi que l'histoire du chargement. Le premier pas vers la réalisation de cette approche est de construire tout d'abord un modèle de polycristal avec rupture, suffisamment rapide en temps de calcul pour permettre ce genre d'analyse.

Le modèle mésoscopique qu'on propose arrive à relier les paramètres descriptifs de la microstructure (la distribution des orientations cristallines, la taille du grain...) à la probabilité de survie à N cycles du chargement. Sa réalisation est basée sur la résolution du problème d'inclusion d'Eshelby en espace infini et semi-infini ainsi que sur des calculs énergétiques en plasticité cristalline dans des tessellations orientées générées par le logiciel NEPER et traitées sur SCILAB.

Plusieurs hypothèses ont été mises en place afin de simplifier le modèle sur SCILAB, pour valider ou encore déterminer ses bornes limites en le comparant à un modèle d'éléments finis (Modèle de plasticité cristalline dans les polycristaux sur Freefem). Ce dernier renvoie la valeur du glissement plastique pour chaque point de la tessellation étudiée et l'erreur entre les deux modèles est tracée en fonction des paramètres microstructuraux (Orientation cristalline des grains, taille des grains, distance entre grains mal orientés...) et analysée. Des applications pour des tessellations à orientations aléatoires plongés dans des matrices infinies sont présentées à la fin avec un nombre de grain représentatif (500 grains).

On arrive ainsi à prédire dans un volume élémentaire représentatif donné et pour un chargement connu le grain qui plastifie et se rompt en premier ainsi que sa durée de vie avec une erreur acceptable.

Les prochaines étapes envisagées pour l'approche probabiliste seront de d'abord appliquer le modèle pour différentes textures morphologiques et cristallographiques, respectant bien sûr les bornes limites retrouvées, pour non seulement établir une courbe de Wöhler statistique mais pour construire également une base de données et puis, à l'aide d'une identification Bayésienne, d'instituer un modèle de probabilité de survie.

**MOTS CLÉS** : Fatigue, polycristal, plasticité cristalline, orientation cristalline

## Titre : Impact de mélanges d'air d'origine anthropiques et biogéniques sur la chimie organique atmosphérique

### AUTEURS

Estéphanie ALHAJJ MOUSSA

### LABORATOIRE

Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA)

### Résumé

L'augmentation continue de la population mondiale est responsable d'une énorme utilisation de sources organiques qui se traduit par l'émission d'une myriade d'espèces de gaz traces dans l'atmosphère, parmi lesquelles nous citons les Composés Organiques Volatils (COV). Ces composés peuvent soit être directement rejetés dans l'air, à la fois par des sources anthropiques (émissions anthropiques) et des émissions naturelles (émissions biogénique), soit résultant d'un transport à longue distance et d'une transformation chimique de ces dernières.

Les panaches urbains sont marqués par des niveaux élevés d'oxydes d'azote (NO<sub>x</sub>), qui proviennent principalement des secteurs de combustion, et sont dominés par les COV anthropiques. Pourtant, les zones rurales/forestières se distinguent par des niveaux inférieurs de NO<sub>x</sub> et de COV biogéniques. Par conséquent, l'évolution chimique des COV est basée sur différents régimes d'oxydation qui dépendent de la région d'intérêt.

Cependant, la plupart des campagnes de terrain s'est concentrée soit sur des atmosphères urbaines (ex. ESQUIF 1998-2000 ; MEGAPOLI 2009-2010 en France) soit sur des zones éloignées/forestières (ex. LANDEX 2017 en France ; CABINEX 2009 aux USA), avec seulement quelques campagnes se concentrant sur des zones où les émissions anthropiques et naturelles sont mélangées.

Mon projet de thèse s'inscrit dans le cadre du projet ACROSS (Atmospheric Atmospheric ChemistRy Of the Suburban forest), récompensé par la bourse de recherche française 'Make Our Planet Great Again' (MOPGA) et financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR). Ce projet vise à comprendre l'impact de l'interaction entre le panache urbain de Paris avec les émissions naturelles de la forêt de Rambouillet sur la chimie atmosphérique à l'été 2022.

Mon sujet de thèse vise à identifier et quantifier les COV oxygénés (COVO) émis et formés sur le site de Rambouillet, et plus encore, les molécules fortement oxydées, sous les différents régimes d'oxydation. Afin d'atteindre ces objectifs, je travaillerai, au cours de mes années de recherche académique, principalement avec deux instruments analytiques, mesurant en continu et en ligne, le PROTON TRANSFER REACTION TIME OF FLIGHT MASS SPECTROMETRY (PTR-TOF-MS) et un nouvel instrument, ATMOSPHERIC PRESSURE INTERFACE TIME OF FLIGHT CHEMICAL IONIZATION MASS SPECTROMETRY (API-ToF-CIMS), qui sont tous deux des instruments d'analyse complémentaires qui couvrent plus ou moins toute la gamme des classes d'OVOC. Au-delà de tout, les deux instruments sont basés sur une ionisation chimique douce, où un ion réactif est produit et réagit avec la molécule organique par transfert/abstraction de protons ou formation d'adduit, où une fragmentation minimale se produit avec une préservation de la composition parentale de la molécule.

Un protocole d'étalonnage, de caractérisation, de traitement et d'analyse des données seront définis pour les deux instruments afin de les préparer aux mesures de la campagne principale au site de la forêt de Rambouillet en été 2022.

Les résultats peuvent contribuer à révéler de nouvelles voies d'oxydation des COV, ainsi qu'une publication de plusieurs articles scientifiques. De plus, elles peuvent aider à améliorer les modèles de la qualité de l'air.

**MOTS CLÉS** : Chimie Atmosphérique, COVO, Instruments analytiques, Panache urbain, Emissions biogéniques.



## Titre : Développement d'une méthode de prélèvement *in situ* d'aérosols en vue de l'évaluation des réponses pulmonaires induites : retour d'expérience de 2 campagnes de terrain

### AUTEURS

Ambre Delater<sup>1</sup>, Brice Berthelot<sup>1</sup>, Laurent Meunier<sup>1</sup>, Sébastien Fable<sup>1</sup>, Matheus De-Mendonca-Andrade<sup>1</sup>, Olivier Le Bihan<sup>1</sup>, Jessica Queron<sup>1</sup>, Ghislaine Lacroix<sup>1</sup>, Manon Plumail<sup>1</sup>, Christelle Gamez<sup>1</sup>, Maxime Floreani<sup>1</sup>, Isabelle Coll<sup>2</sup>

### LABORATOIRE

<sup>1</sup>INERIS, Institut Nationale de l'Environnement industriel et des Risques

<sup>2</sup>LISA, Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques

### Résumé

Au cours d'une journée, un voyageur va être exposé à la pollution particulaire, en passant à travers un ou plusieurs microenvironnements, c'est-à-dire des espaces où la concentration en polluants est considérée comme homogène ou ayant une variation prévisible (e.g. wagon, parking) [1]. D'un microenvironnement à l'autre, les particules auxquelles est exposé le voyageur peuvent varier fortement. Par exemple sur quai, en enceintes ferroviaires souterraines, des concentrations en PM<sub>10</sub> (particules de diamètre < 10 µm) ont été mesurées entre 13 et 1284 µg/m<sup>3</sup> [2]. Ces particules peuvent être étudiées *via* une caractérisation physique (e.g. détermination de la taille, de la concentration des particules) ou chimique. Cependant, un enjeu demeure autour des études toxicologiques *in vitro* afin d'appréhender les effets toxiques de ces particules. En effet, la méthode de référence pour le prélèvement des particules utilise comme support de prélèvement un filtre, ne permettant pas de désorber les particules de manière satisfaisante avant exposition sur les cellules (e.g. modifications physico-chimiques des particules [3]).

L'objectif de la thèse est de développer et valider une méthode de prélèvement qui permettrait de collecter les particules sur un média plus adapté que le filtre pour des analyses *in vitro* sur des cellules pulmonaires humaines. Cette méthode devra (i) être facile à mettre en œuvre dans des microenvironnements, (ii) collecter suffisamment de matière pour permettre d'observer des effets sur les cellules, et (iii) prélever représentativement la fraction alvéolaire dans l'atmosphère (i.e. les particules de diamètre < 4 µm).

La première partie de mon travail a été d'effectuer une étude bibliographique sur le sujet. Les résultats de l'étude ont mis en évidence une catégorie de préleveurs permettant de collecter les particules sur une autre matrice que le filtre (e.g. directement dans un liquide), les préleveurs de bioaérosols. Cependant, leur efficacité de prélèvement est souvent inconnue. Les travaux de thèse vont consister ainsi à tester ces préleveurs en conditions réelles en bénéficiant des campagnes de terrain du projet TOXInTRANSPORT<sup>1</sup>, puis à les évaluer en laboratoire pour caractériser leur efficacité.

Deux technologies différentes ont été choisies : (a) le Coriolis Micro, un cyclone en voie liquide et (b) le Coriolis Compact, un cyclone en voie sèche (Bertin Instruments). Les Coriolis ont été déployés lors de 2 campagnes de terrain, en quai de gare ferroviaire souterraine et dans un wagon de train. Lors de ces essais, des instruments évaluaient en parallèle la concentration, la taille et la forme des particules atmosphériques.

Par la suite, j'ai analysé les échantillons afin de déterminer la concentration particulaire prélevée. Les résultats montrent que les concentrations particulières prélevées par les Coriolis sont supérieures de plus de 2 ordres de grandeur à celles prélevées en parallèle par les méthodes de référence. J'ai mis en place une procédure de désorption des particules qui a permis d'exposer *in vitro* des modèles cellulaires aux échantillons et observer les effets induits. Ainsi, la faisabilité du déploiement des 2 préleveurs en conditions réelles a pu être étudiée, de la mesure jusqu'aux analyses toxicologiques.

La représentativité des échantillons prélevés étant inconnue, la suite de la thèse va consister à développer un protocole d'évaluation d'efficacité de prélèvement de ces technologies en laboratoire.

[1] Duan, N. (1982). Model for human exposure to air pollution. *Environment International* 8: 305-309.

[2] Queron, J. and M. Durif. 2020. Recommandations pour la réalisation de mesures harmonisées de la qualité de l'air dans les enceintes ferroviaires souterraines. Rapport DRC-19-152419-04847A, INERIS, Verneuil-en-Halatte, France. Consulté le 3 juin 2021. <https://www.ineris.fr/fr/recommandations-realisation-mesures-harmonisees-qualite-air-enceintes-ferroviaires-souterraines>

[3] Marvanova, S., P. Kulich, R. Skoupy, F. Hubatka, M. Ciganeck, J. Bendl, J. Hovorka, M. Machala (2018). Size-segregated urban aerosol characterization by electron microscopy and dynamic light scattering and influence of sample preparation. *Atmospheric Environment* 178 :181-190.

**MOTS CLÉS** : Particules, pollution de l'air, prélèvement, microenvironnement, toxicologie

<sup>1</sup> « Caractérisations TOXicologiques *in vitro*, chimiques et physiques de particules prélevées dans l'air d'habitacles de TRANSPORT en roulage » – APR IMPACTS ADEME 2018

## Titre : Un algorithme CFD pour l'aéroulque des bâtiments

### AUTEURS

Hector Galante Amino, Martin Ferrand, Cédric Flageul, Bertrand Carissimo

### LABORATOIRE

Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREA)  
EDF R&D, département MFEE

### Résumé

Nous présentons un algorithme de discrétisation en temps conservatif implémenté et validé dans *Code\_Saturne* pour l'aéroulque des bâtiments. Celui-ci entre dans la famille des algorithmes de type prédiction-correction et a été écrit pour répondre aux enjeux de modélisation des écoulements intérieurs : la prise en compte des effets thermiques et de variations de pression locales.

Le schéma conservatif en espace/temps est caractérisé par un processus sous itératif avec un décalage en temps de certaines variables comme la vitesse, rendant variable sa précision en temps (theta schéma), pour des problèmes stationnaires et instationnaires.

La formulation compressible des équations de Navier Stokes est utilisée avec notamment l'équation de l'énergie interne pour le calcul de la température. Celle-ci est complétée par un terme source correctif représentant la dissipation d'énergie cinétique en chaleur, obtenue par le bilan d'énergie cinétique discret. Ce terme permet ainsi la conservation de l'énergie totale et la bonne reproduction de solutions avec des discontinuités.

La variation de pression locale est traitée lors de l'étape de correction de l'algorithme, où un incrément de pression est calculé à partir d'une équation de Helmholtz basée sur la combinaison des bilans de masse et de quantité de mouvement entre deux pas de temps donnés.

Une analyse numérique sur la positivité des variables thermodynamiques du schéma en temps est réalisée menant à deux nouvelles conditions de stabilité de type CFL qui sont calculées et comparées au CFL classique lors de l'étape de vérification et validation.

Le schéma numérique est testé sur des cas représentant les enjeux de modélisation de l'aéroulque. Premièrement, la prise en compte des montées de pression locales est vérifiée avec un cas de type cocotte-minute. Ensuite, un cas de convection naturelle est étudié, où l'algorithme présente des niveaux de pression et nombres de Nusselt en accord avec les résultats de référence. Puis, sa capacité à traiter des solutions discontinues est testé, avec des cas de tube choc, où les bons niveaux de température, pression et vitesse sont retrouvés grâce au terme source correctif dans l'équation de l'énergie interne. Il est également montré que les nouvelles conditions CFL sont de l'ordre de la moitié du CFL matière.

Enfin, le schéma est validé avec un cas de pièce 3D ventilée (Minibat) par un jet turbulent. Une comparaison de simulations RANS et LES est réalisée et les quantités dynamiques moyennes et instantanées sont comparées aux mesures expérimentales.

**MOTS CLÉS** : CFD, AÉROULQUE, COMPRESSIBLE, CHOCS, LES

## Titre : Caractérisation rapide de biodéchets par spectrométrie pour la méthanisation

### AUTEURS

Maxime Dechesne, Gilles Varrault

### LABORATOIRE

Laboratoire Eau environnement et Systèmes Urbains

### Résumé

La valorisation des déchets organiques est devenue un enjeu important depuis la loi de la transition énergétique pour la croissance verte de 2015. L'une des clés pour y arriver est la valorisation des boues par la méthanisation pour la production de biogaz. Cette solution est très intéressante pour la production d'énergie et intéresse un nombre croissant de stations de traitement des eaux usées (STEU). Cependant, afin d'optimiser le processus de méthanisation à l'échelle industrielle et d'en anticiper les dysfonctionnements, la détermination rapide, voire en ligne, des paramètres physico-chimiques et du potentiel méthanogène (BMP) des intrants (notamment lors de la co-digestion) est indispensable.

Pour ce faire, la Spectrométrie Proche Infra Rouge (SPIR) est déjà utilisée et donne des résultats relativement satisfaisants mais nécessite l'analyse d'échantillons de boue déshydratée dont l'obtention peut prendre plusieurs jours. Au contraire, l'analyse d'échantillons liquides est possible en spectrométrie de Fluorescence 3D (SF3D), il est donc possible d'analyser directement le surnageant qui résulte de la centrifugation des boues réalisée en STEP pour les épaissir. Cela présente l'avantage de la rapidité d'analyse voire d'une analyse en ligne. Il est également possible, comme en SPIR, de travailler sur des échantillons déjà déshydratés, il est alors nécessaire de réaliser une extraction à l'eau (ou avec un autre réactif) et d'analyser l'extrait ou de réaliser des extractions successives (séquentielles) du même échantillon de boue afin d'analyser différentes fractions de matière organique plus ou moins facilement extractibles.

Afin de pouvoir comparer l'efficacité de la SPIR et de la SF3D pour déterminer le potentiel méthanogène et également de les combiner ce qui n'a jamais été fait jusqu'ici, nous avons décidé de travailler sur 24 échantillons de boue déshydratées provenant de la banque boues du SIAAP. Ils ont été prélevés à différents points de traitement (décantation, clarification, nitrification, ...) de la STEU Seine Aval. Leur BMP a été mesuré par la méthode de référence (Automatic Methane Potential Test System). Pour l'analyse en SPIR, les échantillons déshydratés ont été broyés au mortier et tamisés à 1mm. Les spectres acquis sont normalisés et traités (dérivée première et lissage de Savitzky-Golay). Pour l'analyse en SF3D, les échantillons ont subi trois extractions séquentielles à l'eau ultra pure d'une durée respective de 1h, 2h et 24h. Elles ont été toutes faites en dupliquas. A la fin de chaque extraction, la suspension est centrifugée puis le surnageant est filtré (0,45 µm) et analysé en SF3D. Les spectres acquis sont d'abord normalisés par l'aire du pic Raman puis le spectre du blanc réalisé le jour même est soustrait. Afin de prédire le BMP grâce à des paramètres issus des spectres SF3D et SPIR, la régression linéaire multiple (RLM) et la régression par les moindres carrés partiels (PLS) ont été utilisées.

La prédiction du BMP par la SPIR présente un R2 ajusté de 0,58 ( $p > 0,001$ ) avec 5 variables explicatives. Dans le cas de la SF3D, les résultats obtenus sont meilleurs qu'en SPIR avec R2 ajusté de 0,79 ( $p < 0,0001$ ) avec 6 variables explicatives. Lorsque les deux méthodes sont combinées, les coefficients de corrélations sont meilleurs avec un R2 ajusté de 0,85 ( $p < 0,0001$ ) avec 6 variables explicatives issues de la SF3D et de la SPIR. C'est donc cette combinaison inédite de la SPIR et de la SF3D qui donne les meilleurs résultats pour la prédiction du BMP.

Il apparaît ainsi que pour des boues de STEU déshydratées, la SPIR et la SF3D sont efficaces pour la prédiction du BMP. La SF3D utilisée seule montre toutefois de meilleurs résultats que la SPIR seule et semble donc être une méthode de choix pour estimer le BMP. La combinaison de la SPIR et de la SF3D apporte une réelle amélioration par rapport aux méthodes seules. La collecte de nouveaux échantillons de boues pour appliquer cette méthode à un plus grand nombre d'échantillons est en cours. En outre, pour ces nouveaux échantillons collectés après centrifugation lors de l'étape de l'épaississement, le surnageant est également analysé en SF3D pour évaluer la prédiction du BMP par simple analyse du surnageant. Cela permettrait donc de prédire rapidement, voire en ligne, le BMP des boues d'épuration sans nécessité de déshydrater l'échantillon.

**MOTS CLÉS** : Méthanisation, boue d'épuration, potentiel méthanogène, spectrométrie de fluorescence 3D, Spectrométrie proche infrarouge

**Titre** : Modélisation hybride et multi échelle pour les écoulements dans les microsystèmes.

**AUTEUR**

Dahia Chibouti, Benoît Trouette, Eric Chénier

**LABORATOIRE**

Laboratoire : Modélisation et Simulation Multi Échelle (MSME), équipe : Transferts de Chaleur et de Masse (TCM)

**Résumé**

La miniaturisation des procédés utilisée dans l'industrie améliore le temps de réponse et permet également une augmentation des surfaces d'échange ce qui améliore les transferts de chaleur ou facilite la migration d'espèces à travers des membranes. Cependant, cette réduction d'échelle induit de nouveaux phénomènes physiques liés à l'interaction fluide/solide. Ce travail de recherche a pour vocation la compréhension et l'amélioration de la description des écoulements et des transferts de chaleur dans des conduites à dimension réduite.

La modélisation classique appelée "approche continue" consiste à non pas considérer chaque molécule indépendamment mais à les regrouper dans un ensemble pour en calculer les grandeurs moyennes (vitesse, température ...). Ces quantités moyennes sont déterminées à travers les équations de la mécanique des fluides et l'équation qui régit des transferts de chaleur. Sur la grande majorité des situations comme par exemple les écoulements autour d'un véhicule ou d'un avion, cette approche "continue" est parfaitement adaptée.

Or, dans le cas qui m'intéresse, les dimensions sont extrêmement petites comme pour une conduite de diamètre de l'ordre du milliè de millimètre et de longueur de quelques centimètres : comme par exemple dans le système de chromatographie en phase gazeuse ou dans les canaux gazeux des poumons artificiels.

Dans ce cas, cette approche "continue" ne fonctionne plus près du mur. En effet, nous ne pouvons plus définir correctement une vitesse moyenne ou une température représentative d'un ensemble d'atomes. Il faut donc trouver une alternative pour représenter ce qui se passe réellement au voisinage de la paroi. Bien que plusieurs chercheurs utilisent souvent des modèles pour représenter qualitativement ce qui se passe au niveau de la paroi, ces modèles sont basés sur des hypothèses qui ne sont pas nécessairement vérifiées dans des cas réalistes.

Afin de s'affranchir de ces hypothèses, nous essayons de regarder ce qui se passe à l'échelle moléculaire où chaque molécule est représentée avec sa propre vitesse pour voir comment elles interagissent avec le mur de structure atomique (paroi). C'est-à-dire, au lieu de considérer les grandeurs moyennes, chaque atome est représenté comme étant une particule ponctuelle.

Ces simulations à petite échelle permettent d'avoir des résultats satisfaisants, mais elles sont très coûteuses en terme de calcul. Par conséquent, l'approche développée dans cette recherche consiste à faire des simulations moléculaires au voisinage de la paroi, puis de les coupler avec le modèle continu qui simule l'écoulement et transferts loin des parois.

**MOTS CLÉS** : Transferts de chaleur et de masse, Micro-conduite, Microfluidique, phénomène interfacial, Glissement



## Titre : Suivi de la dynamique de croissance des levures pour supporter les expériences de microscopie à haute résolution.

### AUTEURS

L. Delmarre<sup>1,2,3</sup>, E. Harte<sup>1</sup>, A. Alaoui, A. Devin<sup>2</sup>, P. Argoul<sup>3</sup>, F. Argoul<sup>1</sup>

1. LOMA UMR5798 CNRS – Université de Bordeaux
2. IBGC UMR5095 CNRS – Université de Bordeaux
3. EMGCU - Mast - IFSTTAR - Marne-la-Valle

### LABORATOIRE

Laboratoire Expérimentation et Modélisation pour le Génie Civil et Urbain (EMGCU)

### Résumé

La levure *S.cerevisiae* est un micro-organisme eucaryote unicellulaire appartenant au règne des champignons, qui partage, avec les plantes et les bactéries, la particularité d'être enclouée par une paroi cellulaire rigide. Cette paroi assure à la fois un rôle de protection et d'échange avec l'environnement et joue également un rôle majeur dans le maintien de la forme, de la croissance ainsi que de la mécanique cellulaire. La paroi cellulaire de la levure n'est pas une enveloppe extérieure passive, c'est une structure dynamique, en constante évolution pendant la croissance ou en fonction des contraintes extérieures (mécanismes de réparation de la paroi cellulaire). Comprendre la mécanique d'une paroi unicellulaire est nécessaire pour déchiffrer les propriétés mécaniques d'une microcolonie de cellules de levure dans un biofilm.

La mécanique des biofilms présente un intérêt fort dans de nombreux domaines tels que la santé, l'environnement et l'agroalimentaire. Les biofilms (de levures, ou de bactéries) sont notamment au cœur des recherches sur les propriétés d'autorégénération des biobétons.

La microscopie à force atomique (AFM) est un outil polyvalent qui permet des études biologiques et mécaniques de micro-organismes vivants. Nous avons utilisé l'AFM pour effectuer une indentation nanomécanique de cellules de levure uniques à vitesse constante (approche-rétraction). À partir des séries d'indentations réalisées sur des cellules de levure seules, nous avons observé que la paroi cellulaire de levure peut être interprétée comme une structure multicouche, avec différentes propriétés mécaniques et que leurs distributions statistiques ne sont pas standards.

Pour que ces expériences de microscopie à haute résolution soient statistiquement robustes, il est nécessaire qu'elles soient couplées à un suivi précis de l'état de la croissance des levures effectué en parallèle. Nous nous sommes inspirés des techniques de suivi de la croissance des levures utilisées en biologie (suivi de la densité optique) pour concevoir un instrument adapté. Contrairement aux méthodes de mesure traditionnelles (mesures manuelles, indirectes), notre système propose un interfacement direct entre la culture de levure (bioréacteur) et le système optique de mesure. De plus, ce montage nous permet de faire des mesures sur une longue durée avec un intervalle de temps très court (de l'ordre de la seconde). Cette propriété sera essentielle pour déterminer les détails entre les différentes phases de croissance des levures. Enfin, le bioréacteur a été conçu pour pouvoir opérer en mode chémostat (système de perfusion) afin de pouvoir contrôler les levures en les maintenant dans un état de croissance stationnaire.

La capacité de l'instrument à mesurer les variations de la densité optique a été vérifiée à travers des suivis de phénomènes dynamiques (sédimentation). Nous avons également effectué le premier suivi de l'évolution d'une population de levures au cours d'une culture fermée.

**MOTS CLÉS** : Levures, Paroi cellulaire, Biofilm, AFM, Bioréacteur, Densité Optique.

## Titre : Photoelectrochemical conversion of urea on FTO/Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni photoanodes for the production of H<sub>2</sub>

### AUTEURS

Lamia Rebiai<sup>(a)</sup>, Christine Cachet-Vivier<sup>(a)</sup>, Diane Muller-Bouvet<sup>(a)</sup>, Sam Azimi<sup>(b)</sup>, Vincent Rocher<sup>(b)</sup>, Stéphane Bastide<sup>(a)</sup>

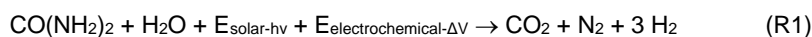
### LABORATOIRE

(a) Université Paris Est, ICMPE (UMR 7182), CNRS, UPEC, F- 94320 THIAIS, FRANCE

(b) Département Innovation et Environnement du Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne (SIAAP), Colombes

### Résumé

The photoelectrochemical (PEC) conversion of urea can be carried out in an alkaline medium according to:



The production of H<sub>2</sub> from R1 theoretically requires three times less energy than from water electrolysis (thermodynamic potential of 0.37 V versus 1.23 V, respectively). Urea in urine is a vast untapped resource (60 Mt/year of human origin) and the conversion of this pollutant into fuel using solar energy would (1) strongly reduce the energy cost of nitrogen remediation in wastewater treatment plants, (2) eliminate the release of nitrogen oxides in the environment, in particular the greenhouse gas N<sub>2</sub>O in air and NO<sub>3</sub><sup>-</sup> in rivers, (3) simultaneously produce storable H<sub>2</sub> as an energy carrier from solar energy.

The electro-oxidation of urea has been the subject of numerous studies [1], but only three works have been published to date on urea PEC oxidation [2-4]. In this context, our objective is to design and study photoanodes for the efficient conversion of solar energy (UV-Visible) leading to significant urea oxidation photocurrents.

We have synthesized arrays of α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanorods by a hydrothermal route (with or without dopants) followed by annealing at 800°C. They were then decorated with Ni-metal nanocatalysts deposited by electroplating or sputtering. The resulting FTO/Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni electrodes were characterized by X-ray diffraction and scanning electron microscopy to identify their structure and morphology.

The PEC performances were determined by voltammetry under illumination (1000 W m<sup>-2</sup>). We observe a catalytic PEC oxidation of urea and water with a photocurrent equivalent to 0.36 mA/cm<sup>2</sup> for 0.33 mol L<sup>-1</sup> of urea at 1.23 V<sub>RHE</sub> (0.2 V<sub>Ag/AgCl</sub>). The increase in photocurrent with urea concentration is consistent with effective oxidation of urea (~50% of the total photocurrent), though the non-linear dependency points to slow kinetics or poisoning. Chromatographic and spectrophotometric analyses were carried out to quantify the gaseous and dissolved products formed during urea PEC oxidation.

[1] Ye et al., Topics in Current Chemistry 376 (2018) 42.

[2] D. Xu et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 23924.

[3] G. Wang et al., Energy Environ. Sci. 5 (2012) 8215.

[4] W.M. Omyen et al., J. Saudi Chem. Soc. 21 (2017) 990–997.

**MOTS CLÉS** : Photoelectrochemistry, hematite, urea, hydrogen, wastewater