



*Journée Scientifique  
de l'École Doctorale  
Science, Ingénierie et Environnement*

*Jeudi 27 avril 2017*

*Recueil des résumés*

*Journée Scientifique - 27 avril 2017*



# TABLE DES MATIERES

MODELISATION DU RETRAIT-GONFLEMENT DANS LES MICROSTRUCTURES POREUSES : UNE APPROCHE NUMERIQUE COMBINEE-ELEMENTS FINIS-LATTICE BOLTZMANN	8
Jean-Luc Adia, Julien Yvonnet, Qi-Chang He, Nhu-Cuong Tran, Julien Sanahuja	8
LA GESTION DES DEJECTIONS A LYON, FIN XVIIIIE S.- DEBUT XXE	9
Emmanuel ADLER	9
ADAPTATION OF THE LAGRANGIAN MODULE OF A CFD CODE FOR ATMOSPHERIC DISPERSION OF POLLUTANTS IN COMPLEX URBAN GEOMETRIES AND COMPARISON WITH EXISTING EULERIAN RESULTS	10
Meissam Bahlali, Eric Dupont, Bertrand Carissimo	10
EFFET DU CHLORE SUR LA FORMATION D'OXYDANTS GAZEUX TROPOSPHERIQUES	11
Charlotte BARANGER	11
MAGNETIC AND MAGNETOCALORIC PROPERTIES OF OUT-OF-EQUILIBRIUM $SMFe_{8,75}GA_{0,25}$ NANOCOMPOSITE AND ITS CARBIDE	12
Thomas Bartoli	12
CARACTERISATION DE MEMBRANES ECHANGEUSES D'IONS UTILISEES DANS LE DOMAINE AGROALIMENTAIRE ET CONTRIBUTION AU DECOLMATAGE DES MEMBRANES USEES PAR SOLUTIONS CHIMIQUES	13
M. Bdiri1, 2*, L. Dammak1, C. Larchet1, L. Chaabane1, Fayçal Hellal2	13
ETUDE THEORIQUE DE LA BIOLUMINESCENCE CHEZ LES LUCIOLES.	14
Romain Berraud-Pache, Isabelle Navizet	14
OPTIMISATION D'UNE METHODE DE PRODUCTION DE FINES POUZZOLANIQUES PAR MECANO-ALKALI-ACTIVATION ET DE LEUR OUVRABILITE DANS LES MATERIAUX CIMENTAIRES	15
BOUCHENAF Othmane, HAMZAOUI Rabah, BENNABI Abdelkrim, COLIN Johan	15
DURABILITE DES TECHNIQUES DE RENFORCEMENT DES DIGUES	16
Yasmina Boussafir	16
STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF UNIAXIAL NANOCRYSTALLINE $PR_5CO_{19}$ COMPOUND	17
W.Bouzidi, N.Mliki et L.Bessais	17

ETUDE THERMODYNAMIQUE ET MECANIQUE DES ALLIAGES A HAUTE ENTROPIE BASES SUR LE SYSTEME COCRFEMNNI.	18
<b>Guillaume Bracq, Mathilde Laurent-Brocq, Loïc Perrière, Rémy Pirès, Jean-Marc Joubert, Ivan Guillot</b>	<b>18</b>
META-MODELE D'AFFECTATION DYNAMIQUE DU TRAFIC POUR ETUDIER LES INCERTITUDES DANS L'ESTIMATION DES EMISSIONS DU TRAFIC A L'ECHELLE METROPOLITAINE	19
<b>Ruiwei Chen, Vivien Mallet, Vincent Aguiléra, Florian Cohn, David Poulet et Fabien Brocheton</b>	<b>19</b>
ANALYSES L'ENDOMMAGEMENT DE TUBES COMPOSITES SIC/SIC PAR LA TOMOGRAPHIE EN RAYON X ET LA SIMULATION FFT	20
<b>Yang Chen, Lionel Gélébart, Camille Château, Michel Bornert, Andrew King, Patrick Aïmedieu, Cédric Sauder</b>	<b>20</b>
INFLUENCE DES PARAMETRES TECHNOLOGIQUES DE FORMULATION ET DE MISE EN ŒUVRE SUR LES ASPECTS DE PAREMENTS	21
<b>Edgar Chuta</b>	<b>21</b>
CYCLE DES SEMINAIRES CONSTRUCTIBILITE DE L'IRC	22
<b>Francesca CONTRADA, Gilles THING LEO, Nicolas ZIV</b>	<b>22</b>
LA DEGRADATION DE LA MAITRISE DE LA PERFORMANCE DU BATIMENT. L'APPROCHE HOLISTIQUE DE LA CONSTRUCTIBILITE POUR DES NOUVELLES SOLUTIONS DE FAÇADE.	23
<b>Francesca CONTRADA</b>	<b>23</b>
ASSIMILATION DE DONNEES AVEC CODE_SATURNE POUR DES APPLICATIONS MICRO-METEOROLOGIQUES A L'ECHELLE LOCALE.	24
<b>Cécile Defforge, Bertrand Carissimo, Raphaël Bresson.</b>	<b>24</b>
AMELIORATION DE LA PREDICTION DE QUANTITES D'INTERET PAR MODELISATION INVERSE: APPLICATION A LA THERMIQUE DU BATIMENT.	25
<b>Zohra Djatouti, Julien Waeytens, Ludovic Chamoin, Patrice Chatellier.</b>	<b>25</b>
MODELISATION DES ECOULEMENTS EAU-VAPEUR « TOUS REGIMES D'ECOULEMENTS » PAR UNE APPROCHE MULTI-CHAMP	26
<b>Solène Fleau, Stéphane Mimouni, Stéphane Vincent</b>	<b>26</b>
MODELISATION DE L'ENTRAINEMENT D'AIR DANS LA METHODE SPH	27
<b>Thomas Fonty</b>	<b>27</b>

MANUFACTURING OF A MECHANICAL VIBRATION ABSORBER TO REDUCE THE TREMOR AT THE HAND OF A PARKINSON'S PATIENT	28
Sarah Gebai, Mohammad Hammoud, Gilles Foret and Gwendal Cumunel	28
MODELING FOR CEMENT-BASED MATERIALS EXPOSED TO EXTERNAL SULFATE ATTACK OR DELAYED ETTRINGITE FORMATION	29
Yushan GU, Patrick DANGLA, Teddy FEN-CHONG, Othman OMIKRINE-METALSSI, Renaud-Pierre MARTIN	29
APPROCHE MULTI-PHYSIQUE DU VIEILLISSEMENT SUR LES MATERIAUX POUR APPLICATIONS PHOTOVOLTAÏQUES	30
V. Guiheneuf, O. Riou, F. Delaleux, P.-O. Logerais, J.-F. Durastanti	30
ABATTEMENT DES POLLUANTS PRIORITAIRES ET EMERGENTS PAR CHARBON ACTIF	31
Ronan Guillossou (LEESU)	31
CARACTÉRISATION THERMOPHYSIQUE D'UN CIMENT RENFORCÉ PAR DES FIBRES NATURELLES D'ORIGINE MARINE <i>POSIDONIA OCEANICA</i>	32
Ons HAMD AOUI, Atef MAZIOUD, Laurent IBOS	32
CARACTERISATION DE LA MATIERE ORGANIQUE DE LA COMETE 67P/CHURYUMOV-GERASIMENKO	33
Robin Isnard	33
SUR L'EVOLUTION D'UN SYSTEME DE SOLIDES RIGIDES A NOMBRE DE DEGRES DE LIBERTE FINI.	34
Aissam JEBRANE, Pierre ARGOUL, Gwendal CUMUNEL, Abdelilah HAKIM.	34
EUDE DE LA CARBONATATION DES DISPOSITIFS DE DRAINAGE PROFOND DE L'INFRASTRUCTURE FERROVIAIRE	35
Neng JIA (neng.jia@enpc.fr)	35
SIMULATION MULTI-ECHELLE DU COMPORTEMENT THERMIQUE AVEC CHANGEMENTS DE PHASES PAR LA METHODE EF <sup>2</sup>	36
K.-M. Kodjo, J. Yvonnet, M. Karkri	36
METHODES D'INGENIERIE POUR L'ETUDE DU TASSEMENT ET DU RISQUE DE LIQUEFACTION SOUS SEISME.	37
Ziad KTEICH	37

TRIARYLBISMUTHS: THEORETICAL VS EXPERIMENTAL STUDIES	38
<b>Pricilia KUTUDILA (Doctorante 3<sup>ème</sup> année, Laboratoire MSME &amp; ICMPE)</b>	<b>38</b>
TENUE AU FEU DES GOUJONS COLLES DANS LE BOIS ET DANS LE BETON	39
<b>Amine Lahouar, Jean-François Caron, Nicolas Pinoteau</b>	<b>39</b>
MULTIFUNCTIONAL BIO-BASED POROUS MATERIALS FOR SUSTAINABLE CONSTRUCTION	40
<b>Thibault Lerouge<sup>1,2,*</sup>, Daniel Grande<sup>1</sup>, Benjamin Le Droumaguet<sup>1</sup>, Philippe Coussot<sup>2</sup>, Olivier Pitois<sup>2</sup>.</b>	<b>40</b>
ETUDE FONDAMENTALE DE NOUVELLES FAMILLES D'ALLIAGES POUR ELECTRODES NEGATIVES DE BATTERIES NI-MH : ELABORATION ET MECANISMES DE CORROSION EN MILIEU ALCALIN D'INTERMETALLIQUES $Y_{2-x}Mg_xNi_7$	41
<b>N. Madern, V. Charbonnier, J. Monnier, J. Zhang, M. Latroche</b>	<b>41</b>
COMPOSITES CARBONE / NANOPARTICULES DE CUIVRE-RHODIUM POUR LA REDUCTION DES NITRATES	42
<b>Peyman Mirzaei, Stéphane Bastide, Claudia Zlotea, Michel Latroche, Christine Cachet-Vivier</b>	<b>42</b>
ÉTUDE DES FLUCTUATIONS EN HOMOGENEISATION ALEATOIRE	43
<b>Pierre-Loïc ROTHÉ, Frédéric LEGOLL</b>	<b>43</b>
APPROCHE SEMI-AUTOMATIQUE PAR APPROXIMATION DIFFUSE DE GENERATION DE MODELES BIELLES-ET-TIRANTS DESTINES AU FERRAILLAGE D'ELEMENTS DE STRUCTURES MASSIVES	44
<b>Christophe Rouzaud, Guillaume Hervé, Patrick de Buhan, Pierre-Alain Nazé, Gustavo Mendoza Chávez</b>	<b>44</b>
ANALYSE SYSTEMATIQUE DU CONCEPT DE COMPORTEMENT LINEAIRE EQUIVALENT EN INGENIERIE SISMIQUE	45
<b>Thuong Anh NGUYEN, Pierre LABBE, Guillaume HERVE, Jean-François SEMBLAT</b>	<b>45</b>
ETIREMENT DE FLUIDES A SEUIL	46
<b>Oumar A. Fadoul, P. Coussot</b>	<b>46</b>
MODELLING SHORT-TERM CYANOBACTERIAL DYNAMICS IN A SMALL URBAN LAKE USING A COUPLED HYDRODYNAMIC-ECOLOGICAL THREE-DIMENSIONAL MODEL	47
<b>Denis Plec, Lucas J.Porto, Bruno J. Lemaire, Philippe Dubois, Mohamed Saad, Brigitte Vinçon-Leite</b>	<b>47</b>
NANOPARTICULES METALLIQUES@POLYMERES POREUX : MATERIAUX HYBRIDES INNOVANTS POUR LA CATALYSE SUPPORTEE	48

Romain Poupart, Benjamin Le Droumaguet, Benjamin Carbonnier, Daniel Grande	48
EFFETS DE DIFFERENTS PROCESSUS PHYSIQUES AU SEIN D'UNE FAILLE SUR LA CREATION DE SEISMES	49
Hadrien Rattez, Ioannis Stefanou, Jean Sulem	49
OPTIMISATION DE LA COMPOSITION DES NANOCOMPOSITES $MgH_2-TiH_2$ POUR LE STOCKAGE REVERSIBLE DE L'HYDROGENE	50
Pavel Rizo, Fermín Cuevas, et Michel Latroche. Université Paris-Est, Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est	50
PROPRIETES STRUCTURALES ET MAGNETIQUES DE GDFEX (X = CU, CR)	51
M. Saidi, M. Jemmali, K. Nouri, A. Kabadou, L. Bessais.	51
COUPLING SATELLITE REMOTE SENSING AND MODELLING TECHNIQUES FOR UNDERSTANDING CYANOBACTERIAL BLOOMS. APPLICATION TO KARAOUN RESERVOIR, LEBANON	52
Najwa Sharaf <sup>1, 2, 3</sup> , Ali Fadel <sup>2</sup> , Bruno J. Lemaire <sup>1</sup> , Kamal Slim <sup>3</sup> , Brigitte Vinçon-Leite <sup>1</sup>	52
SIMULATION MOLECULAIRE DE L'INITIATION DE LA RUPTURE A L'ECHELLE ATOMIQUE	53
Sabri Souguir, Laurent Brochard	53
INSIGHTS INTO DEGRADATION MECHANISM OF ORANGE G BY PHOTO-FENTON OXIDATION: OPTIMAL CONDITIONS AND IDENTIFICATION OF BY-PRODUCTS	54
Jean-Baptiste Tarkwa, Nihal Oturan, Acayanka Elie, Laminsi Samuel, Mehmet A. Oturan.	54
EVOLUTION DU COMPORTEMENT POROMECANIQUE DES ROCHES MERES LORS DE L'ENFOUISSEMENT.	55
Hamza TAZI <sup>1,2</sup> , Elisabeth BEMER <sup>1</sup> , Mathilde ADELINET <sup>1</sup> , Luc DORMIEUX <sup>2</sup>	55
ANALYSE SYSTEMIQUE DES FACTEURS DE RISQUES AUX INTERFACES FONCTIONNELLES DU BATI-MODELISATION EN TERMES DE CRITERES DE CONSTRUCTIBILITE ET DE PERFORMANCES D'USAGE	56
Gilles THING LEO	56
TRAITEMENT PAR EXTRACTION ELECTROCHIMIQUE DES IONS CHLORURE DANS LES BETONS ARMES CARBONATES	57
Yolaine TISSIER, Véronique Bouteiller, Thierry Chaussadent, Suzanne Joiret, Elisabeth Marie-Victoire	57
DAMAGE MODELS CONTRIBUTIONS ON GENERATION AND DEVELOPMENT OF FAILURE ZONE AROUND TUNNELS IN QUASI-BRITTLE ROCKS	58
Edoardo Trivellato, Amade Pouya, Darius Seyedi, Minh-ngoc Vu	58

ALTERATION DES TEXTILES : LE ROLE DE LA POUSSIERE	59
<b>Pauline Uring, Anne Chabas, Stéphane Alfaro</b>	<b>59</b>
INACTIVATION DES ENTEROVIRUS PAR LA TEMPERATURE ET LES RAYONS ULTRA-VIOLETS : EFFET PROTECTEUR DE DIFFERENTS COMPOSES ORGANIQUES	60
<b>Prunelle Waldman, Sébastien Wurtzer, Laurent Moulin, Patricia Albanese, Françoise Lucas</b>	<b>60</b>
COMPREHENSION DES MECANISMES DE TRANSFERTS D'EAU DANS LE BOIS	61
<b>Meng Zhou, Denis Courtier-Murias, Paméla Faure, Stéphane Rodts, Sabine Caré, Philippe Cousot</b>	<b>61</b>
ELICITATION DES INTERACTIONS ENTRE INGENIERIE SYSTEME ET CONSTRUCTIBILITE. APPLICATION A UN CONCEPT INNOVANT DE METRO MULTIFONCTIONNEL.	62
<b>Nicolas ZIV, Andrea KINDINIS, Christophe GOBIN</b>	<b>62</b>



# Modélisation du retrait-gonflement dans les microstructures poreuses : une approche numérique combinée-Eléments Finis-Lattice Boltzmann

## AUTEURS

Jean-Luc Adia, Julien Yvonnet, Qi-Chang He, Nhu-Cuong Tran, Julien Sanahuja

## Résumé

Dans ce travail, le retrait-gonflement d'une microstructure poreuse à phase solide élastique est traité dans le cadre de l'homogénéisation numérique. Dans l'approche proposée, une description explicite de la microstructure poreuse, ainsi que la distribution locale du liquide capillaire pendant le séchage sont pris en compte. Dans ce contexte, le retrait/gonflement est une conséquence de l'action de la pression capillaire et de la tension de surface sur le squelette solide. Une méthodologie hybride s'appuyant sur la méthode de Lattice Boltzmann (LBM) et la méthode des éléments finis (FEM) est développée pour réaliser les simulations à l'échelle de la microstructure. La LBM est utilisée pour décrire la distribution des ménisques d'eau capillaire, tandis que la FEM est employée pour simuler la déformation du squelette solide sous l'action du fluide diphasique, et ce pour des microstructures de morphologie arbitraire. L'hystérésis de la pression capillaire en fonction de la saturation en eau observé pendant un cycle de séchage-humidification dans les essais expérimentaux peut être reproduit par la LBM. Les paramètres des équations constitutives macroscopiques en condition non-saturée peuvent être identifiés sans aucune hypothèse sur la morphologie des phases, liquide et vapeur. Les contributions de la pression capillaire et de la tension de surface au retrait/gonflement macroscopique sont comparées et discutées. Enfin, la méthodologie peut être étendue à des microstructures poreuses à phase solide dont le comportement est viscoélastique vieillissant avec une dépendance à l'humidité relative.

## MOTS CLES

LBM, FEM, milieux poreux, retrait, gonflement, séchage, humidification, fluage.



# La gestion des déjections à Lyon, fin XVIII<sup>e</sup> s. - début XX<sup>e</sup>

## AUTEURS

Emmanuel ADLER

## Résumé

Dans un contexte caractérisé par les enjeux de pouvoirs, les controverses scientifiques, les évolutions technologiques, réglementaires et organisationnelles, mais également par une forme d'inertie, l'ambition de cette thèse, qui se focalise sur la question de l'assainissement des villes et l'économie circulaire à l'échelle d'un territoire, est de démontrer que les décisions majeures relèvent d'avantage de l'intuitu personae que de la rationalité scientifique.

Pour bâtir cette démonstration à partir d'un exemple précis, circonscrit dans le temps et l'espace, la réflexion prend pour objet la cité Lyonnaise au travers du prisme de la gestion des déjections humaines de ses habitants, appréhendées sous toutes ses facettes, depuis la fin du XVIII<sup>e</sup> s. jusqu'à la Loi du 15 février 1902 relative à la protection de la santé publique.

Cette recherche explore ainsi un large champ qui débute avec la problématique de santé des vidangeurs des fosses étanches, et s'achève avec le développement des toutes premières stations d'épuration, alimentées par des eaux usées acheminées par un réseau d'égouts.

Ce travail s'inscrit dans le sillon creusé par de récentes recherches sur l'histoire de l'environnement en France, s'appuyant en particulier sur divers travaux en histoire des techniques, à commencer par ceux d'André Guillerme, de Sabine Bales et de Laurence Lestel. Il est en phase avec les recherches en cours sur la redécouverte des cycles des nutriments excrétés en milieu urbain et recyclés dans le monde rural, et les alimente par une approche à caractère historique. Il s'agit donc d'un travail à l'interface entre les sciences de l'ingénieur appliquées à la gestion des excréta humains et les sciences socio-historiques.

Dans le champ de l'assainissement, mais également de l'agriculture et de l'industrie, la recherche proposée s'intéresse à l'évolution des organisations et pratiques associées à la question, a priori peu digne d'intérêt, du devenir des excréments humains, en un lieu précis et sur une période bornée. A ce titre, elle contribue à une meilleure connaissance des leviers et freins qui gouvernent l'économie circulaire, concept économique d'actualité dont l'objectif est de produire biens ou services en limitant consommation et gaspillage.

Si les opérations actuelles de gestion des boues d'épuration, matières fertilisantes d'intérêt agricole, mettent en œuvre des technologies complexes, si les contraintes réglementaires et fiscales se caractérisent par leur degré croissant de complexité, les enjeux contrôlant l'histoire de ces immondices sont contraints par un nombre limité de solutions finales (dispersion par retour au sol, destruction thermique ou biologique, enfouissement).

Dans cette perspective, la prise en compte des risques (sanitaires, physiques, politiques et financiers) dans le processus décisionnel de gestion de ces immondices constitue le cœur de cette recherche. Et pourtant, nous allons démontrer que les grandes évolutions relèvent d'avantage du pouvoir de conviction de certains acteurs que d'une froide analyse rationnelle.

La réflexion considérée vise à apporter des réponses, sur le cas de la ville de Lyon et avec quelques comparaisons avec certains exemples français et étrangers, aux questions suivantes : engrais reconnu, les immondices intéressent les campagnes quand les villes cherchent à s'en débarrasser. Comment évoluent les relations entre les mondes urbains et ruraux pour recycler les déchets des premiers chez les seconds ? Avec qui et comment se développent les technologies de traitement et pourquoi seules certaines sont appliquées ?

Existe-t-il des déterminants permettant d'expliquer la très grande diversité, dans le temps comme dans l'espace, des systèmes d'organisation et de traitement ? Quels rôles jouent les pouvoirs politiques et financiers dans les décisions qui président aux conditions de gestion des immondices ? Depuis la théorie des miasmes et le développement de la chimie jusqu'aux applications industrielles de la bactériologie, l'évolution des controverses scientifiques relatives à la gestion des déjections humaines obéit-elle à des règles ? Et enfin, en quoi l'amnésie technique, des élus comme des techniciens, constitue-t-elle un élément majeur pour comprendre la dynamique de ce marché ?

Dans le cadre de la redécouverte des technologies rustiques, ce travail de thèse permettra de gagner un temps appréciable aujourd'hui en s'inspirant de l'expérience d'hier.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Assainissement, Engrais Humain, Salubrité Publique, Histoire des Techniques,

Journée Scientifique - 27 avril 2017

# Adaptation of the Lagrangian module of a CFD code for atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries and comparison with existing Eulerian results

## AUTEURS

Meissam Bahlali, Eric Dupont, Bertrand Carissimo

## Résumé

In the general context of atmospheric dispersion in urban neighborhood, Lagrangian models consist in calculating and tracking the trajectories of particles of pollutant emitted into the turbulent atmosphere. The cloud of pollutant is discretized and described by a large number of particles. These models are particularly suitable for the study of complex, unsteady or inhomogeneous flows, which is precisely the case of atmospheric flows in urban areas. They are also recommended to deal with dispersion near the sources.

In this work, the objective is to make use of both the Lagrangian and the atmospheric modules of a CFD open source code *Code\_Saturne* to model the turbulent dispersion of pollutants with the Lagrangian approach and compare it to the existing results previously obtained with the Eulerian methods, making use of the same CFD code.

The Lagrangian stochastic model used in this work is the *simplified Langevin model* of Pope (2001) and pertains to the approaches referred to as PDF (Probability Density Function) methods. This model has never been used in the context of atmospheric dispersion. Yet, it has the benefit of having a very simple form. Also, it ensures full consistency with both the mean Navier-Stokes equation and the Reynolds-stress equations. Moreover, no hypothesis is made on the PDF of the velocity of the particles, which was not the case of many of the former models used in the atmospheric dispersion field.

In this paper, we first show that our model respects the well-mixed criterion, which states that an initially uniform particle concentration in a turbulent flow should remain uniform. Then, we validate our model in the case of a continuous punctual release with uniform mean wind speed and turbulent diffusivity, by checking with the existing analytical solution. We show that our Lagrangian model performs better accuracy on the concentration field results than the Eulerian RANS model. Finally, we validate the model with several experimental campaigns, considering atmospheric stratification and buildings. The first field experiment program considered in this paper has been conducted on the 'SIRTA' site (Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique), in the southern suburb of Paris, and involves a stably stratified surface layer.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Atmospheric dispersion, Lagrangian stochastic modelling, turbulence, CFD



# Effet du chlore sur la formation d'oxydants gazeux troposphériques

## AUTEUR

Charlotte BARANGER

## Résumé

Le radical hydroxyle OH• est connu comme étant le principal oxydant de l'atmosphère, il contrôle le temps de vie de nombreux composés organiques volatils (COV) émis dans la troposphère de façon naturelle ou anthropique.

Il est également bien connu que les composés halogénés (Abbatt et al., 2012), notamment le chlore, ont un impact sur la capacité oxydante des atmosphères marines et polaires. Plus récemment, il a été montré (Bannan et al., 2015) que le chlore peut également avoir un impact sur la formation de photo-oxydants, notamment l'ozone, dans les régions côtières polluées.

Les particules marines, composées d'une grande fraction de Cl<sup>-</sup> (55,04 % du sel de mer, basé sur la composition de l'eau de mer) sous forme de NaCl<sub>(s)</sub> (Seinfeld and Pandis, 2006) sont le principal réservoir de chlore atmosphérique. Cependant, cette forme de chlorure est peu réactive.

Les masses d'air urbaines comportent des oxydes d'azotes (NO<sub>x</sub>), émis principalement par les activités anthropiques. Ces NO<sub>x</sub> évoluent pour former du pentoxyde d'azote gazeux N<sub>2</sub>O<sub>5(g)</sub>. Plusieurs expériences de laboratoires et de terrains (Behnke et al., 1997; Finlayson-Pitts et al., 1989; Morgan et al., 2015) en régions côtières polluées ont révélé que l'absorption de N<sub>2</sub>O<sub>5(g)</sub> sur des aérosols déliquescents contenant du chlore peut conduire en plus de la formation d'acide nitrique HNO<sub>3</sub>, à la formation de chlorure de nitryle ClNO<sub>2</sub> sous forme gazeux.

Le ClNO<sub>2</sub> va dès le levé du soleil se photo-dissocier et ainsi former du dioxyde d'azote NO<sub>2</sub> et du chlore atomique Cl• qui est très réactif avec les composés organiques volatils et notamment les alcanes (Young et al., 2014). Par exemple, pour le propane la constante de réactivité avec Cl• est deux ordres de grandeur supérieure à celle avec OH• (k<sub>Cl</sub> = 1,4.10<sup>-10</sup> cm<sup>3</sup>.molecule<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup> et k<sub>OH</sub> = 1,11.10<sup>-12</sup> cm<sup>3</sup>.molecule<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>). Cependant, la concentration en OH• est rapidement beaucoup plus importante que celle en Cl•. Il existe alors une compétition entre ces deux radicaux pour l'oxydation des différents COV selon les heures de la journée.

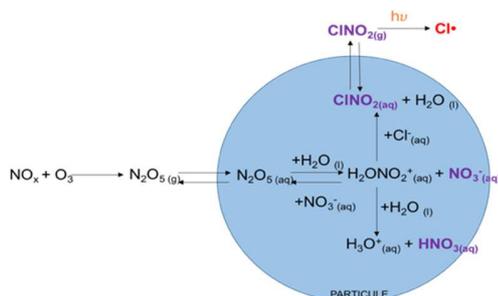


Figure 1 : Formation du chlore atomique par réaction hétérogène du N<sub>2</sub>O<sub>5(g)</sub> sur une particule chlorée

L'objectif de la thèse est d'étudier les effets du chlore sur la formation des oxydants gazeux troposphériques. Pour répondre à cet objectif, j'utiliserai un modèle de chimie transport (CHIMERE Menut et al., 2013), en parti développé au LISA. A partir des émissions marines de chlore simulées dans le modèle, j'étudierai l'impact de la chimie du chlore sur la qualité de l'air. Pour représenter cette chimie, j'utiliserai un modèle 0D, le modèle GECKO-A (Aumont et al., 2005) qui permet de générer des schémas chimiques explicites. La chimie du chlore n'étant pas incluse dans ce modèle, je l'étendrai aux mécanismes d'oxydation du chlore. Finalement, j'évaluerai la représentation de la chimie du chlore par comparaison avec des mesures in-situ.

Actuellement en première année de thèse, j'ai réalisé une première simulation avec le modèle CHIMERE d'avril 2012 à avril 2013 avec le schéma chimique SAPRC (Carter, 2010) incluant la chimie du chlore mais ne prenant pas en compte la réaction hétérogène de N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> menant à la formation de ClNO<sub>2</sub>. J'intègre actuellement cette réaction dans le modèle. D'autre part, j'ai commencé à constituer une base de données regroupant les études de l'oxydation des COV par le radical Cl afin de l'intégrer dans le modèle GECKO-A.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Pollution atmosphérique, chlore, modélisation, oxydants gazeux, schémas chimiques

# Magnetic and magnetocaloric properties of out-of-equilibrium $\text{SmFe}_{8,75}\text{Ga}_{0,25}$ nanocomposite and its carbide

## AUTEURS

Thomas Bartoli

## Abstract :

Rare earth iron intermetallic compounds like  $\text{R}_2\text{Fe}_{17}$  have been studied in detail as possible candidates for permanent magnet materials. However, these binary alloys show a relatively low Curie temperature, generally below 400 K, and they exhibit only a planar magnetic anisotropy. To improve these magnetic properties, methods like the substitution of Fe by Si, Ga or Co have proven to be successful. Another method consists of inserting lighter elements like carbon in  $\text{R}_2\text{Fe}_{17}$ . This insertion has a significant effect on the structure (increasing the Fe-Fe “dumbbells” distances), and thus, the magnetic properties of the parent compound. Lastly, recent studies on 1/9 out-of-equilibrium phases, precursors to the 2/17 phases, have also shown magnetic properties improvements, mostly due to its hexagonal P6/mmm nature.

In this sense, samples of  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{16,5}\text{Ga}_{0,5}$  with samarium excess were prepared by ball-milling under Ar atmosphere for 5h. The amorphous powders were then further annealed for 30mn at temperatures ranging from 650 to 750°C. X-ray diffraction measurements were carried out on the samples and diagrams were refined using the Rietveld method. This analysis confirmed the successful crystallization of our powders into  $\text{SmFe}_{8,75}\text{Ga}_{0,25}$  in the hexagonal P6/mmm phase. Finally, carburization of the samples were carried out, therefore resulting in  $\text{SmFe}_{8,75}\text{Ga}_{0,25}\text{C}$  carbides.

The best coercive field was found on the powder annealed at 710°C with  $H_c = 9.2 \text{ kOe}$ , which were measured on the PPMS (physical property measurement system) at ambient temperature.

Curie temperatures were evaluated on carbides and non-carbides samples using a differential sample magnetometer MANICS in a field of 0.12 T. The results were  $T_c = 471\text{K}$  and  $T_c = 679\text{K}$  respectively. This great improvement in  $T_c$  is largely attributed to the magnetovolumic effect, as the insertion of the carbon atom significantly increases the cell parameters.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Rare-earth intermetallics, magnetic properties, mechanical alloying and milling, magnetocaloric properties, nanocomposites



# Caractérisation de membranes échangeuses d'ions utilisées dans le domaine agroalimentaire et contribution au décolmatage des membranes usées par solutions chimiques

## AUTEURS

M. Bdiri1, 2\*, L. Dammak1, C. Larchet1, L. Chaabane1, Fayçal Hellal2

<sup>1</sup>Université Paris-Est, Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, UMR 7182 CNRS - UPEC, 2, rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France.

<sup>2</sup>Université de Carthage, Institut National de Sciences Appliquées et de Technologie, 05 UR 1204 INSAT, rue de la terre, BP 676, 1080 Tunis, Tunisie.

## Résumé

L'utilisation de l'électrodialyse est largement répandue dans l'industrie agroalimentaire pour de nombreuses applications telles que les traitements du lactosérum du lait, des jus de fruits ou des vins. Pour l'ensemble de ces applications, le colmatage des membranes échangeuses d'ions MEI(s) dû aux matières organiques représente l'un des principaux problèmes rencontrés par les industriels. Dans le cadre de nos travaux, deux lots de membranes échangeuses de cations (MEC) neuves (n) et en fin de vie (u) ainsi que deux lots de membranes échangeuses d'anions (MEA) (n) et (u) issues d'unités d'électrodialyse (ED) dans l'industrie alimentaire [1] -sujet confidentiel- ont été caractérisés pour étudier l'effet de l'usage et du colmatage organique sur leurs performances entre l'état neuf et usé, et d'autre part, pour comparer les caractéristiques des MEC et MEA (n) entre elles. Les échantillons ont été caractérisés par différentes méthodes : capacité d'échange (CE), épaisseur ( $T_m$ ), conductivité électrique membranaire ( $K_m$ ) [2], angle de contact [ $\theta$ (°)], teneur en eau ( $t_e$ ) -tableau 1-, essais de traction, IRTF, analyses structurales et élémentaires par MEB en analyses morphologiques par microscopie optique. Des stratégies de décolmatage non agressives par solutions chimiques ont été étudiées sur les lots de MEC et MEA (u), en mode statique en ex-situ, telles que des solutions salines [3] et un mélange eau-éthanol. L'efficacité des différentes procédures de nettoyage expérimentées a été évaluée en effectuant les suivis de la CE, de la  $K_m$  et de  $\theta$  pour chaque échantillon de membrane usé et traité en fonction des durées de lavage afin de juger la récupération de certaines de leurs caractéristiques physico-chimiques.

Tableau 1 : Tableau récapitulatif des résultats de caractérisation des MEI(s) (n) et (u)

	MEC (n)	MEC (u) Lot1	MEA (n)	MEA (u) Lot2
CE (mmol.g <sup>-1</sup> )	2.47 ± 0.13	1.40 ± 0.05	2.51 ± 0.10	1.23 ± 0.06
$T_m$ (µm)	177 ± 4	270 ± 5	153 ± 2	169 ± 4
$K_m$ (S.cm <sup>-1</sup> )	13.4 ± 0.6	6.2 ± 0.4	12.6 ± 0.5	1.8 ± 0.2
$\theta$ (°)	47 ± 1.3	49.3 ± 1	63 ± 1.8	52.6 ± 1.3
$t_e$ (%)	26.1 ± 0.7	40 ± 1.7	24.8 ± 1.1	23.7 ± 1

**MOTS CLES** : Membranes échangeuses d'ions ; Décolmatage chimiques ; Electrodialyse ; Industrie agroalimentaire.

1. R. K. Nagarale, G. S. Gohil, Vinod K. Shahi, Recent developments on ion-exchange membranes and electro-membrane processes, *Advances in Colloid and Interface Science*, Elsevier, 119, n° 2-3 (2006), p. 97-130.
2. R. Ghalloussi, and al., Ageing of ion-exchange membranes used in electrodialysis: Investigation of static parameters, electrolyte permeability and tensile strength, *Sep. and Pur. Tech.*, 80, (2011), p. 270-275.
3. M. J. Corbaton-Baguena, S. Alvarez-Blanco, M. C. Vincent-Vela, Cleaning of UF membranes fouled with BSA by means of saline solutions, *Separation and Purification Technology*, Elsevier, 125, (2014), p. 1-10.

\*myriam\_bdiri@yahoo.com

Ecole doctorale, sciences, ingénierie, environnement



# Etude théorique de la bioluminescence chez les lucioles.

## AUTEURS

Romain Berraud-Pache, Isabelle Navizet

## Résumé

La bioluminescence est la production de lumière par une réaction chimique chez les espèces vivantes. Ces espèces, aussi bien animales que végétales, aquatiques que terrestres, émettent une lumière balayant tout le spectre visible.

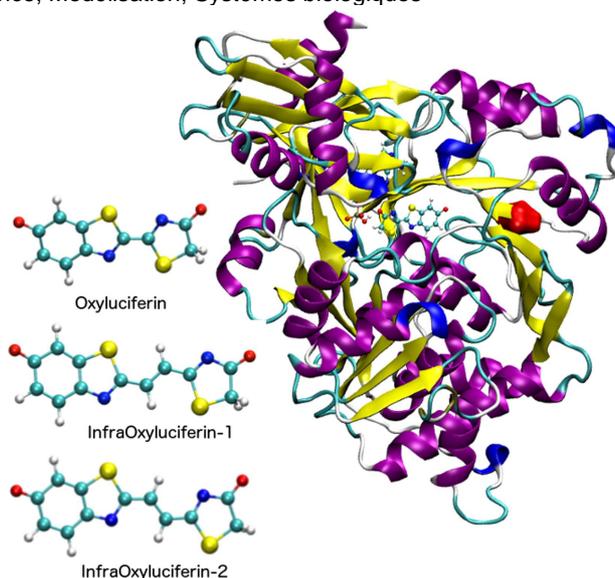
Chez les lucioles, la bioluminescence fait interagir deux molécules, une protéine appelée luciférase et un substrat, la luciférine. Lors de la réaction de bioluminescence la luciférine va subir une transformation chimique afin de donner une molécule appelée oxyluciférine, qui émet une lumière jaune-verte dans le spectre visible. La recherche a permis de mieux comprendre cette réaction mais également d'obtenir des analogues de la luciférine permettant de modifier la couleur émise par le système.

C'est dans ce contexte que s'articule le déroulement de ma thèse. En utilisant la chimie théorique, également appelée chimie computationnelle on cherche à modéliser ce système luciférine-luciférase et à déterminer ses propriétés intrinsèques comme par exemple la longueur d'onde (donc la couleur) d'émission.

Dans cette présentation, je décrirai d'abord ce système biologique complexe, ce qu'on peut faire en modélisation pour mieux le comprendre, avant de traiter deux exemples différents. On s'intéressera ainsi dans un premier temps à la relation entre la bioluminescence et la fluorescence chez les lucioles. Puis, dans un second temps, on comparera deux substrats, la luciférine naturelle qui émet une lumière jaune et l'infraluciférine qui émet dans le domaine du proche infra-rouge. Des notions sur la méthode théorique utilisée lors de cette thèse appelée méthode QM/MM seront exposées. Cette méthode combine des calculs quantiques (QM) basés sur les électrons afin de traiter le substrat et des calculs de type mécanique newtonienne (MM) afin de traiter la protéine.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Chimie théorique, Bioluminescence, Modélisation, Systèmes biologiques



# Optimisation d'une méthode de production de fines pouzzolaniques par Mécano-Alkali-Activation et de leur ouvrabilité dans les matériaux cimentaires

## AUTEURS

BOUCHENAF A Othmane, HAMZA OUI Rabah, BENNABI Abdelkrim, COLIN Johan

Université Paris-Est, Institut de Recherche en Constructibilité, ESTP, 28 avenue du Président Wilson, 94234 Cachan, France

## Résumé

Le ciment est un matériau de construction indispensable utilisé dans le monde entier. Mais la production de 1 kg de ciment entraîne l'émission de 0,74 kg de CO<sub>2</sub>. Ce constat, établi depuis des années, a rendu nécessaire le déploiement de recherches visant à réduire l'important impact environnemental lié au processus de fabrication.

L'émission de CO<sub>2</sub> est due principalement au procédé de fabrication du clinker. L'emploi de matériaux pouzzolaniques en remplacement d'une partie du clinker représente une solution alternative permettant d'en réduire les quantités produites. Les matériaux pouzzolaniques, comme la métakaolinite ou d'autres produits industriels, permettent également la fabrication de géopolymères.

Le broyage à très haute énergie est un procédé qui permet d'activer les coproduits industriels et d'augmenter leur taux de substitution au clinker. La mécanosynthèse permet de réduire la taille et changer la forme des particules pour obtenir ainsi un matériau nanostructuré (taille nanométrique des cristallites).

Nous avons utilisé cette technique dans le but d'étudier l'effet de l'activation des coproduits industriels sur les performances des pâtes cimentaires. Les résultats obtenus montrent l'amélioration des performances mécaniques des pâtes de ciment même dans le cas d'une substitution de 50 % de clinker par exemple par des cendres volantes broyées pendant 3 heures. Les résultats indiquent une amélioration optimale de +23,9 % à 90 jours, liée à une résistance en compression simple de 70 MPa. Dans cette même étude l'utilisation du laitier et de la kaolinite a donné des résultats assez équivalents.

Ces travaux, qui font partie d'une thèse de doctorat en cours de réalisation à l'Institut de recherche en constructibilité de l'ESTP Paris, porte sur l'élaboration d'un nouveau procédé de fabrication d'un clinker équivalent par mécano-alkali-activation, afin d'éviter de recourir à la calcination pour la production du clinker. Avec ce procédé, nous avons aussi pour ambition de faire de la géopolymerisation afin de fabriquer un ciment géopolymère sans recourir à des agents chimiques dangereux tels que les oxydes de sodium ou de potassium et pouvoir les remplacer par des agents « moins agressifs » à de faible concentration.

Dans cette étude, les matières premières utilisées dans le procédé de clinkérisation sont principalement le calcaire et l'argile et pour la géopolymerisation des coproduits tels que des laitiers, des cendres volantes ou des zéolithes.

L'eau et l'éthanol ont été utilisés chacun comme PCA (agent de contrôle de processus) pour la mécanosynthèse. Utilisés pendant le broyage de cendres volantes et de laitiers, ils ont conduit à une amélioration des performances mécaniques de pâtes cimentaires avec 50 % de remplacement de clinker. Un article traitant de cette étude est en cours de rédaction et sera présenté aussi à la RUGC 17 (Nantes).

## MOTS CLES

Mécano-alkali-activation, clinker équivalent, mécanosynthèse, clinkérisation, géopolymerisation.

Journée Scientifique - 27 avril 2017



# Durabilité des techniques de renforcement des digues

## AUTEURS

Yasmina Boussafir

## Résumé

Les digues sont des ouvrages complexes répondant à des règles de conception précises. L'objectif recherché est que l'ouvrage puisse résister au risque inondation. Dans les analyses liées aux études de dangers, l'effort est surtout porté sur l'analyse de la probabilité de rupture. Cette analyse intègre souvent des données portant sur l'état de la digue au moment des études géotechniques. Or cet état correspond à une image instantanée du matériau et des ses propriétés au moment du prélèvement et de la réalisation des essais in situ.

L'objectif du travail réalisé dans le cadre de la thèse porte sur l'évaluation des effets du temps sur les propriétés des matériaux naturels et plus précisément sur l'aptitude à résister à une inondation. Une des idées développée est d'évaluer la robustesse d'un indicateur simple, la teneur en eau, sur le pronostic que l'on peut porter concernant les propriétés des sols qui constituent la digue. Par définition, un pronostic est une opération qui permet de prévoir le comportement de l'ouvrage. Ceci répond aux notions de durabilité telles que définies dans les Eurocodes.

L'acquisition de données de sol sur un remblai expérimental réalisé à Héricourt (projet TerDOUEST) a permis de montrer l'évolution des teneurs en eau volumiques dans le temps, en relation avec des sondes mesurant la succion. Le dépouillement des données a mis en lien les informations, et permet de commencer à évaluer les effets du temps sur des matériaux traités à la chaux.

En parallèle un travail en laboratoire permet d'entamer une réflexion sur le vieillissement des sols en lien avec la météorologie. De récents travaux ont commencé à établir des référentiels que nous proposons de revisiter. Les modalités de vieillissement alternant des cycles de séchage et d'humidification (reproduisant des cycles météorologiques) entraînent une certaine détérioration des propriétés des matériaux pour ouvrages hydrauliques. Débuté depuis le début de l'année, la présentation fera le point sur les essais en cours.

L'objectif final sera de capitaliser ces informations pour dégager des règles utiles à la conception des ouvrages en terre avec par exemple la définition des environnements agressifs, la classification des matériaux les plus sensibles au vieillissement et si possible formaliser les lois d'évolution des performances en fonction du temps. L'introduction de ces notions de vieillissement dans l'analyse des performances des systèmes d'endiguement constituera une avancée pour la profession.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Digue fluviale, vieillissement, matériau, durabilité, perméabilité, teneur en eau, succion

Journée Scientifique - 27 avril 2017



# Structural and magnetic properties of uniaxial nanocrystalline Pr<sub>5</sub>Co<sub>19</sub> compound

## AUTEURS

W.Bouzidi, N.Mliki et L.Bessais

## Résumé

Rare earth (R) and transition metal (T) based intermetallic compounds are the best candidates for high magnetic properties. They can lead to powerful magnetic materials characterized by a high Curie temperature (TC) and high coercivity. High uniaxial anisotropy is also an important property to establish a permanent magnet.

In the search for new phases presenting high magneto-crystalline anisotropy, we have investigated nanocrystalline Pr<sub>5</sub>Co<sub>19</sub> powders. Samples have been synthesized by mechanical milling for the first time. The structural properties were studied by X-ray diffraction and refined using Rietveld method. This analysis revealed that all samples crystallize in the rhombohedral Ce<sub>5</sub>Co<sub>19</sub>-type structure with space group R $\bar{3}$ m. The Curie temperature was measured using a differential sample magnetometer MANICS in a field of 0.1 T. Thermomagnetic measurements M (T) indicate that the intermetallic Curie temperature is about 690 K. Magnetic measurements were performed using a physical property measurement system (PPMS) Quantum Design at T =10 K and 293 K with field up to 9 T.

The optimum extrinsic magnetic properties have been obtained for Pr<sub>5</sub>Co<sub>19</sub> powders milled for 5h and annealed at 775°C for 30 min with a coercivity H<sub>c</sub> of 15 kOe at 293 K. These interesting intrinsic and extrinsic properties of nanocrystalline Pr<sub>5</sub>Co<sub>19</sub> are suitable for permanent magnet applications. The high coercivity is attributed to the high uniaxial magneto-crystalline anisotropy field, nanoscale grain size, and to the homogeneous nanostructure developed by mechanical milling process.

## MOTS CLES

Nanomaterials, magnetism, X-ray diffraction, nanocrystalline, Intermetallic.



# Etude thermodynamique et mécanique des alliages à haute entropie basés sur le système CoCrFeMnNi.

## AUTEURS

Guillaume Bracq, Mathilde Laurent-Brocq, Loïc Perrière, Rémy Pirès, Jean-Marc Joubert, Ivan Guillot

## Résumé

Le projet du Labex MMCD est de développer de nouveaux matériaux pour la construction durable. Pour répondre à cette urgence environnementale, un des enjeux majeur est l'allègement des structures. Pour cela, de nouveaux matériaux, capables de résister à des sollicitations mécaniques toujours plus importantes, sont nécessaires. Découverts au début des années 2000, les alliages métalliques dits à « haute entropie de mélange » sont d'excellents candidats pour répondre à ce défi. En effet, en rupture avec les approches classiques de métallurgie consistant à allier un ou deux éléments majoritaires avec de nombreux autres éléments minoritaires, les alliages à haute entropie sont des solutions solides multi-composants avec une concentration élevée de chacun des composants. Ces alliages, comme par exemple l'alliage équimolaire CoCrFeMnNi, peuvent présenter d'excellentes propriétés mécaniques, en combinant résistance mécanique et ductilité<sup>1</sup>. De plus, par définition, ce nouveau concept de matériaux rend possible l'exploration d'un champ quasi infini de compositions chimiques. En revanche pour le moment, la stabilité thermodynamique de ces systèmes est mal connue, limitant fortement le choix des compositions. Les avantages potentiels découlant du choix de la composition ainsi que l'amélioration des propriétés mécaniques en sont donc fortement restreints.

Durant cette étude, la zone de stabilité de la solution solide cubique à faces centrées du système CoCrFeMnNi est étudiée théoriquement et expérimentalement. Utilisant la méthode Calphad, les phases thermodynamiquement stables de 10 626 compositions ont pu être calculées à haute température, ce qui a permis de modéliser le diagramme de phases quinaire du système Co-Cr-Fe-Mn-Ni<sup>2</sup>. 11 alliages ont ensuite été élaborés et caractérisés enfin de vérifier les prédictions. La comparaison entre les résultats expérimentaux et les prédictions, nous indique que la zone de la solution solide cubique à faces centrées est correctement décrite. Cependant, les autres zones du diagramme, en particulier les alliages multi-phasés, sont souvent mal décrites.

Grâce à ce travail, il est maintenant possible de choisir *a priori* une composition qui formera à haute température une solution solide cubique à faces centrées dans le système Co-Cr-Fe-Mn-Ni, tout en pouvant contrôler le coût ou même la densité. Suite à ces résultats, plusieurs alliages ont pu être élaborés et analysés par nano-indentation instrumentée afin d'observer l'influence de la composition sur le durcissement par solution solide pour ce système. Ainsi une cartographie, en fonction de la composition chimique, du comportement mécanique de l'alliage multi-composant Co-Cr-Fe-Mn-Ni pourra être entreprise.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Alliages à haute entropie, métallurgie, alliages de structures, modélisation

<sup>1</sup> B. Gludovatz et al., "A Fracture-Resistant High-Entropy Alloy for Cryogenic Applications," *Science* 345, no. 6201 (September 5, 2014): 1153–58, doi:10.1126/science.1254581.

<sup>2</sup> Guillaume Bracq et al., "The Fcc Solid Solution Stability in the Co-Cr-Fe-Mn-Ni Multi-Component System," *Acta Materialia* 128 (April 2017): 327–36, doi:10.1016/j.actamat.2017.02.017.

# Méta-modèle d'affectation dynamique du trafic pour étudier les incertitudes dans l'estimation des émissions du trafic à l'échelle métropolitaine

## AUTEURS

Ruiwei Chen, Vivien Mallet, Vincent Aguiléra, Florian Cohn, David Poulet et Fabien Brocheton

## Résumé

La modélisation des émissions du trafic routier comprend un modèle d'affectation du trafic, et un modèle d'émission publiés par l'Agence Européenne de l'Environnement (COPERT IV). Chacun de ces modèles est source d'incertitudes. Une affectation de trafic consiste à calculer un équilibre offre-demande, sous contrainte de capacité des routes du réseau, de telle sorte que, à chaque instant, les usagers soient distribués sur des itinéraires concurrents iso-coût. Les entrées comprennent d'une part, la demande du trafic représentée par une matrice origine-destination (O-D), et d'autre part, l'offre d'infrastructure modélisée par un graphe orienté. Les sorties sont le débit et la vitesse moyenne sur chaque route, qui sont ensuite deux entrées importantes pour COPERT IV. Alors que le problème d'affectation statique se formule comme un problème classique d'optimisation, le cas dynamique est mathématiquement plus complexe. En effet, le modèle d'affectation dynamique prend en compte la répartition temporelle de la demande, et modélise le temps de parcours des routes de façon plus réaliste. Dans le cadre de la thèse, nous utilisons le modèle d'affectation dynamique LADTA, dont les entrées dépendent de l'heure d'entrée dans le réseau. Il est informatiquement plus coûteux que le modèle statique. Pour quantifier les incertitudes, nous avons besoin de générer un ensemble de simulations LADTA en perturbant les entrées, selon certaines distributions de probabilité. Le modèle LADTA étant coûteux, il faut donc dans un premier temps établir un méta-modèle, i.e., une approximation raisonnablement proche du modèle LADTA complet, mais avec un coût de calcul très faible. Pour ce faire, une base réduite est d'abord établie par une analyse en composante principale (ACP). Les sorties de LADTA sont ensuite projetées sur ce sous-espace réduit. Enfin, les relations entre les coefficients de projection et les entrées du LADTA sont reproduites par un émulateur statistique, reposant sur des fonctions de base radiales (RBF). Ces approches sont appliquées dans un cas d'étude sur l'agglomération de Clermont-Ferrand. En comparant avec les observations du trafic par les boucles de comptage, la performance du méta-modèle est comparable avec celle du modèle LADTA complet, avec un temps de calcul significativement réduit (de l'ordre de deux heures à moins d'une seconde, pour simuler le débit à l'heure de pointe du matin). Dans un second temps, ce méta-modèle de LADTA sera couplé avec COPERT IV, afin d'estimer l'incertitude de la modélisation des émissions en perturbant à la fois les entrées de LADTA, et aussi du modèle COPERT IV. Ces études sont intégrées dans le projet ANR ESTIMAIR, dont l'objectif est d'étudier la propagation des incertitudes dans l'ensemble de la chaîne de modélisation de qualité de l'air.

## MOTS CLES

Affectation dynamique du trafic, méta-modèle, analyse en composante principale (ACP), émulateur, incertitudes, émissions du trafic routier



# Analyses l'endommagement de tubes composites SiC/SiC par la tomographie en rayon X et la simulation FFT

## AUTEURS

Yang Chen, Lionel Gélébart, Camille Château, Michel Bornert, Andrew King, Patrick Aïmedieu, Cédric Sauder

## Résumé

Les composites SiC/SiC sont étudiés pour remplacer les matériaux constituant le gainage du combustible nucléaire dans des réacteurs à fission de génération future (génération IV), et, plus récemment, dans des réacteurs à eau plus classiques afin d'améliorer la tenue du gainage en situation accidentelle. Ces composites SiC / SiC présentent un comportement mécanique non linéaire endommageable régi par une microfissuration au sein du matériau. Le but du travail est de mieux comprendre ces mécanismes d'endommagement 3D par la tomographie et la simulation numérique.

Des essais de traction in situ ont été réalisés sur la ligne PSICHE du synchrotron SOLEIL. Les images obtenues contiennent une grande richesse d'informations sur la microstructure et les mécanismes d'endommagements à l'intérieur du matériau. Toutefois, ces informations sont mêlées dans l'image 3D, dans laquelle sont également présents différents artefacts, et leur extraction nécessite la mise en place d'un post-traitement élaboré. Celui-ci se compose des points suivants: (i) Dans l'image de référence (non chargée), les pores sont identifiés et distingués en fonction de leurs caractéristiques géométriques. Leurs distributions spatiales sont analysées et peuvent être utilisées pour repérer la microstructure. (ii) Les composantes de déformation moyennes sont mesurées à l'aide de la technique DVC. Leurs évolutions sur l'épaisseur du tube sont quantifiées. (iii) En utilisant une technique de soustraction d'images par DVC, les fissures 3D induites par le chargement sont extraites du milieu hétérogène pour chaque niveau de chargement. (iv) L'évolution avec le chargement des fissures détectées est d'abord étudiée qualitativement par des visualisations appropriées (2D ou 3D). Une analyse plus quantitative permet d'extraire des quantités statistiques pour caractériser le réseau de fissures. En particulier, la surface et l'ouverture de fissure sont quantifiées par une méthode basée sur les niveaux de gris et les orientations locales des voxels de fissures.

Les images tomographiques alimentent directement la simulation numérique basée sur l'algorithme de transformée de Fourier rapide (FFT). Grâce à son implémentation massivement parallèle, le code AMITEX\_FFTP (développé au CEA) permet de réaliser la simulation à partir des images expérimentales de haute résolution (e.g. 1977x1977x1685). On peut noter que la forme tubulaire utilisée ici n'est pas une application classique pour ce type de simulation, et certaines validations préalables (e.g. sensibilité à la résolution d'image, effet de la périodicité des conditions aux limites) sont présentées. Des analyses sur la distribution des contraintes élastiques permettent d'établir un dialogue entre les fissures détectées et la simulation numérique.

## MOTS CLES

Composites à matrice céramique, Essai in situ sous tomographie en rayon X, Mesure quantitative, simulation FFT



# Influence des Paramètres technologiques de formulation et de mise en œuvre sur les aspects de parements

## AUTEURS

Edgar Chuta

## Résumé

Le parement est la face d'un élément de construction conçu pour rester apparente et qui peut faire l'objet de nombreux traitements mécaniques ou chimiques. Il constitue la peau de l'ouvrage et il doit résister aux diverses agressions auxquelles est soumise la structure pendant sa durée de service. L'aspect et la qualité des parements dépendent des constituants des bétons, des dispositions adoptées lors de la mise en œuvre et des paramètres de conservation ou des traitements de surface éventuels après démoulage.

Parmi les principaux paramètres influençant sur la variation de la couleur (luminance= $L^*$ ) dans les parements, l'influence du rapport E/C et de la rugosité de la surface reste incertain à cause des avis divergents entre les auteurs. Pour cette raison, nous avons étudié l'influence de la couleur de surfaces de matériaux cimentaires en fonction de rapport E/C et de la rugosité. A partir de nos essais expérimentaux dans les pâtes de ciment et les mortiers, nous avons constaté que l'augmentation du rapport E/C éclaircit le parement et diminue sa rugosité de surface. Donc, il y a une relation directe entre la luminance et le rapport E/C, et une relation inverse entre luminance et la rugosité.

La variation du rapport E/C est l'un des éléments influençant le comportement rhéologique des matériaux cimentaires à l'état frais. A partir de cette logique, nous avons réalisé la simulation de l'écoulement des pâtes de ciment pour déterminer l'aspect final (rugosité). Pour la simulation numérique nous avons utilisé le concept de densité qui varie selon le rapport E/C de formulation utilisé. Plus en augmente le rapport E/C et plus la densité diminue. Les propriétés rhéologiques de pâtes de ciments (viscosité et seuil de cisaillement) déterminent le temps d'écoulement et l'aspect de surface. La modélisation numérique a été réalisée en utilisant le logiciel COMSOL multiphysics basé sur la méthode des éléments finis (MEF). Nous avons utilisé la loi de Bingham-Papanastasiou pour déterminer le comportement des pâtes de ciment en le considérant comme un milieu homogène. Selon nos résultats numériques, la rugosité de la partie libre supérieure de la pâte coulée (sans coffrage) varie selon la densité du fluide. Plus la densité est importante est plus la rugosité l'est aussi. Donc, nous avons réussi déterminer la relation entre rapport E/C et la rugosité, expérimentalement et numériquement.

Le comportement rhéologique des pâtes de ciment, va nous permettre de déterminer l'aspect final de la surface de matériaux cimentaires, dont la luminance. Ainsi que la compréhension de la rhéologie puisse être utilisé dans un chantier numérique via l'impression 3D.

## MOTS CLES

Parement, Rhéologie, Luminance, Rapport E/C, Simulation numérique,



# Cycle des séminaires Constructibilité de l'IRC

## AUTEURS

Francesca CONTRADA, Gilles THING LEO, Nicolas ZIV

## Résumé

Les projets de constructions actuels peuvent conduire, à des dérives sur les coûts, les délais et les atteintes des performances envisagées en phase de programmation et de conception. La prise en compte des aléas et des expositions à ces aléas du produit à construire et du projet permet une réduction des risques de dégradation de la performance des ouvrages, ainsi que de respecter les coûts et les délais des projets.

Cette démarche est théorisée par la discipline de la « Constructibilité ». Ce concept tient ses racines des termes anglais « Buildability » et « Constructability » :

- Buildability : concept lié à la qualité du produit, la facilité de mise en œuvre et à l'efficacité et la rentabilité de la construction.
- Constructability : utilisation optimale des connaissances et des expériences pendant les différentes phases du projet pour atteindre les objectifs fixés.

En France le terme Constructibilité revêt un sens large, incluant les deux définitions et se positionnant comme une démarche qui vise à fournir, dès le lancement du projet, une assurance raisonnée quant à l'atteinte des objectifs de tout projet de construction sur son cycle de vie. Son objectif est de garantir les performances d'usages attendues par les utilisateurs finaux. Il est indispensable de sensibiliser les acteurs de la construction et de mettre en place une démarche qui puisse bien répondre aux problématiques de cette industrie.

Le cycle des séminaires Constructibilité est né de la réflexion commune au sein des équipes de l'IRC, afin d'explorer un concept nouveau à l'interface des milieux académiques et industriels. En effet l'enrichissement des champs de recherche autour de la constructibilité est une étape préalable à son déploiement opérationnel dans la filière du BTP. Ainsi, différents sujets sont problématisés et discutés successivement suivant un cheminement logique afin de construire et développer collectivement des connaissances et des méthodologies partagées par l'IRC et ses partenaires.

Chaque séminaire est aussi l'occasion pour l'IRC de valoriser ses travaux de recherche en amorçant les débats avec la présentation d'articles introductifs à la problématique traitée. Ce travail préliminaire renforce ainsi la transversalité des travaux au sein des équipes de l'IRC et l'implication des doctorants.

Le premier séminaire a eu pour thème l'analyse fonctionnelle et a permis de mettre en perspective les apports de cette méthodologie dans le domaine du génie civil. En effet l'analyse fonctionnelle est une méthodologie permettant de capter les besoins des usagers et fournit un cadre structuré pour la formalisation des fonctions techniques répondants à ces besoins. En ce sens, l'exploration de cette méthode constitue un point de départ justifié pour le cycle des séminaires Constructibilité. En outre, les discussions se sont portées aussi sur l'Ingénierie Système en tant que méthodologie permettant de maîtriser le développement des produits complexes. Les sujets des prochains séminaires seront : la **performance** (juin 2017) et l'**analyse des risques** (octobre 2017).

## MOTS CLES

Constructibilité, séminaires de recherche, capitalisation des connaissances, infrastructures, bâtiments



# La dégradation de la maîtrise de la performance du bâtiment. L'approche holistique de la constructibilité pour des nouvelles solutions de façade.

## AUTEURS

Francesca CONTRADA

## Résumé

Les projets de construction actuels peuvent rencontrer des dérives sur les coûts, sur les délais et sur les atteintes des performances envisagées au début de l'opération immobilière. Il demeure nécessaire de pouvoir maîtriser et évaluer la performance globale à partir des phases de programmation et de pré-conception. Des bonnes démarches sont représentées par le « *design-assist process* », le « *integrated design process* », la prise en compte des méthodes LEED, BREEAM, HQE ou par les outils d'aide à la décision. Une démarche de ce type est également théorisée par la discipline de la « Constructibilité » qui vise à fournir, dès le lancement du projet, une assurance raisonnée quant à l'atteinte des objectifs de tout projet de construction sur son cycle de vie. D'autre part, le secteur de la construction rencontre l'exigence d'évoluer rapidement pour atteindre des niveaux de performance de plus en plus élevés (efficacité énergétique, performance environnementale et confort). Un rôle principal est joué par l'enveloppe, qui se place comme interface entre l'environnement extérieur et l'intérieur, donc comme élément régulateur des échanges possibles entre les deux milieux. Sur le plan de l'innovation, des nouveaux systèmes multifonctionnels de façades dites adaptatives sont en développement. Par contre la maîtrise de la performance pour ces principes techniques demeure incertaine en phase de pré-conception, demandant une étude plus poussée sur chaque prototype conçu.

Il demeure alors indispensable de :

- 1) Mettre en place une approche fonctionnelle intégrant les attributs performanciers en fonction des besoins de l'utilisateur ;
- 2) Définir clairement la performance attendue, de façon quantifiable, prenant en compte les principes techniques innovants, en amont

L'objectif de la thèse est de maîtriser la performance du bâtiment à travers une approche holistique basée sur les fonctions d'usage parallèlement aux critères de performances d'un produit innovant, tel que les façades adaptatives. Le résultat sera une méthodologie pour l'évaluation de la performance globale du bâtiment en amont du processus de construction.

L'enjeu est donc de placer au centre de l'étude l'utilisateur, en considérant le bâtiment au service de l'occupant, pour définir des critères de performance plus cohérentes, en enrichissant ces définitions à l'aide des démarches fournies par les labels et les méthodes actuellement utilisées. Parallèlement, un deuxième enjeu concerne la maîtrise de l'impact que les principes techniques innovants ont sur le niveau de performance globale. La méthodologie est développée à l'aide de modèles paramétriques et d'outils de simulation, ce qui permet d'en vérifier l'applicabilité pour des cas d'étude donnés. Elle envisage un changement des pratiques actuelles de l'industrie de construction et une approche virtuelle pour les acteurs de demain.

## MOTS CLES :

Constructibilité, approche holistique, performance globale, labels, façades adaptatives, simulation



# Assimilation de données avec Code\_Saturne pour des applications micro-météorologiques à l'échelle locale.

## AUTEURS

Cécile Defforge, Bertrand Carissimo, Raphaël Bresson.

## Résumé

Les simulations réalisées avec la version atmosphérique de Code\_Saturne (code CFD open source : [www.code-saturne.org](http://www.code-saturne.org)) permettent de traiter différentes questions liées à la micro-météorologie telles que la dispersion des effluents autour de sites industriels, la qualité de l'air dans les quartiers urbains ou encore l'étude du vent et de la turbulence pour les applications éoliennes.

Les données d'entrée du modèle (conditions initiales et conditions aux limites) sont généralement des données météorologiques provenant de mesures ou de résultats de modèles de plus grande échelle. Elles sont souvent peu précises, ne contiennent pas toute l'information nécessaire et ne sont pas adaptées aux détails fins du domaine local, en particulier la topographie ou la présence de bâtiments. Lorsque des mesures in situ sont disponibles, elles peuvent être mises à profit pour améliorer la précision des simulations, par le biais de techniques d'assimilation de données. Ces techniques visent à fournir la meilleure estimation possible de l'état d'un système en tenant compte de toutes les données disponibles (résultats de modèles, mesures, incertitudes associées à chacun, etc.)

Les techniques d'assimilation de données développées à ce jour dans le domaine de la météorologie sont appliquées à des modélisations à grande échelle qui sont largement influencées par les conditions initiales et traitent des géométries simples. L'objet de ce travail est d'adapter ces techniques à des modélisations à des échelles plus fines, celles-ci étant essentiellement pilotées par les conditions aux limites et traitant des géométries potentiellement très complexes.

Les performances des méthodes d'assimilation de données à petite échelle sont d'abord évaluées sur un cas simple d'écoulement peu profond, modélisé par les équations de Saint Venant 1D/2D. On vérifie en particulier que les simulations à petite échelle sont davantage sensibles aux erreurs portant sur les conditions aux limites qu'à celles portant sur les conditions initiales.

La méthode de *nudging*, ou relaxation Newtonienne, consiste à modifier les équations d'évolution du système en ajoutant un terme de rappel proportionnel à la distance entre l'état simulé et les observations. Une méthode relativement récente est le *Back and Forth Nudging* qui consiste à intégrer successivement le modèle, en temps direct et rétrograde sur une même fenêtre temporelle, avec un terme de *nudging* de signe opposé dans le sens direct et rétrograde. Les performances et les limitations de cette méthode sont évaluées et comparées à celles de méthodes plus classiques telles que le filtre de Kalman d'ensemble et 4D-VAR.

## MOTS CLÉS

Assimilation de données, micro-météorologie, CFD, Code\_Saturne.



# Amélioration de la prédiction de quantités d'intérêt par modélisation inverse: application à la thermique du bâtiment.

## AUTEURS

Zohra Djatouti, Julien Waeytens, Ludovic Chamoin, Patrice Chatellier.

## Résumé

L'élaboration de diagnostics de performance énergétique représentatifs du comportement réel d'un bâtiment existant nécessite une bonne connaissance des propriétés thermiques des matériaux constituant son enveloppe ainsi que de ses systèmes énergétiques. Malheureusement, ces données ne sont généralement pas disponibles.

Le présent travail porte sur une stratégie inverse pour l'identification de paramètres de modèles thermiques, à savoir la méthode de recalage de paramètres vis-à-vis d'une quantité d'intérêt. Contrairement aux méthodes usuelles qui cherchent à recalculer l'ensemble des paramètres du modèle, cette méthode originale vise à identifier uniquement le jeu de paramètres intervenant dans le calcul d'une quantité d'intérêt définie.

Afin d'évaluer la performance de la méthode de recalage de paramètre vis-à-vis d'une quantité d'intérêt dans le cadre de problèmes d'identification de paramètres de modèles thermiques, la méthode est mise en œuvre sur un modèle mono-zone simplifié de thermique du bâtiment. Dans une première étape, le problème est traité en régime stationnaire et les paramètres à identifier sont la conductivité thermique globale de l'enveloppe et son coefficient d'échange convectif extérieur. Ensuite, le problème est traité en régime dynamique pour identifier la capacité thermique globale de l'enveloppe, en plus des deux paramètres précédents.

La robustesse de la méthode inverse d'identification de paramètres vis-à-vis d'une quantité d'intérêt est testée sur différents niveaux de bruit de mesure et sur des jeux de données de capteurs pris à différents emplacements et ce en régime stationnaire et en régime dynamique. Les résultats de la procédure de recalage sont comparés à ceux obtenus avec deux méthodes inverses plus courantes, à savoir la méthode de régularisation de Tikhonov et l'approche de l'erreur de relation de comportement.

Les premiers résultats montrent une plus grande précision de la méthode inverse de recalage de paramètres vis-à-vis d'une quantité d'intérêt. Cette plus grande précision porte non seulement sur l'identification de la quantité d'intérêt mais aussi sur l'identification des paramètres du modèle impliqués dans son calcul. Cette performance est atteinte pour un nombre de données d'instrumentation et un temps de calcul réduits. Une faible sensibilité au bruit de mesure de la méthode de recalage de paramètres vis-à-vis d'une quantité d'intérêt est également relevée en comparaison avec les deux méthodes classiques.

## MOTS CLES

Problèmes inverses, identification de paramètres, quantité d'intérêt, thermique du bâtiment,



# Modélisation des écoulements eau-vapeur « tous régimes d'écoulements » par une approche multi-champ

## AUTEURS

Solène Fleau, Stéphane Mimouni, Stéphane Vincent

## Résumé

La compréhension des écoulements à bulles dans les centrales nucléaires demeure encore un élément limitant dans l'analyse des opérations et de la sûreté des installations. Pour ne citer qu'un exemple, l'amélioration de la durée de vie et de la performance des générateurs de vapeur nécessite d'appréhender les régimes d'écoulement au sein des tubes qui sont responsables de leur vibration. Cependant, pour simuler avec précision ces écoulements, les codes de simulation numérique doivent relever de nombreux défis parmi lesquels la capacité à simuler des inclusions gazeuses ayant des tailles très variées. Dans cette thèse réalisée avec le département de Mécanique des Fluides, Énergie et Environnement (MFEE) d'EDF R&D D et le laboratoire MSME de l'UPEM, une nouvelle approche, appelée approche multi-champ, est implémentée dans le code NEPTUNE\_CFD, cofinancé par le CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Energies Alternatives), EDF (Électricité de France), l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) et AREVA NP.

Pour simuler de tels écoulements, l'approche multi-champ considère séparément les petites inclusions sphériques des grandes inclusions déformables. Ainsi, les petites structures sphériques sont définies via un champ eulérien dispersé évoluant au sein d'un champ continu porteur. Les grosses bulles déformables sont considérées comme des interfaces entre deux champs continus, un champ liquide et un champ gaz. Si on prend l'exemple d'un écoulement diphasique avec de l'eau et des bulles d'air de différentes tailles, trois champs sont alors définis pour cet écoulement: un champ continu liquide, un champ continu gaz et un champ dispersé gaz contenant les petites bulles sphériques. Cependant, simuler avec précision des interfaces entre deux champs continus nécessite le développement de traitements spécifiques afin de coupler les deux champs à l'interface et de limiter la diffusion de cette interface.

Après avoir amélioré la simulation des interfaces dans des écoulements laminaires, les effets liés à la turbulence sont étudiés. Une étude a priori de simulations aux grandes échelles est proposée pour comparer différents modèles de turbulence disponibles dans la littérature. Les changements de phase sont ensuite explorés via le développement d'un modèle spécifique pour le terme de transfert de masse. Pour finir, des simulations trois champs sont présentées. De nouveaux critères sont définis pour modéliser la fragmentation des grandes inclusions déformables en petites bulles sphériques ainsi que la coalescence de ces dernières pour former de grandes bulles déformables.

A chaque étape de l'implémentation des différents modèles évoqués, des validations basées sur des données analytiques et issues d'expériences sont présentées afin de s'assurer que les phénomènes physiques sont bien prédits. Des cas tests dans des configurations industrielles sont également détaillés pour montrer la capacité de l'approche développée à simuler des écoulements complexes.

## MOTS CLES

Écoulements multi-phases, Modèle bi-fluide, Approche multi-champ, Couplage de modèles.



# Modélisation de l'entraînement d'air dans la méthode SPH

## AUTEUR

Thomas Fonty

## Résumé

Les écoulements au sein d'ouvrages hydrauliques – déversement au-dessus d'un barrage, déferlement d'une vague sur une digue, etc. – mettent en jeu des phénomènes complexes. Très déformés, ces écoulements sont le siège de mélanges diphasiques, notamment à cause de l'entraînement de bulles d'air par l'eau (formation d'eau blanche). Représenter fidèlement ces mélanges revêt un aspect stratégique important pour le dimensionnement des ouvrages, le comportement de l'écoulement étant fortement modifié par la présence d'air. La modélisation tant physique que numérique de tels cas s'avère délicate. La méthode numérique SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*), approche totalement lagrangienne qui représente l'écoulement comme un ensemble de particules en mouvement sans recours à un maillage, est particulièrement adaptée à la simulation d'écoulements fortement déformés.

Néanmoins, l'emprise large des cas d'application industriels en hydraulique ne permet pas de raffiner de manière importante la discrétisation. On se propose donc d'adopter un modèle diphasique moyenné : les phases eau et air sont représentées par des fractions volumiques en chaque point du mélange. Chaque particule porte une certaine concentration de chaque phase et il n'est donc pas nécessaire d'avoir une discrétisation de l'ordre de la taille d'une bulle d'air. Deux voies sont alors possibles : un modèle où chaque phase est modélisée par une équation de continuité et une équation de quantité de mouvement, avec des termes supplémentaires prenant en compte les forces échangées entre les phases (traînée et inertie des bulles en particulier), ou un modèle homogène avec une seule équation de continuité et de quantité de mouvement utilisées pour le mélange, et mobilisant des grandeurs de mélange (reliées aux grandeurs des phases via les fractions volumiques). C'est cette dernière voie qui est retenue pour l'implémentation d'un premier modèle diphasique dans la méthode SPH.

Le travail de ce début de thèse consiste donc en l'écriture et l'implémentation du formalisme SPH de ces équations, dans le logiciel de recherche Sphynx développé à EDF R&D. Il s'agira ensuite de valider ce modèle sur des cas académiques de complexité croissante, et de l'enrichir pour la prise en compte de la complexité du phénomène d'entraînement d'air : aspiration de l'air à la surface libre, influence de la distribution des tailles de bulles, dynamique du mouvement des bulles, interactions avec la turbulence. Enfin, l'application à au moins un cas industriel réel pourra être envisagée.

## MOTS CLES

SPH, diphasique, entraînement d'air, turbulence, ouvrages d'eau



# Manufacturing of a Mechanical Vibration Absorber to Reduce the Tremor at the Hand of a Parkinson's Patient

## AUTHORS

Sarah Gebai, Mohammad Hammoud, Gilles Foret and Gwendal Cumunel

## Abstract

The involuntary tremor worsens the quality of life for patients suffering from Parkinson disease (PD) and leads to reduced community ambulation. These patients face difficulties in achieving some needed tasks like writing, drinking and eating, etc... Recently, the mechanical treatment was used as a solution to suppress the tremor leaving no serious side effects. Some researchers used the dynamic vibration absorber (DVA) as a mechanical treatment for PD. This project is based on modeling the human hand, describing its behavior and identifying the characteristics of the involuntary tremor to design the suitable tremor suppression device. A large numerical study is done to check the ability of different types of passive DVAs in reducing the tremor of three degrees-of-freedom (DOF) modeled hand system. The designed DVAs are: single degree of freedom (SDOF) conventional absorber, two DOF parallel conventional absorbers, two DOF series conventional absorbers, SDOF elastic-damper absorber and SDOF elastic absorber with SDOF viscous damper absorber. The absorbers parameters are chosen to satisfy the tuning condition(s). A comparison is done between the performance of these passive DVAs in time and frequency domains. These absorbers cause numerically high percentage of reduction in tremor's amplitude at their tuning frequencies and along their frequency bandwidth, but they increase the total number of resonance frequencies. Controllers of this category, the passive one, have a main advantage of the operation without power requirement. However, the passive controller has fixed characteristics and can tune the structure at fixed frequencies, which require in the experimental work the usage of an alternative type of treatment. Active and semi-active controllers can be a good choice and are able to auto-tune the structure in real time. The disadvantage of using the active control is known to be its requirement of a large power source, but semi-active controllers can operate using limited power like a battery. This fact can be tested after designing the active and semi-active controllers suitable to reduce the PD tremor of a real patient. A comparison can be done between the passive, active and semi-active controllers to check their: performance, power requirement, cost, design difficulties, ability to adapt the environmental changes, life time of operation and the effect on patient's comfort. The DVAs can disturb the patient due to the added proof mass to his hand. The designed mass, spring and damper of the dynamic absorber can have its analogous electrical parameters, i.e. it can be replaced by resistors, capacitors and filters. Then, the mass of the absorber can be added without increasing the actual total mass of the structure. The research can be developed more by designing an advanced multi-functional energy harvesting device that can store energy and provide support to the structural loads using piezoelectric material to activate the controller.

## KEY WORDS

Vibration absorber, Involuntary tremor, active control



# Modeling for cement-based materials exposed to external sulfate attack or delayed ettringite formation

## AUTHORS :

Yushan GU, Patrick DANGLA, Teddy FEN-CHONG, Othman OMIKRINE-METALSSI, Renaud-Pierre MARTIN

## ABSTRACT :

Sulfate attack is a well-known concrete degradation phenomenon induced by crystallization of ettringite, including external sulfate attack (ESA) and delayed ettringite formation (DEF). The differences between these two phenomenon are sources of sulfate ions and the position of ettringite formed. For ESA, the sulfate ions diffuse from the exterior solution, and ettringite forms in the capillary pores. While for DEF, the sulfate ions are released from the CSH and contribute to ettringite crystallization in gel pores. A model, based on the homogeneous paste expansion and surface-controlled ettringite growth mechanism, is proposed to explain the both phenomenon in a uniform method. The crystallization pressure resulting from the supersaturated sulfate solution is believed to be the driving force for this mechanism. The ettringite forms first in the largest pores and then progresses to the smallest ones, no matter it is in capillary pores (ESA) or gel pores (DEF). When a crystal of ettringite nucleates on the pore wall, it will grow by consuming the excess of solute, and it will begin to exert stress on the solid matrix after it grows into contact with the opposite wall of the pore. The solid/crystal interface will rapidly reach equilibrium by exerting stress on the wall. Meanwhile the liquid/crystal interface will be out of equilibrium and will grow with a rate governed by an interface controlled growth mechanism until the crystal eventually sustains an isotropic stress state. Thus final stress state is obtained when the interfaces have reached a small enough radius of curvature as predicted by the Ostwald-Freundlich equation. The volume fraction of crystal,  $Sc(r)$ , is introduced to describe the saturation degree of the crystal, which is related to the pore entry radius. In addition a poroelastic model is employed to predict the linear expansion of homogeneous samples exposed to sulfate attack. The comparison between the simulation and experimental results in literature shows good agreement.

## KEY WORDS :

sulfate attack, poromechanical model, surface-controlled ettringite growth mechanism



# Approche multi-physique du vieillissement sur les matériaux pour applications photovoltaïques

## AUTEURS

V. Guiheneuf, O. Riou, F. Delaleux, P.-O. Logerais, J.-F. Durastanti

## Résumé

Notre approche consiste en l'étude de la durabilité de chacun des matériaux composant un système PV via l'utilisation de tests de vieillissement accéléré. Il est choisi pour chaque matériau le vieillissement accéléré le plus agressif : chaleur humide ou UV. L'objectif est de comprendre et définir dans un premier temps les mécanismes de dégradation de chacun des matériaux constitutifs du panneau solaire (**verre**, **polymère Ethylène-Acétate de Vinyle (EVA)** et **cellule PV**) sans prendre en compte leurs interactions. Un ensemble de caractérisations physiques, chimiques et électriques sont effectués selon le matériau étudié.

Le **verre sodo-calcique** a été étudié sous **chaleur humide** (85°C et 85% HR). Le vieillissement du verre est induit par une hydratation du verre engendrant une lixiviation (ou diffusion hors du verre) d'éléments chimiques tels que Na, Ca et K. A la surface, la corrosion du verre se fait par hydrolyse du réseau vitreux Si-O-Si. La transmittance s'en trouve améliorée ce qui peut avoir un effet bénéfique pour la conversion PV. Malheureusement, cette augmentation de transmittance, plus importante dans les UV, peut amplifier la dégradation du polymère EVA se trouvant juste derrière et connu pour sa sensibilité aux UV.

Le **polymère EVA** a été soumis aux **UV**. L'influence de la température de lamination, un procédé de mise en forme du polymère dans un panneau PV, a été testé et a montré qu'il n'y a aucun impact sur la transmittance initiale. En revanche, une température de lamination plus élevée (155°C) permet de diminuer la transmittance aux UV au cours du vieillissement. Ceci peut réduire la dégradation du matériau situé après, la cellule PV. La transmission des rayonnements visibles, utilisés pour la conversion photovoltaïque, n'est que faiblement impactée.

Les **cellules PV** exposées aux **UV** présentent une diminution significative des performances électriques avec un taux de dégradation du rendement de -11,23% après une exposition de 200 kWh/m<sup>2</sup>. La dégradation est principalement due à une détérioration de la tension en circuit ouvert (-6,24%) et du courant de court-circuit (-3,16%). La photo-oxydation de la couche antireflet SiNx provoque une diminution de la réflectivité. Donc la détérioration de la passivation implique le remplacement de la liaison Si-H par les liaisons Si-O et Si-O-H dans la couche antireflet SiNx. La non-dégradation des contacts en Ag est expliquée par leur forte réflectivité, l'absence d'humidité ou d'interaction avec le polymère EVA. À faible intensité (600 W/m<sup>2</sup>), la cinétique de dégradation consiste en une dégradation rapide suivie par une stabilisation. Pour une forte irradiation (2000 W/m<sup>2</sup>), un phénomène de régénération est constaté grâce à de plus fortes températures permettant une neutralisation des centres recombinants. Plus l'exposition aux UV est prolongée, plus les performances électriques se rapprochent de celles de l'état initial.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Photovoltaïque, vieillissement accéléré, caractérisations multi-matériaux, mécanismes de dégradation



# Abatement des polluants prioritaires et émergents par charbon actif

## AUTEUR

Ronan Guillossou (LEESU)

## Résumé

Les travaux engagés en début de la phase 4 du programme OPUR (2012-2017) se sont intéressés à l'échelle d'un pilote industriel à l'élimination de nombreux micropolluants prioritaires et émergents par charbon actif. Si cette technologie est couramment employée pour la production d'eau potable, cette dernière n'a été transférée que depuis peu au domaine des eaux usées et les connaissances sur ses performances sont encore limitées.

Cette thèse est encadrée par [Johnny Gaspéri](#) et [Julien Le Roux](#) et est menée en étroite collaboration avec la Direction du Développement et de la Prospective du SIAAP. Elle s'appuie sur une double approche, à la fois sur le pilote industriel de traitement des eaux usées par charbon actif mis en œuvre par le [SIAAP](#) sur la station d'épuration de Seine Centre et diverses expériences au laboratoire. La thèse s'inscrit dans la continuité des travaux précédents (*Mailler, 2015*) et s'organise autour de trois axes d'études.

Le premier concerne l'optimisation du procédé (lit fluidisé de charbon actif), en s'intéressant tout d'abord à l'influence du type de charbon utilisé. Plusieurs charbons actifs en micro-grains sont caractérisés et testés en laboratoire et le plus prometteur sera ensuite testé à l'échelle industrielle. Les performances d'élimination seront comparées à celles des précédents charbons utilisés sur le pilote (charbons en micro-grains et en poudre). D'autre part, une attention est portée sur l'influence des conditions d'exploitation du procédé, notamment ses performances sans renouvellement du lit de charbon pour estimer l'importance du lit de charbon vis-à-vis de l'ajout de charbon neuf. Enfin le couplage du charbon avec une pré-ozonation sera étudié au laboratoire pour évaluer son potentiel vis-à-vis des molécules faiblement abattues par le charbon seul.

Le second axe porte sur la caractérisation fine des performances, avec tout d'abord l'utilisation d'outils tels que l'absorbance UV à 254 nm et la fluorescence 3D qui sont deux paramètres permettant de caractériser la matière organique dissoute et dont les abattements sont corrélés avec celui des micropolluants (*Anumol et al., 2015; Mailler et al., 2016*). Un autre outil utilisé est le screening non-ciblé par spectrométrie de masse haute résolution, qui permet de suivre l'évolution globale des molécules organiques et d'identifier des produits inconnus. Les résultats seront croisés avec ceux de la fluorescence 3D et de l'UV à 254 nm à l'aide de statistiques multilinéaires. Un suivi analytique ciblé est aussi mis en place, avec l'analyse de molécules émergentes telles que des biocides ou des néonicotinoïdes en plus d'un pool classique (antibiotiques, hormones, analgésiques, ...). De plus des campagnes de prélèvement le long de la filière eau d'une station d'épuration seront réalisées pour estimer le poids du procédé étudié dans l'élimination des micropolluants organiques par rapport aux traitements primaires et secondaires.

Le troisième et dernier axe s'intéresse au processus d'adsorption des micropolluants sur le charbon actif, avec l'étude de données issues d'isothermes d'adsorption obtenus en laboratoire et la recherche de corrélations avec les propriétés des micropolluants, des charbons actifs et les données obtenues sur le pilote. Des expériences seront aussi menées pour modéliser l'adsorption des micropolluants sur la surface externe puis la migration à l'intérieur du charbon.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Micropolluants, charbon actif, adsorption, ozonation, eaux usées



# Caractérisation thermophysique d'un ciment renforcé par des fibres naturelles d'origine marine *Posidonia Oceanica*

## AUTEURS

Ons HAMD AOUI, Atef MAZIOUD, Laurent IBOS

Université Paris-Est, CERTES / OSU Efluve, 61 Av. du Général de Gaulle - 94010 Créteil Cedex

## Résumé

L'intégration des fibres naturelles cellulosiques dans les matériaux de construction est un domaine de recherche en forte croissance en raison de la disponibilité de ces renforts, leur biodégradabilité, leur faible coût ainsi que leurs propriétés thermiques et/ou mécaniques prometteuses. D'autre part, leur production ne nécessite pas une grande technicité. Pour cela, les composites à fibres naturelles peuvent être une alternative intéressante aux composites à fibres synthétiques.

C'est dans ce contexte que nous avons choisi d'investir dans l'étude de l'incorporation des fibres d'origine végétale extraites des boules de la plante marine méditerranéenne *Posidonia Oceanica* dans une pâte de ciment en vue de leur utilisation dans un béton de fibres. Pour ce faire, des mélanges de ciment avec des taux de charges relativement faibles ont été élaborés. Ces dosages en fibres brutes varient de 0 à 20% en volume avec un pas de 5%. Par ailleurs, pour le taux de chargement le plus élevé, d'autres séries d'échantillons ont été préparées avec des fibres traitées chimiquement par de l'hydroxyde de sodium (NaOH). Trois traitements chimiques ont été considérés.

La microstructure des fibres ainsi que la variation de leurs propriétés thermophysiques en fonction de la masse volumique et du traitement chimique ont été étudiés. Les propriétés thermophysiques des composites ont été suivies au cours du séchage en utilisant la méthode du Hot-Disk et corrélées à l'évolution de la masse volumique.

Les résultats des mesures montrent que les conductivités thermiques des fibres sont entre 0.04 W.m.K<sup>-1</sup> et 0.07 W.m.K<sup>-1</sup> pour des densités qui varient de 17 à 155.

L'analyse des résultats expérimentaux des composites montre une diminution de la masse volumique et de la conductivité thermique au cours du séchage. On constate également que l'augmentation de la fraction volumique des fibres s'accompagne d'une amélioration des propriétés isolantes des matériaux pour leur application envisagée dans le secteur de construction. Entre autres, une diminution de 22% sur la valeur de la conductivité thermique a été notée avec le composite chargé par 20% de fibres par rapport à l'échantillon de ciment témoin. En revanche, l'influence du traitement chimique des fibres sur les propriétés thermophysiques des composites n'est pas significative.

## MOTS CLES

ciment, fibres, séchage, fraction volumique



# Caractérisation de la matière organique de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko

## Auteur:

Robin Isnard

## Résumé:

Les comètes comptent parmi les objets les plus primitifs et les plus riches en matière organique du Système Solaire. Les observations par télédétection sur la Terre ont permis d'identifier plus d'une vingtaine de molécules organiques simples en phase gazeuse. D'autre part, les missions d'exploration in situ (Giotto, Véga-1 et Véga-2) et la mission avec retour d'échantillons Stardust, ont établi qu'en plus de ces molécules volatiles relativement simples, une fraction notable de la matière carbonée cométaire est présente sous forme d'un matériau réfractaire restant en phase solide dans les grains cométaires.

La mission spatiale Rosetta a effectué de nombreuses analyses de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko d'Aout 2014 à septembre 2016. A bord de l'orbiteur de cette mission se trouvait l'instrument COSIMA (Cometary Secondary Ion Mass Analyzer) qui est un spectromètre de masse d'ions secondaires à temps de vol chargé de déterminer la composition élémentaire et moléculaire des particules solides collectées dans l'environnement de la comète. Le LISA (Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques) et le LPC2E (Laboratoire de physique et chimie de l'environnement et de l'Espace) ont participé à la définition des opérations et aux premières interprétations des observations réalisées par cet instrument. Les récentes observations réalisées par cet instrument permettent de confirmer la présence de matière organique dans les grains cométaires. Ces premières interprétations semblent indiquer que la matière organique présentes dans les particules cométaires est analogue à la matière insoluble extraite des météorites carbonées les moins altérées.

Afin de caractériser le plus précisément possible la nature chimique de la matière organique observée grâce à l'instrument COSIMA, les spectres des particules cométaires doivent être comparés aux spectres obtenus sur des nombreux échantillons de référence dont la nature est connue grâce aux deux instruments « sol » de COSIMA : le premier étant localisé au LPC2E à Orléans et le second au Max Planck Institute de Göttingen en Allemagne. Un premier axe de travail est l'interprétation des nombreux spectres de référence obtenus sur des échantillons de graphite, de matière organique insoluble terrestre, etc... Un deuxième axe est la synthèse de matière organique complexe grâce au dispositif « OREGOC » (Origine et Evolution des Glaces et des composés Organiques Cométaires) disponible au LISA par photolyse et chauffage des mélanges de glaces. Une fois produits, ces échantillons sont analysés grâce aux deux instruments « sol ».

Ainsi, l'objectif est de reproduire les observations réalisées sur des grains de la comète 67P/Churyumov Gerasimenko (par l'instrument de vol COSIMA) à partir d'échantillons synthétiques afin de préciser au mieux l'origine de la matière organique cométaire ainsi que son évolution chimique jusqu'à son éjection du noyau.

## MOTS CLÉS:

Comète, matière organique, grains cométaires, simulation, spectrométrie de masse, analyse



# Sur l'évolution d'un système de solides rigides à nombre de degrés de liberté fini.

Auteurs :

Aissam JEBRANE, Pierre ARGOUL, Gwendal CUMUNEL, Abdelilah HAKIM.

## Résumé

Ce travail s'intéresse à la dynamique d'un système de  $N$  solides rigides en interactions. Le système ainsi constitué possède un nombre de degrés de liberté fini ( $6N$  dans le cas le plus général de solides 3D). A la lumière des travaux de J.J Moreau et M. Frémond dans le cadre de la mécanique non régulière, nous retenons la notion de percussion homogène à une quantité de mouvement, pour décrire l'évolution du système.

Ainsi dans l'hypothèse de contraintes unilatérales permettant de gérer la condition de non-interpénétration lors des collisions des solides entre eux, connaissant la nature de la collision avec prise en compte ou non du frottement de Coulomb, nous explicitons la forme analytique des percussions correspondantes en fonction de la vitesse avant la collision, ce qui nous permet d'éviter l'utilisation des inclusions différentielles et des techniques de résolution qui en découlent généralement faite pour traiter ce genre de problème. Des résultats d'existence et d'unicité du problème d'évolution sont ensuite proposés en respectant les lois de la thermodynamique.

Enfin, une application à l'évolution d'un système de disques en interactions y compris la collision simultanée de plusieurs disques, est illustrée et les résultats obtenus analytiquement sont comparés à ceux donnés par les techniques de résolution numérique fondées sur les inclusions différentielles. Le gain de temps de calcul est très important et croît de façon exponentielle avec le nombre de contacts.

## Mots clés

Collision simultanée de solides rigides, dynamique non régulière, contrainte unilatérale, Inclusion/mesure différentielle.



# Eude de la carbonatation des dispositifs de drainage profond de l'infrastructure ferroviaire

## AUTEURS:

Neng JIA (neng.jia@enpc.fr)

## Résumé

En France, environ 500 km de collecteur drainant, l'un des dispositifs de drainage profond drainant la plateforme, sont concernés par un dysfonctionnement lié à du colmatage par de la calcite précipitée. Le mécanisme et les facteurs aggravants de ce phénomène restent à comprendre dans le milieu ferroviaire afin de prévenir les risques en phase de la conception de la ligne et d'améliorer les solutions de maintenance. Le travail de recherche s'appuie sur un site d'étude instrumenté de la LGV EST (Chauconin) en situation exploitée. Il est complété par des phases successives d'expérimentation en laboratoire et de modélisation visant à approfondir la compréhension des mécanismes. Ce travail est enrichi et fiabilisé au travers de l'apport de sites complémentaires présentant également une problématique de colmatage. Un outil d'aide à la décision est proposé. Il est basé sur la connaissance des processus et alimenté par une base de données de cas internes et externes au domaine ferroviaire. Il permet la caractérisation des sites qu'ils soient exploités ou en projet afin d'estimer leur potentiel de colmatage. Il vise à orienter l'utilisateur dans le choix de solutions préventives ou curatives opérationnelles.

## Mots clés

**Calcite, colmatage, maintenance, collecteur drainant, tunnel, outil d'aide à la décision**



# Simulation multi-échelle du comportement thermique avec changements de phases par la méthode EF<sup>2</sup>

## AUTEURS

K.-M. Kodjo, J. Yvonnet, M. Karkri

## Résumé

Ce travail a pour objectif, la simulation du comportement thermique d'une structure contenant un matériau à changement de phase. La technique employée a été utilisée avec succès sur des modèles mécaniques, et de conduction thermiques non-linéaires. Ce travail étend cette méthode pour les matériaux à changement de phase.

On distingue deux échelles. L'échelle macro concerne la structure sur laquelle porte la simulation, et l'échelle micro désigne un Volume Élémentaire Représentatif (VER) supposé connu.

A l'échelle microscopique, les hétérogénéités changent de phase en fonction de la température. On a deux phases : solide ou liquide, selon que l'on se trouve en dessous ou au-dessus de la température de fusion du matériau. Les propriétés thermo-physiques globales (masse volumique, capacité calorifique, conductivité thermique) du VER dépendent fortement de la température et du gradient de température. En effet, à l'échelle macro, ces mêmes propriétés varient localement en fonction de la solution recherchée.

Les techniques classiques d'homogénéisation ne permettent pas de prendre en compte le comportement au cours du temps du VER. Pour cela, on utilise une technique d'homogénéisation numérique à deux échelles, encore appelée EF<sup>2</sup> (Eléments Finis au carré). Dans un processus itératif, la température et le gradient de la température en chaque point de la structure macroscopique sont appliqués comme conditions aux limites sur le VER afin d'obtenir le comportement effectif.

Cette technique a permis de simuler la conduction thermique des structures en 2D et en 3D, dans les cas stationnaires et instationnaires.

## MOTS CLES

Multi-échelle, thermique, changement de phase, homogénéisation



# Méthodes d'ingénierie pour l'étude du tassement et du risque de liquéfaction sous séisme.

## AUTEURS

Ziad KTEICH

## Résumé

La performance des structures comme les bâtiments et les barrages durant les séismes est fortement influencée par celle des sols sur lesquels elles reposent. En particulier, une des problématiques à examiner est la liquéfaction des sols granulaires saturés due à la montée de pression interstitielle ainsi que les tassements induits. Pour traiter ces questions, on a recours soit à des méthodes de dimensionnement rustiques qui arrivent parfois en limite d'utilisation, soit à un calcul transitoire non linéaire, lourd à mettre en œuvre et cher en termes de temps de calcul, ce qui n'est pas satisfaisant pour l'ingénierie. L'objectif de ce travail de recherche est l'élaboration d'une méthode de calcul intermédiaire basée sur l'utilisation d'un modèle simple mais prenant en compte la non-linéarité du comportement pour la prédiction du risque de liquéfaction sous séisme et l'estimation des tassements sismo-induits. L'idée de la méthode proposée est une combinaison entre un calcul linéaire équivalent et un modèle de comportement de sol développé par Sawicki (1987 et 1989) ou Byrne (1990) pour calculer la montée de pression interstitielle sous un chargement cyclique. La méthode est appliquée sur deux modèles : un profil unidimensionnel de colonne de sol et un autre modèle 2D d'un barrage en remblai.

### Objectifs :

- Développer une méthode simple et accessible aux ingénieurs qui quantifie le risque de liquéfaction et donne une estimation des tassements induits dans un barrage soumis à un chargement sismique.

### Données d'entrée :

- Signal sismique (accélérogramme) ;
- Géométrie de l'ouvrage (barrage ou colonne) et caractéristiques du matériau le constituant ;
- Résultats d'essais cycliques menés sur ce matériau pour le calage des paramètres du modèle de comportement choisi.

### Cette communication aborde les points suivants :

- Le modèle choisi pour l'élaboration de cette méthode est le modèle de Sawicki (1985,1989) /Byrne (1991) : une brève explication du modèle, sa formulation, le calage de ses paramètres et interprétation de sa contribution dans notre méthode seront développés dans ce travail ;
- Une étude systématique par un calcul linéaire équivalent de la réponse de l'ouvrage en terre (profil 1D et barrage) discrétisé en couches et soumis à un signal sismique. Ensuite un post-traitement des historiques de distorsion avec le modèle de Sawicki/Byrne.

Les résultats de cette étude seront présentés en termes de tassements et de montée de pression interstitielle et validés par comparaison à des méthodes plus élaborées du génie parasismique.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Barrage, linéaire équivalent, liquéfaction, tassement, chargement sismique, dynamique des sols.



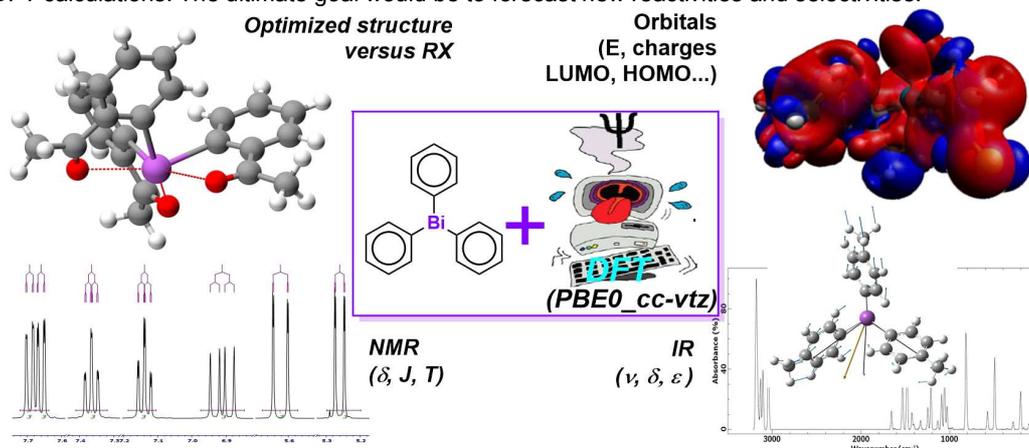
# Triarylbiomuths: Theoretical vs Experimental Studies

## AUTEUR

Pricilia KUTUDILA (Doctorante 3<sup>ème</sup> année, Laboratoire MSME & ICMPE)

## Résumé

Triarylbiomuths ( $Ar_3Bi$ ) are organometallic reagents of growing interest for green organic synthesis [1a,b]. Therefore, much attention has been paid in their use in pharmaceutical chemistry and in material science for the last decade. However, the development of the organobiomuths chemistry is slowed by the lack of theoretical knowledge on these compounds. This thesis aims to understand the reactivity of these species by confronting the experimental data (RX, NMR and IR analysis) to a fundamental study (structural, spectroscopic, thermodynamic and kinetic properties) resulting from DFT calculations. The ultimate goal would be to forecast new reactivities and selectivities.



Firstly, we compared experimental data (RX, NMR, IR,<sup>[2a,b]</sup> cyclic voltammetry<sup>[3]</sup>) to theoretical calculations (optimized structures, energies, electronic densities, vibration modes). The DFT approach has been validated choosing the hybrid functional (PBE0) and the basis set (cc-pVTZ). This study highlights that the strongly  $\sigma$  character of the Bi's lone pair is the funding stone of these structures, their stabilities and reactivities as organometallic species. Secondly, this approach led us to validate the catalytic cycle of the chemoselective cross-coupling reaction involving triphenylbiomuth under palladium catalysis.<sup>[4]</sup> We concluded that the oxidative addition (1<sup>st</sup> step) is the rate determining step (RDS).<sup>[5]</sup> Furthermore, the transmetalation step (2<sup>nd</sup> step) which involves  $Ar_3Bi$ , draw our attention toward the fact that the charges and the strength of the C-Bi bond are the main parameters tuned by the electronic and steric properties of the substituents of  $Ar_3Bi$ . To conclude, the non-delocalized Bi's lone pair increases the influence of the Ar ortho-substituent. However, Bi may interact directly with them by chelation or anagostic interaction.

[1]: a) S. Condon, C. Pichon, and M. Davi, *Org. Prep. Proced. Int.*, **2014**, *46*, 89–131. ; b) B. Cassirame, S. Condon, and C. Pichon, *J. Mol. Catal. A Chem.*, **2016**, 425.

[2]: a) Analyses done at Soleil Synchrotron on Ailes beamline ; b) P. Kutudila *et al.*, *article under preparation*.

[3]: Summer internship in Pr. Gagnon 's group at UQAM (Canada), June - September **2016**.

[4]: K. Urgin, C. Aubé, M. Pipelier, V. Blot, C. Thobie-Gautier, S. Sengmany, J. Lebreton, E. Léonel, D. Dubreuil, and S. Condon, *European J. Org. Chem.*, **2013**, 117–124.

[5]: P. Kutudila, R. Linguerri, M. M. Al-Mogren, C. Pichon, S. Condon, and M. Hochlaf, *Theor. Chem. Acc.*, **2016**, *135*, 1–10.

## MOTS CLES

Triarylbiomuths, DFT calculations, Cross-coupling reactions



# Tenue au feu des goujons collés dans le bois et dans le béton

## AUTEURS

Amine Lahouar, Jean-François Caron, Nicolas Pinoteau

## Résumé

Au fil du temps, le collage structural est devenu essentiel dans le monde du génie civil en offrant des solutions efficaces et faciles à mettre en œuvre pour construire des ouvrages plus résistants et plus durables. La substitution des systèmes d'ancrage classiques par des ancrages chimiques post-installés, collés avec des résines polymères, a encouragé l'utilisation de ces derniers grâce à l'amélioration de leurs propriétés mécaniques. En effet, les ancrages chimiques présentent aujourd'hui des propriétés mécaniques équivalentes ou parfois supérieures aux ancrages conventionnels pour des températures normales de service. Cependant, malgré l'optimisation de la formulation chimique des résines, les polymères restent sensibles aux températures élevées. Par conséquent, une exposition à des températures élevées entraîne une perte considérable des propriétés mécaniques des ancrages chimiques.

Très peu de réglementations et de documents techniques existent aujourd'hui permettant d'évaluer le comportement mécanique à haute température des scellements chimiques. Par ailleurs, aucune règle de dimensionnement n'est disponible aujourd'hui pour sécuriser l'utilisation de ces scellements chimiques dans une structure en situation d'incendie.

Récemment, la technique d'assemblage par des ancrages collés, appliquée exclusivement au béton armé, a été transférée à la construction des ouvrages bois. Le transfert mécanique des charges, assuré par les goujons collés, et la propagation de la température au niveau des ouvrages bois différent de celui des ouvrages en béton armé, ce qui complexifie l'étude et empêche d'uniformiser les méthodes d'évaluation.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre le CSTB et le laboratoire NAVIER dans le but d'étudier et de quantifier le comportement au feu des scellements chimiques dans le bois et dans le béton afin de proposer une méthode de dimensionnement permettant de sécuriser leur utilisation en situation d'incendie.

L'identification et la quantification des phénomènes se produisant à haute température au niveau des scellements chimiques ont été effectuées par des essais expérimentaux à l'échelle des matériaux et à l'échelle de la structure. Ces essais ont mis en évidence l'implication des phénomènes mécaniques et physicochimiques dans la dégradation des propriétés mécaniques de l'ancrage collé lors d'une exposition à des températures élevées. Une méthode de dimensionnement a été proposée dans le cadre de cette thèse, et validée par la suite par un essai au feu de grandeur nature.

## MOTS CLES

Résistance au feu, Scellement chimique, Résine polymère, Bois, Béton, Armature.



# Multifunctional bio-based porous materials for sustainable construction

## AUTEURS

Thibault Lerouge<sup>1,2,\*</sup>, Daniel Grande<sup>1</sup>, Benjamin Le Droumaguet<sup>1</sup>, Philippe Coussot<sup>2</sup>, Olivier Pitois<sup>2</sup>.  
1 : ICMPE, 2 Laboratoire Navier

## Résumé

Some multi-scale building materials, like wood and hemp concrete or daub, exhibit high potential properties in terms of thermal and hygrometric diffusion (thermal insulation, moisture expelling out of a house). However, the correlation between these specific properties and the multi porous structure is complex and still unclear. In order to get a better insight into the precise origin of such multifunctional properties, new model systems based on polymeric materials with double porosity have been envisioned.

Bi-porous polymer networks with controlled nano- (200 nm) and macro- (200 µm) pore sizes and connectivity have been designed and elaborated with the aim to investigate the role of each porosity level on their properties. As a reference system, we have initially prepared bi-porous poly(2-hydroxy methacrylate) (PHEMA) in which nanopores arise from the removal of a porogenic solvent (EtOH) and macropores are formed from particle leaching of fused or non-fused NaCl particles. To obtain bio-based polymer systems, the synthesis of porous materials has been adapted with monomers derived from natural products, such as clove (eugenol), tannins (gallic acid), and catechins (epoxy network developed as Bisphenol A alternatives). The pore morphology (in particular, size and interconnectivity) has been analyzed by mercury intrusion porosimetry and SEM.

The mechanical properties, thermal diffusion, and soaking/drying behaviour will then be studied (with new non-invasive methods for fluid transport, i.e. IRM, NMR, 3D microtomography) to understand the impact of the double porosity framework. Different polymers will be developed to investigate the role of the bulk material itself (e.g. hydrophilicity, plasticity, ...).

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Double porosité, Transport de fluides, polymères poreux, biopolymères



# Etude fondamentale de nouvelles familles d'alliages pour électrodes négatives de batteries Ni-MH : élaboration et mécanismes de corrosion en milieu alcalin d'intermétalliques $Y_{2-x}Mg_xNi_7$

## AUTEURS

N. Madern, V. Charbonnier, J. Monnier, J. Zhang, M. Latroche

## Résumé

L'un des verrous limitant l'utilisation massive d'énergies renouvelables comme le solaire ou l'éolien provient de leur intermittence. Pour adapter la production à la demande, il est nécessaire de stocker cette énergie et de la restituer ultérieurement. Dans ce contexte, l'utilisation chimique ou électrochimique de l'hydrogène comme vecteur énergétique est prometteuse par le biais de l'utilisation des piles à combustibles ou des batteries nickel métal hydrure (Ni-MH).

Pour ce type de batteries, les intermétalliques de type  $TR_2Ni_7$  ( $TR$  : terres rares), partiellement substitués au magnésium comme ceux de la famille  $Y_{2-x}Mg_xNi_7$ , sont des matériaux pouvant potentiellement améliorer la capacité spécifique de l'électrode négative (MH). Cependant, ces alliages présentent encore des problèmes de corrosion en milieu alcalin qui limitent leur utilisation commerciale dans les batteries.

Les alliages  $Y_{2-x}Mg_xNi_7$  avec  $0 \leq x \leq 0,5$  ont été élaborés puis caractérisés par diffraction des rayons X (DRX) et microsonde électronique (EPMA). Leur propriété d'hydrogénation a été mesurée par la méthode de Sieverts.

L'étude de la corrosion calendaire de ces alliages en solution alcaline (KOH 8,7 M) a été menée en immergeant de la poudre pour différentes durées. Des techniques de caractérisation structurale et élémentaire (DRX, Microscopies électroniques couplées à l'analyse élémentaire) ont été combinées afin d'identifier les produits de corrosion qui se développent à l'interface entre l'alliage et la solution alcaline. L'influence du magnésium sur les produits de corrosion ainsi que sur leur vitesse de formation sera discutée et comparée à des travaux antérieurs sur les systèmes binaires  $TR_2Ni_7$  ( $TR = La, Y, Gd$  et  $Sm$ ) [1-4].

## Références

- [1] F. Maurel *et al.*, J. Electrochem. Soc. 147 (2000) 78-86.
- [2] J. Monnier *et al.*, J. Power Sources, 266 (2014) 162-169.
- [3] B. Puga *et al.*, ChemElectroChem, 2 (2015) 1321-1330.
- [4] V. Charbonnier *et al.*, J. Power Sources, 326, (2016) 146-155.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Hydrogène, batterie Ni-MH, corrosion, terres rares



# Composites Carbone / Nanoparticules de cuivre-rhodium pour la réduction des nitrates

## AUTEURS

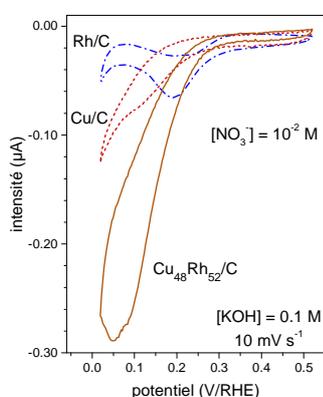
Peyman Mirzaei, Stéphane Bastide, Claudia Zlotea, Michel Latroche, Christine Cachet-Vivier

Université Paris Est, CMTR-Institut de Chimie et des Matériaux Paris Est, 2 rue Henri Dunant 94320 Thiais, France

## Résumé

L'élimination électrochimique des nitrates est une alternative intéressante aux méthodes biologiques ou physiques. Les applications pratiques et les aspects fondamentaux de l'électroréduction des nitrates ont fait l'objet d'une revue en 2012 [1] et de publications récentes [2-4]. Différentes classes de matériaux ont été étudiées, notamment les métaux nobles (Pt, Rh) ou non nobles (Cu, Ni), mais aussi les composés bimétalliques à partir de ces groupes, qui ont démontré une meilleure activité électrocatalytique grâce à un effet synergique entre les deux métaux. Notre approche est de synthétiser des composites constitués de nanoparticules bimétalliques sur des supports carbonés, pour bénéficier d'une part des effets de taille de particules pour réduire les quantités de métal noble (Rh) grâce à l'augmentation de la surface active, et d'autre part de possibles effets synergiques entre les deux métaux catalyseurs.

Nous avons étudié le système Cu-Rh, gamme de composés qui ont été ICP et par électrochimie avec la Les résultats obtenus permettent de mécanismes réactionnels et de composition Rh-Cu optimale pour électrocatalytiques les plus élevés. La la réponse électrochimique de avec des nanoparticules de Cu, Rh et de métal). L'augmentation du courant synergique obtenu en présence des analyse détaillée montre que Cu première étape de réduction des que Rh catalyse la réduction des nitrites ammoniacale.



en synthétisant une caractérisés par MET et MicroElectrode à Cavité. mieux comprendre les déterminer une d'atteindre les courants figure ci-contre présente réduction des nitrates Cu<sub>48</sub>Rh<sub>52</sub> (à masse égale de pic illustre l'effet deux éléments. Une catalyse uniquement la nitrates en nitrites, alors en hydroxylamine puis en

Mots clé : MicroElectrode à Cavité, Réduction, Nitrate, Nitrite, bimétalliques.

## Références

- [1] M. Duca, M.T.M. Koper, *Energy Environ. Sci.* **2012**, 5, 9726
- [2] W. Siriwatcharapiboon et al., *ChemElectroChem*, **2014**, 1, 172
- [3] Ting Chen et al., *Langmuir*, **2015**, 31, 327
- [4] N. Comisso et al., *Journal of solid state electrochemistry*, **2016**, 20, 1139.



# Étude des fluctuations en homogénéisation aléatoire

## AUTEURS

Pierre-Loïc ROTHÉ, Frédéric LEGOLL

## Résumé

On considère ici un matériau hétérogène possédant une microstructure aléatoire de loi connue à l'échelle  $\varepsilon$  ( $\varepsilon \ll 1$ ). L'étude est menée sur un problème de diffusion sous forme divergente, avec un terme source, sur un domaine borné. On cherche à caractériser le comportement de ce matériau à une échelle macroscopique bien plus grande que celle de la microstructure ( $L \gg \varepsilon$ ) et en déduire des propriétés effectives.

Les stratégies pour estimer ces propriétés effectives dans le cas de matériaux aléatoires sont très coûteuses en temps de calcul. L'approche classique consiste à considérer un large volume dit représentatif (VER) et résoudre le problème à l'équilibre (dans le cas de l'élasticité linéaire) ou avec un terme source (cas de la diffusion thermique), avec des conditions aux limites fixées, par exemple périodiques.

En plus du comportement effectif ou moyen de la réponse du matériau au niveau macroscopique (qui est donné par sa limite homogénéisée, quand l'échelle de la microstructure  $\varepsilon$  tend vers 0), une autre question d'intérêt est de comprendre comment la réponse fluctue autour de cette approximation grossière.

Plus généralement, nous visons à comprendre : d'une part, quels paramètres de la distribution des coefficients du matériau affectent la distribution de la réponse. D'autre part, s'il est possible d'estimer cette distribution sans appliquer une méthode type Monte-Carlo pour estimer la moyenne et la variance. En effet, cela nécessiterait de résoudre l'équation à l'échelle de la microstructure pour de nombreuses réalisations, ce qui serait bien trop coûteux en temps de calcul.

Dans ce travail, cette question est abordée d'un point de vue théorique et numérique. Nous montrons qu'en utilisant la fonction du correcteur standard issue de la théorie de l'homogénéisation aléatoire, nous sommes capable de calculer un tenseur  $Q$  qui gouverne complètement les fluctuations de la réponse. En effet, nous savons que la réponse moins sa moyenne varie à l'échelle  $\varepsilon^{d/2}$  ( $d$  la dimension du problème, ici  $d > 1$ ) et que celle-ci suit une loi gaussienne centrée dont la variance peut être calculée facilement via le tenseur  $Q$  et le gradient de la réponse effective (facilement calculable comme celle-ci est solution d'un problème à coefficients constants).

Nous considérons pour le cadre théorique un matériau faiblement aléatoire (microstructure périodique avec ajout d'une perturbation aléatoire faible). De plus, des applications numériques ont été effectuées dans le cas d'une microstructure totalement aléatoire, pour tester la généralité de notre approche pour estimer les fluctuations.

## MOTS CLES

Homogénéisation aléatoire, fluctuations, propriétés effectives



# Approche semi-automatique par approximation diffuse de génération de modèles bielles-et-tirants destinés au ferrailage d'éléments de structures massives

## AUTEURS

Christophe Rouzaud, Guillaume Hervé, Patrick de Buhan, Pierre-Alain Nazé, Gustavo Mendoza Chávez

## Résumé

Within the field of the reinforced concrete structures and more specifically, at the design of non-flexural elements such as corbels, nibs, and deep beams, the rational procedure of conception and justification referred as strut-and-tie method (STM) has shown some advantages over classical algorithms of reinforcement computation based on FE analysis (eg. Wood-Armer or Capra&Maury).

The STM remains a suitable alternative for the design of concrete structures presenting either elastic or plastic behavior whose application framework is well defined in concrete structures' design codes like the EUROCODE2 and the AASHTO-LRFD Bridge Design Specifications. Nevertheless, this method has the main inconvenient of requiring a high amount of resources investment in terms of highly experienced personal or in terms of computational capacity for, respectively, its manual application or its automatic approach through topology optimization.

The document proposes a lighter alternative, in terms of required iterations, to the automation of the STM that starts from the statement that the resultant struts and ties for the ST model will be distributed according to the direction of the principal stresses  $\sigma_{III}$  and  $\sigma_I$  obtained from a plane FE model. Hence, the prismatic section and the position of each individual strut is associated to the field of principal direction of  $\sigma_{III}$  and the compressive strain energy. While the ties are placed connecting the struts and the zones undergoing tensile stresses in order to achieve structural stability. The reinforcement is then obtained by applying a truss optimization, which assure that the constructive, durability, and resistance criteria are satisfied.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Strut-and-tie, optimization, non-flexural elements



# Analyse systématique du concept de comportement linéaire équivalent en ingénierie sismique

## AUTEURS

Thuong Anh NGUYEN, Pierre LABBE, Guillaume HERVE, Jean-François SEMBLAT

## Résumé

Lorsqu'une structure est soumise à de forts séismes, son comportement n'est plus élastique et se caractérise par des cycles hystérétiques amples ou étroits. L'évaluation de sa réponse en prenant en compte de ce dernier dans un calcul temporel n'est pas aisée à cause d'un coût numérique élevé, en termes notamment de temps de calcul ainsi que de mémoire, dus aux itérations à réaliser à chaque pas de temps de calcul. Pour éliminer cette difficulté, les ingénieurs ont mis en place un concept de linéarisation équivalente [Seed, et al., 1970], [Iwan, 1980], [Chopra, et al., 1999] basés sur de « fortes » hypothèses qui ne permettent pas une utilisation systématique en ingénierie sismique. Certains sont insuffisants en soi même de caractériser le système linéaire équivalent. Les inconvénients de ces concepts ne sont pas abordés dans ce document. Dans notre travail, nous proposons une analyse systématique argumentée afin d'établir la linéarisation équivalente en utilisant le critère d'« équivalence » lié à la fonction de transfert. Ce concept a ensuite été appliqué au système canonique allant du comportement élastoplastique au comportement endommageant. La performance de ce concept sera démontrée au travers des mesures quantitatives entre la réponse non-linéaire et la réponse linéaire équivalente au travers des critères d'Anderson. Ces derniers résultats permettent plusieurs applications en ingénierie sismique, notamment, en restituant le signal transféré au travers de la structure incluant de la non-linéarité.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Séisme, Comportement non-linéaire, Linéarisation



## Etirement de fluides à seuil

### AUTEURS

Oumar A. Fadoul, P. Coussot

### Résumé

Dans le but d'étudier les instabilités d'écoulement de fluides à seuil poussés par de l'air entre deux parois solides ou en milieux poreux, nous nous intéressons d'abord à l'écoulement d'un fluide pris entre deux plaques progressivement écartées. A partir d'expériences avec des émulsions concentrées et des surfaces de rugosités contrôlées nous montrons que lorsque les surfaces solides sont suffisamment rugueuses il n'y a pas de glissement aux parois et l'écoulement est toujours instable : la ligne de contact du fluide sur le solide reste accrochée et l'air pénètre dans le fluide sous forme de digitations. Ce phénomène rappelle l'instabilité de Saffman-Taylor, mais ici pour un fluide à seuil adhérent à la surface solide il semble impossible d'obtenir une situation stable, même à très faible vitesse. En revanche, lorsque les surfaces solides sont parfaitement lisses l'écoulement est stable. Dans ce cas la ligne de contact se déplace facilement sur la surface solide car le fluide glisse même sous de très faibles contraintes. On obtient alors un écoulement d'élongation pure. A partir de l'analyse des courbes de force vs écartement on peut alors vérifier la validité de la loi de comportement 3D utilisée habituellement pour décrire les fluides à seuil, et dérivée du modèle de Herschel-Bulkley pour l'écoulement dans le régime liquide et du critère de von Mises pour la limite d'élasticité.

**MOTS CLES** : Elongation, Instabilité, Fluides à seuil

Ecole doctorale, sciences, ingénierie, environnement

Journée Scientifique - 27 avril 2017



# MODELLING SHORT-TERM CYANOBACTERIAL DYNAMICS IN A SMALL URBAN LAKE USING A COUPLED HYDRODYNAMIC-ECOLOGICAL THREE-DIMENSIONAL MODEL

## AUTEURS

Denis Plec, Lucas J.Porto, Bruno J. Lemaire, Philippe Dubois, Mohamed Saad, Brigitte Vinçon-Leite

## Résumé

The concern for the protection and management of urban lakes increases worldwide because they provide essential ecosystem services. They have multiple specific functions: many ponds retain storm water in order to prevent floods but also to reduce its pollutant load. At the same time, these water bodies are essential recreational areas for the city dwellers and important spots of biodiversity in densely populated regions.

Lake ecosystems are major habitats for diverse living organisms, including phytoplankton species. Their dynamics is not only influenced by their own biological properties but also by environmental factors such as water quality, hydrodynamics, nutrient availability, as well as meteorological conditions, like light and temperature.

In lakes the water quality degradation often leads to potentially toxic cyanobacteria blooms and health risks. These events require a regular monitoring and warning systems when the human population is exposed.

Due to the complexity of ecosystems, mathematical models supported by monitoring are valuable tools to better understand the interactions between the variables driving the cyanobacteria blooms and to support decision-making and water management strategies.

We implemented a three-dimensional coupled hydrodynamic-ecological model (Delft3D) in Lake Champ-sur-Marne, a small and shallow lake (0.12 km<sup>2</sup>, 2.3 m average depth) located about 20 km east of Paris. The lake is located in a recreational park which receives children from a very dense urban area, for sport and leisure activities. Unfortunately, bathing in the lake has been repeatedly prohibited in summer because of cyanobacteria blooms. This modelling tool is aimed to forecast the short-term evolution of cyanobacteria biomass.

The modelling approach is based on the one-hand on a long-term survey performed since 2006 in order to comply with the French bathing regulation and on the other hand on a high-frequency monitoring started in 2015. In the long-term survey, the phytoplankton biomass is measured near the beach, at a frequency that varies from monthly to weekly between April and October. In the high-frequency monitoring performed in the framework of the project OSS-Cyano funded by the French Research Agency (ANR), underwater sensors located at three representative points are continuously measuring temperature and chlorophyll-a (Chl-a) fluorescence at a 5-minute time step. In parallel, fortnightly campaigns have been carried out at the same points for obtaining complete profiles of temperature, conductivity, dissolved oxygen, pH and salinity with a multi-parametric probe (Seabird SBE 19™) and the Chl-a fluorescence of 4 phytoplankton groups with a 5-wavelength spectrofluorometer.

Based on these two complementary datasets we calibrated and validated the hydrodynamic model and then the ecological one. The agreement between modelled and observed temperature was excellent and the alternation of mixing and stratification well reproduced. The phytoplankton biomass was correctly simulated. The model succeeded rather well in estimating the succession of the phytoplankton groups, particularly cyanobacteria.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

3D-model, cyanobacteria biomass, lake hydrodynamics, high-frequency monitoring

Journée Scientifique - 27 avril 2017



# Nanoparticules Métalliques@Polymères Poreux : Matériaux Hybrides Innovants pour la Catalyse Supportée

## AUTEURS

Romain Poupart, Benjamin Le Droumaguet, Benjamin Carbonnier, Daniel Grande

## Résumé

Ce projet de recherche concerne l'élaboration de composites à base de particules métalliques immobilisées sur des polymères poreux. Les polymères sont préalablement synthétisés, modifiés chimiquement à leur surface afin d'obtenir une répartition dense et homogène des nanoparticules sphériques et de taille contrôlée.

Concernant les polymères, ils ont tout d'abord été préparés dans des microcanaux de silice fondue (diamètre interne : 100 microns) sous la forme de monolithes macroporeux à partir d'un monomère facilement modifiable, de manière à présenter des fonctions amine (-NH<sub>2</sub>) ou acide carboxylique (-COOH) en surface. Cette fonctionnalisation a permis l'adsorption spécifique et stable de particules de métaux différents (cuivre, or, platine). Des réactions catalytiques modèles telles que la réduction de nitroarènes ont été réalisées en flux continu avec des rendements élevés (>95%) et des temps de réaction courts (quelques minutes) démontrant la haute activité catalytique des microréacteurs monolithiques.

Des polymères poreux ont également été synthétisés à partir d'un copolymère à blocs précurseur, à savoir le polystyrène-*bloc*-poly(D,L-lactide), possédant une jonction clivable entre les deux blocs. Après une étape d'orientation, clivage de la jonction et extraction du bloc sacrificiel, des échantillons nanoporeux ont été obtenus avec différentes fonctions chimiques (-SH, -NH<sub>2</sub>) à la surface des pores. Des nanoparticules d'or ont ainsi pu être immobilisées, puis des réactions de couplage, de réduction et même des réactions en cascade tout à fait originales, ont pu être conduites avec une bonne efficacité.

Les nanoparticules métalliques, quant à elles, ont été préparées selon deux voies différentes : la première dite *in-situ*, consiste en l'imprégnation du polymère par un sel métallique, suivie de sa réduction. La deuxième voie, dite *ex-situ*, repose sur la synthèse des nanoparticules préalablement à leur introduction dans la matrice polymère. Les deux voies ont été testées avec succès et l'approche par synthèse *ex-situ* est notamment développée dans le cadre d'une collaboration internationale avec l'équipe du Professeur Nicola Pinna à l'Institut de Chimie de l'Université Humboldt de Berlin (Allemagne).

## MOTS CLES

Polymères, matériaux poreux, nanoparticules, catalyse supportée, composites, chimie en flux continu.



# Effets de différents processus physiques au sein d'une faille sur la création de séismes

## AUTEURS

Hadrien Rattiez, Ioannis Stefanou, Jean Sulem

## Résumé

La majorité des séismes et les plus destructeurs sont des séismes dits superficiels, c'est-à-dire que leur foyer se situe dans la partie fragile de la lithosphère, entre la surface et une profondeur de quelques dizaines de kilomètres. Les études sur les mécanismes de déclenchement des séismes à faible profondeur ont mis en évidence que ceux-ci résultent d'une instabilité de glissement le long d'une faille déjà formée. Ces failles ont subi de grands déplacements, ce qui a entraîné une fracturation de la roche et la formation d'une interface granulaire appelée gouge, composée de grains très fin.

Pour comprendre et modéliser le comportement d'un glissement le long d'une faille et l'origine des instabilités, on doit prendre en compte différents processus physiques (mécanique, chimique, thermique...) au sein de la gouge et les couplages entre eux. Lors du glissement, on observe une localisation des déformations dans une épaisseur très fine à l'intérieur de la gouge. Cette localisation est liée au phénomène d'instabilité. La taille de la zone localisée est de l'ordre d'une centaine de micromètres, ce qui est très faible comparé à la longueur de la faille qui peut atteindre plusieurs kilomètres.

Depuis le début de ma thèse, j'ai travaillé sur l'application des milieux continus généralisés et en particulier les milieux dits de Cosserat à l'étude des failles. Ils prennent en compte des effets non locaux dus à la microstructure du matériau. Cela permet, d'une part, de régulariser le problème mathématique de la localisation, et d'autre part de relier les caractéristiques de localisation (épaisseur, développement...) à la microstructure du matériau. Or, des études ont montré que l'énergie libérée durant un glissement sismique d'une faille peut être reliée à l'épaisseur et la longueur du glissement, on peut donc obtenir des informations sur les caractéristiques des séismes provoqués par une faille à partir de l'étude de sa microstructure.

La théorie des bifurcations a été appliquée dans un premier temps, afin de calculer la taille de la zone de localisation et a permis d'étudier les effets de la fracturation des grains, de la pressurisation thermique des fluides présents dans la faille et des réactions chimiques. Les résultats obtenus montrent une bonne corrélation avec les observations expérimentales et in situ.

Pour compléter cette étude, une collaboration avec l'université de Nouvelle Galles du sud a été initiée, afin d'implémenter les équations de notre modèle au sein du logiciel d'éléments finis open-source, Moose. Il est construit de manière à fonctionner automatiquement en parallèle avec de nombreux processeurs et permet donc de réaliser efficacement des simulations complexes. En effet, l'étude des phénomènes d'instabilité nécessite la prise en compte des non-linéarités présentes dans les équations qui gouvernent l'évolution du système ce qui peut conduire à des simulations numériques très lourdes en termes de temps de calculs et de mémoire. Les résultats numériques permettent de confirmer et compléter les prévisions analytiques, en suivant l'évolution post-bifurcation du système. On obtient ainsi la répartition d'énergie entre les différents phénomènes physiques et on peut estimer la part d'énergie liée à l'apparition d'ondes sismiques qui provoquent des dommages à la surface.

## Mots clés

Séismes, failles, localisation, milieux continus de Cosserat, couplages multi-physiques.



# Optimisation de la composition des nanocomposites $MgH_2-TiH_2$ pour le stockage réversible de l'hydrogène

## Auteurs

Pavel Rizo, Fermín Cuevas, et Michel Latroche. Université Paris-Est, Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est

## Résumé

$MgH_2$  est un candidat prometteur pour le stockage réversible de l'hydrogène en raison de sa capacité massique élevée, ainsi que son faible poids et son bas coût. Néanmoins, l'hydrogène stocké est très stable pour des applications à température ambiante et la cinétique de réaction est lente à l'état massif. Ce dernier inconvénient est dû, d'une part, à la faible activité catalytique du Mg pour la dissociation du  $H_2$  et d'autre part au faible coefficient de diffusion de l'hydrogène dans la phase hydrure. La nanostructuration et l'addition d'un agent d'activation tel que l'hydrure  $TiH_2$  [1,2], permettent d'atténuer ce phénomène. Ce travail vise donc à étudier l'effet du taux de  $TiH_2$  sur la capacité réversible de l'hydrogène du système  $MgH_2-TiH_2$ .

Une série d'échantillons  $(1-y)MgH_2 yTiH_2$  avec différents taux de Ti ( $y = 0, 0.05, 0.1, 0.2$  et  $0.3$ ) a été synthétisée par broyage mécanique réactif sous hydrogène des poudres de Mg (Alfa Aesar < 800  $\mu m$ , 99,8%) et de Ti (Aldrich < 44  $\mu m$ , 99,9%) à l'aide d'un broyeur planétaire à billes. La structure cristalline des poudres ainsi synthétisées a été caractérisée par Diffraction des Rayons-X sur poudre (DRX). La cinétique et les propriétés de cyclage en hydrogène ont été analysées à l'aide d'un appareil de type Sieverts manométrique. Pour chaque nanocomposite, 20 cycles de sorption d'hydrogène ont été effectués à 300 °C. Les pressions d'absorption et de désorption ont été fixées à 0.8 et 0.03 MPa respectivement, et le temps de réaction a été limité à 15 min. Dans ces conditions, seulement l'hydrogène stocké dans la phase  $MgH_2$  est réversible

A l'issue de cette étude, on conclut qu'il existe une teneur optimale de  $TiH_2$  :  $y = 0.1$  qui permet de fournir une capacité de rétention élevée (5.3 wt.% H) tout en gardant une cinétique de réaction rapide. Ceci est illustré dans la Figure ci-dessous présentant la capacité de stockage réversible des nanocomposites en fonction du taux de  $TiH_2$ . En effet, après 20 cycles de sorption, la capacité réversible (ligne continue) passe par un maximum (5.3 wt.% H) à  $y = 0.1$ . Ce maximum peut être expliqué par le croisement entre la capacité nominale des nanocomposites (ligne noire en pointillés) et la capacité de rétention pendant le cyclage (ligne rouge en pointillés). Pour des teneurs faibles en  $TiH_2$  ( $y < 0.1$ ), la capacité de rétention est médiocre en raison du ralentissement de la cinétique de sorption suite à la croissance cristalline. Pour des teneurs plus élevées ( $y > 0.1$ ), la capacité nominale des nanocomposites (ligne pointillée) diminue à cause du poids mort de la phase  $TiH_2$  comme cet hydrure ne contribue pas à la sorption réversible de l'hydrogène dans les conditions de cyclage étudiées.

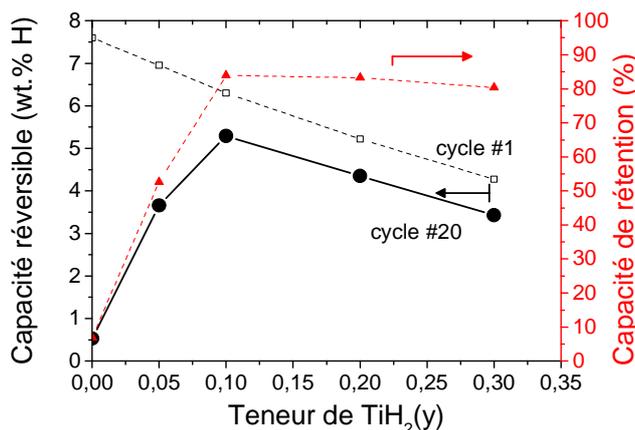


Figure : Capacité réversible de stockage d'hydrogène des nanocomposites  $(1-y)MgH_2 yTiH_2$ .

[1] Y. J. Choi, Z. Z. Fang, H. Y. Sohn, E. Rönnebro, J. Am. Chem. Soc. 131 (2009) 15843–15852.

[2] F.Cuevas, D. Korablov, M. Latroche, Phys. Chem. Chem. Phys., 141 (2012) 1200-1211.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Stockage d'hydrogène, capacité d'hydrogène réversible, cyclage efficace, capacité de rétention, matériaux, nanocomposites.

# Propriétés structurales et magnétiques de GdFeX (X = Cu, Cr)

## AUTEURS

M. Saidi, M. Jemmali, K. Nouri, A. Kabadou, L. Bessais.

## Résumé

Les composés intermétalliques contiennent plusieurs phases de composition et de structure différentes. La combinaison de ces phases produit différentes microstructures qui influencent considérablement les propriétés et les caractéristiques techniques de ces matériaux. L'étude des propriétés structurales et magnétiques des composés intermétalliques associant des terre rare (R) et des métaux de transition (T) présente un intérêt fondamental mais également appliqué (aimants permanents, matériaux pour l'enregistrement magnétique à haute densité, matériaux pour la réfrigération magnétique...). L'étude des structures cristallines permet de mieux comprendre la cristallographie de ces matériaux comme les liaisons responsables de leur stabilité, d'analyser les différents couplages responsables des propriétés magnétiques et d'établir un lien entre les propriétés structurales et magnétiques de ces composés.

L'objectif de la thèse est l'étude de deux diagrammes de phases ternaires à base de fer : Gd-Fe-Cu et Gd-Fe-Cr. Pour cette journée scientifique nous allons présenter les propriétés cristallographiques, magnétiques et magnétocaloriques d'un composé intermétallique de chaque diagramme de phase : la solution solide  $Gd_2Fe_{17-x}Cu_x$  (qui cristallise dans le système rhomboédrique avec le groupe d'espace R-3m) ainsi que  $GdFe_{12-x}Cr_x$  (qui cristallise dans le système quadratique avec le groupe d'espace I4/mmm).

## MOTS CLES

Diagramme d'équilibre de phases ternaires, cristallographie, magnétisme, réfrigération magnétique.



# Coupling satellite remote sensing and modelling techniques for understanding cyanobacterial blooms. Application to Karaoun Reservoir, Lebanon

## AUTHORS

Najwa Sharaf<sup>1,2,3</sup>, Ali Fadel<sup>2</sup>, Bruno J. Lemaire<sup>1</sup>, Kamal Slim<sup>3</sup>, Brigitte Vinçon-Leite<sup>1</sup>

<sup>1</sup> LEESU, Laboratoire Eau, Environnement et Systèmes Urbains, ENPC, Paris, France

<sup>2</sup> National Center for Remote Sensing, National Council for Scientific Research (CNRS), Beirut, Lebanon

<sup>3</sup> Laboratory of Microorganisms and Food Irradiation, LAEC, Lebanese Atomic Energy Commission, National Council for Scientific Research (CNRS), Beirut, Lebanon

\* Corresponding author; E-mail address: najwa.sharaf@enpc.fr

## Abstract

Cyanobacterial blooms deteriorate the water quality of lakes and reservoirs by inducing bad taste and odor, fish kills, toxicity, oxygen depletion and alteration of ecosystem. Toxins produced by toxic cyanobacteria can threaten human health through waters used for agricultural, recreational and drinking water purposes thus impairing the use of lakes and reservoirs. Therefore, continuous monitoring of cyanobacterial blooms in lakes and reservoirs is critical for early detection and further development of early warning systems. Satellite remote sensing was proven to be an effective tool for estimating water quality parameters in a synoptic scale, thereby allowing the identification and monitoring of phytoplankton blooms across the whole lake surface. It also offers the ability to access records of archived imagery allowing retrospective analyses when no ground measurements can possibly be performed which will aid in evaluating water quality trends overtime. Recently, researchers have been focusing on developing methods to quantify cyanobacterial biomass using phycocyanin (PC), a unique cyanobacteria pigment. Most approaches have been based on hyperspectral sensors harboring sufficient spectral bands to account for the PC spectral properties with little regard to multispectral sensors. Similar to many lakes and reservoirs around the world, Karaoun Reservoir, the largest fresh-water body in Lebanon has been suffering from regular toxic cyanobacterial blooms events. It features fluctuations in water level due to several practices mainly hydropower and irrigation as it also serves purposes such as recreation and fisheries. This Reservoir is anticipated to ensure drinking water therefore it is very crucial to monitor its water quality and to set up future management plans. Aiming at improving monitoring of cyanobacterial blooms, a PC retrieval algorithm was developed from Landsat 8 OLI (Operational Land Imager) for the Karaoun Reservoir through a combination of simultaneous in situ surface PC concentration and OLI data at the period of 2013 and 2015. After applying dark-object-subtraction to Landsat images, an algorithm with the ratio of the near infrared band to the blue band was found to be the most robust for predicting high and low PC concentrations. The algorithm was then validated with an independent dataset in 2016 and yielded very promising results ( $R^2 = 0.87$ ). It also outperformed previously published PC algorithms once evaluated. On a timely and spatial basis, the algorithm derived in this study will help improve monitoring and assessment of harmful cyanobacterial blooms in Karaoun Reservoir. It can be also applied to other eutrophic lakes and reservoirs however with further validation. The value of remote sensing techniques can be greatly increased when supported by modelling. Modelling can complement the analysis of satellite imagery and makes it possible to estimate depth profiles and to interpolate temporal gaps in data derived from satellite and traditional water quality monitoring. Therefore, the objective of an ongoing research project is to integrate remote sensing and a coupled hydrodynamic-ecological three dimensional model (Delft3D suite) in order to better monitor and understand the dynamics of phytoplankton blooms in Karaoun Reservoir. This integration is rare for harmful algal blooms in freshwaters and will present a new perspective for monitoring and assessing water quality of lakes and reservoirs. It will serve as a tool for building a health warning system from which appropriate plans could be taken for mitigating the impacts of harmful blooms and optimizing the utilization of the reservoir.

## MOTS CLÉS

Modelling, remote sensing, water quality, cyanobacteria, Karaoun Reservoir.

Journée Scientifique - 27 avril 2017



# Simulation moléculaire de l'initiation de la rupture à l'échelle atomique

## AUTEURS

Sabri Souguir, Laurent Brochard

## Résumé

Nous étudions la physique élémentaire de l'initiation de la rupture des matériaux fragiles à l'échelle atomique par des techniques de simulation moléculaire. Bien que les mécanismes de rupture des matériaux, parfaits (critère de contrainte) et pré-fissurés (critère d'énergie), soient bien compris, la question des matériaux présentant des concentrations de contraintes modérées est soulevée. Il existe plusieurs théories mais aucune n'aboutit à un consensus clair.

Dans cette thèse, nous utilisons des techniques de simulation moléculaire pour étudier la physique de l'initiation de rupture à l'échelle des atomes et des molécules. Tout d'abord, nous nous concentrons sur l'effet de la température, la taille du système et la vitesse de chargement et montrons que les propriétés de la rupture suivent des lois d'échelle combinant ces facteurs et que ces lois proviennent de la nature statistique des systèmes atomiques.

On représente notre matériau, le graphène, par un modèle présentant un réseau triangulaire d'atomes liés par des ressorts. Une étude analytique, dans le cas du matériau modèle, révèle que la limite à la rupture suit une loi d'échelle provenant de la théorie de l'état de transition. Ainsi, à l'échelle atomique, la rupture est un événement rare dont la probabilité d'occurrence suit une loi d'Arrhenius et correspond à la cassure d'un lien entre les atomes. La loi d'échelle pour le graphène diffère de celle du matériau modèle et cette différence peut être attribuée à la nature des interactions atomiques.

Une loi d'échelle similaire s'applique pour le cas des matériaux présentant des fissures préexistantes mais avec la seule différence que la rupture ne dépend plus de la taille du système mais du nombre de pointes des fissures. Ceci montre que les fondements de la rupture, que ce soit en critère d'énergie ou de contrainte, sont les mêmes à l'échelle atomique et ne diffèrent que par la répartition spatiales des barrières de transition d'énergie.

On s'intéresse dans la suite par la rupture des matériaux à une température proche de 0°K. A cette température, un système atomique est en équilibre statique. La rupture peut donc être traitée comme une instabilité. L'analyse de la matrice hessienne du système atomique fournit ainsi un moyen d'identifier les mécanismes de rupture. Nous montrons qu'on peut capter la rupture en cherchant les valeurs propres nulles ou négatives de cette matrice. Les vecteurs propres correspondants indiquent les modes de rupture. La confrontation avec les théories macroscopiques est alors possible, par exemple, par la longueur d'initiation en fonction des la concentration des contraintes.

Cette étude est une première étape vers la compréhension fondamentale de l'initiation de la rupture dans les matériaux fragiles et peut finalement fournir un aperçu de la formulation macroscopique appropriée pour capter la transition entre la rupture en critère de contrainte et la rupture en critère d'énergie.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Simulation moléculaire, physique statistique, rupture des matériaux, loi d'échelle, étude d'instabilité



# Insights into degradation mechanism of Orange G by photo-Fenton oxidation: Optimal conditions and identification of by-products

## AUTEURS

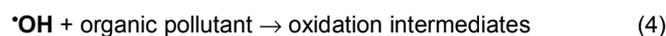
Jean-Baptiste Tarkwa, Nihal Oturan, Acayanka Elie, Laminsi Samuel, Mehmet A. Oturan.

## Résumé

Photochemical degradation of 0.1 mM of Orange G dye in aqueous medium and mineralization of its solution was studied by photo-Fenton process. This technique is based on the in situ production of hydroxyl radicals ( $\cdot\text{OH}$ ) photochemically assisted Fenton's reagent, a mixture of  $\text{H}_2\text{O}_2$  and ferrous iron. The main advantage of the process is the photocatalytic generation of  $\text{Fe}^{2+}$  (Eq. 2) to catalyze Fenton's reaction (Eq. 3) with additional  $\cdot\text{OH}$  production.



$\cdot\text{OH}$  thus produced are very strong oxidants and are able to oxidize any organic pollutants until complete mineralization:



Firstly, an optimization of the operating conditions was investigated. The optimal molar ratio of reagent was found to be 13.33 based on the determination of kinetics constants of oxidative degradation of Orange G. In these conditions, Orange G was very quickly degraded after 5 min of treatment, following a pseudo-first-order kinetics. A very high mineralization efficiency of 95.93% (in terms of total organic carbon (TOC) removal percentage) was achieved after 4 h of treatment. This high mineralization rate can be explained by the beneficial action of photo-decarboxylation of Fe-carboxylates complexes, in addition to the high mineralization power of  $\cdot\text{OH}$  toward aromatic/cyclic and aliphatic compounds.

The effect of parameter such as initial pollutant load and initial chloride ion present in the reaction medium was also studied. In addition, the identification and quantification of Orange G oxidation by-products were carried out using GC/MS and HPLC analysis.

Based on identified aromatic/cyclic reaction intermediates, TOC removal results and short chain carboxylic acids (oxamic, oxalic, fumaric, glyoxylic and formic acids) as well as inorganic ions (nitrates, sulfates) released to the solution as a consequence of mineralization process, a plausible degradation mechanism of Orange G dye is proposed.

**Keywords:** Photo-Fenton, Orange G, Hydroxyl radicals, Mineralization, Kinetics, Degradation pathway.



# Evolution du comportement poromécanique des roches mères lors de l'enfouissement.

## AUTEURS

Hamza TAZI<sup>1,2</sup>, Elisabeth BEMER<sup>1</sup>, Mathilde ADELINET<sup>1</sup>, Luc DORMIEUX<sup>2</sup>

<sup>1</sup> IFPEN, Rueil-Malmaison

<sup>2</sup> Laboratoire Navier, Champs-sur-Marne

## Résumé

Les roches mères sont des roches sédimentaires riches en matière organique. Elles sont capables de générer des hydrocarbures lors du craquage thermique de la matière organique. Ces hydrocarbures migrent pour une grande partie le long de fractures naturelles, notamment celles induites par les surpressions de fluide et gaz. L'autre partie reste piégée dans la structure complexe de la roche mère. Afin de mieux prédire les ressources en place au sein de ces formations géologiques, une meilleure connaissance du comportement poromécaniques, des lois de compaction et des relations perméabilité/porosité pour les modèles de bassin est indispensable. L'objectif de cette thèse est de décrire l'évolution des propriétés poromécaniques des roches mères au cours de l'enfouissement grâce à des modèles de type milieu effectif afin de définir des lois de compaction et des relations perméabilité/porosité.

Une synthèse bibliographique a été faite à partir de données issues de mesures pétroacoustiques de roches mères d'Amérique du Nord. La base de données ainsi élaborée intègre également des données réalisées à IFPEN sur la formation Montney (Bassin sédimentaire de l'Ouest Canadien). Cette synthèse a permis d'étudier les corrélations entre les propriétés pétroacoustiques des roches mères et différents paramètres intrinsèques (densité, porosité, composition minéralogique) et extrinsèques (niveau de confinement appliqué pendant les essais). A partir des corrélations réalisées, il apparaît que l'augmentation de la teneur combinée en « argile et matière organique » semble associée à une diminution des vitesses acoustiques ainsi qu'à l'augmentation du niveau d'anisotropie.

La description microstructurale des roches mères a été faite à partir des observations acquises par microscopie électronique et relevées dans la littérature et ou menées à IFPEN. Ces observations ont permis d'élaborer trois modèles microstructuraux selon la localisation de la porosité.

Parallèlement à la modélisation des microstructures et des propriétés pétroacoustiques des roches mères, une méthodologie de caractérisation expérimentale globale a été définie. Cette méthodologie intègre :

- Un workflow expérimental s'articulant autour d'essais pétroacoustiques non destructifs.
- Un couplage entre des mesures au MEB-EDS et par nanoindentation. *Ce couplage permet de superposer à l'échelle de la microstructure les propriétés mécaniques obtenues par le nanoindenteur et les propriétés chimiques obtenues par MEB-EDS.*
- Une cellule de maturation artificielle sous confinement. *Cette cellule permet de simuler la maturation thermique de la matière organique dans des conditions de pression et température similaires aux conditions d'enfouissement afin d'étudier l'initiation de fracturation induite. Le dispositif expérimental permet de contrôler le confinement appliqué et la pression de pore tout en autorisant l'échantillonnage des gaz générés par maturation thermique.*

Les essais réalisés pour le moment permettent de confirmer la faisabilité des différentes mesures sur les roches mères.

**Mots clés** : roche mère, poromécanique, microstructure, milieu effectif, méthodologie de caractérisation expérimentale



# Analyse systémique des facteurs de risques aux interfaces fonctionnelles du bâti - Modélisation en termes de critères de constructibilité et de performances d'usage

## AUTEURS

Gilles THING LEO

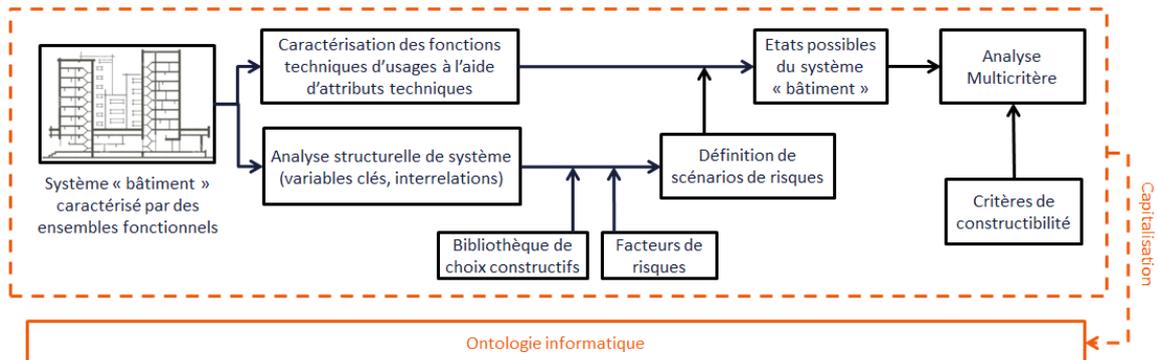
## Résumé

**Contexte :** La thèse a pour cadre le projet de recherche industriel FUI RiD Project Management, articulant risques constructifs et risques de comportement dans l'analyse et l'évaluation pour la prise de décision en situation d'incertitude. A terme, il s'agit de mettre à disposition des professionnels les outils d'analyse décisionnelle au niveau stratégique et opérationnel visant à évaluer l'effet de l'incertitude sur la création de valeur. Ce projet de R&D innovant est soutenu par le Conseil régional d'Ile-de-France et la Banque Publique d'Investissement

**Objectif :** Etablissement d'un modèle de gestion des connaissances permettant de capitaliser sur les concepts et connaissances relatifs au risque de dégradation des performances d'usage d'un bâtiment du fait des principes constructifs et des options technologiques utilisés, et des aléas propres au processus de production. Dans le cadre de la Constructibilité, un tel outil permet d'anticiper les difficultés dans les projets et se positionne comme un support d'aide à la décision quant à l'obtention d'un ouvrage bâti de bonne facture.

**Verrous :** [1] Absence de méthodologie générique permettant de capitaliser sur les connaissances relatives à la conjugaison des performances d'usages et du processus de production. [2] L'analyse fonctionnelle, une méthodologie limitée face à la complexité du processus de production et à l'ambiguïté. [3] Des critères d'évaluation de plus en plus nombreux et demandant une prise de recul pour permettre leur emboîtement et une future évaluation d'ensemble

### Synoptique général des travaux :



### Résultats attendus et perspectives :

- [1] Capitalisation des connaissances sur le produit (le bâtiment) et son processus de production (le projet).
- [2] Etablissement de liens entre performance d'usage et attributs techniques caractérisant chaque composant.
- [3] Identification des risques de dégradation des performances attendues, dès le choix d'un principe constructif.
- [4] Support d'aide à la décision pour les parties prenantes d'un projet en conception et en réalisation.
- [5] Couplage de cette base de connaissance avec des bases de données et des retours d'expériences (apprentissage statistique)

**MOTS CLES :** Constructibilité, analyse fonctionnelle, décision multicritère, facteurs de risque

Ecole doctorale, sciences, ingénierie, environnement

# Traitement par extraction électrochimique des ions chlorure dans les bétons armés carbonatés

## AUTEURS

Yolaine TISSIER, Véronique Bouteiller, Thierry Chaussadent, Suzanne Joiret, Elisabeth Marie-Victoire

## Résumé

La corrosion des armatures dans les bétons armés est l'une des causes récurrentes des dégradations observées sur les ouvrages d'art et dans le domaine des monuments historiques. Les deux origines principales de l'initiation de la corrosion dans le béton armé sont la carbonatation du béton d'enrobage jusqu'à l'armature et la présence d'ions chlorure à l'interface acier/béton. Ces phénomènes peuvent être rencontrés séparément ou de manière combinée sur le terrain et des traitements adaptés sont donc recherchés permettant la préservation de ces ouvrages et par conséquent l'augmentation de leur durée de vie.

Cette étude porte sur un traitement électrochimique d'extraction des ions chlorure et a pour but d'apporter des connaissances supplémentaires sur les aspects suivants :

- le cas des bétons à la fois carbonatés et chlorurés, particulièrement rencontrés en zone maritime, en zone urbaine sujette à l'utilisation de sels de déverglaçage ou encore lorsque les ions chlorure sont issus des composants utilisés lors de la fabrication (par exemple sable marin, accélérateur de prise comme le  $\text{CaCl}_2$  maintenant interdit) ;
- les transformations induites par le traitement électrochimique d'extraction des ions chlorure et donc son impact et sa durabilité ;
- les éventuelles spécificités de comportement en fonction de la nature du ciment.

Ainsi, lors de cette étude, quatre formules sont étudiées comprenant différents modes de contamination (chloruré au gâchage puis carbonaté ou carbonaté puis chloruré par cycles d'immersion/séchage) et deux types de ciments (CEM I et CEM III/A). Les comportements spécifiques des différentes formules sont étudiés lors de la phase de corrosion puis lors du traitement (polarisation cathodique, 1 A/m<sup>2</sup> d'armature pendant 8 semaines maximum).

Différentes techniques sont utilisées pour étudier les processus de corrosion, l'efficacité du traitement, ses possibles impacts négatifs et sa durabilité, parmi lesquelles les trois principales sont : la caractérisation électrochimique, la microscopie électronique à balayage (MEB couplé à l'EDS) et la microspectrométrie Raman. Le suivi électrochimique permet notamment d'identifier le passage de la corrosion passive à active en se basant sur le changement de potentiel et la valeur du courant de corrosion. L'analyse in situ des produits de corrosion par microspectrométrie Raman et l'observation au MEB couplé à l'EDS de l'interface acier-béton permettent d'identifier les phases formées et de localiser les lieux d'initiation de la corrosion puis d'étudier leur évolution lors du traitement électrochimique de déchloration. Plus particulièrement, l'utilisation de la microspectrométrie Raman sur des cellules spécifiques pour un suivi in-situ permet d'observer les transformations des phases cristallisées des produits de corrosion au court du traitement et de vérifier leur stabilité.

## MOTS CLES

Ions chlorure, carbonatation, corrosion, extraction électrochimique, suivi in-situ



# Damage models contributions on generation and development of failure zone around tunnels in quasi-brittle rocks

## AUTEURS

Edoardo Trivellato, Amade Pouya, Darius Seyedi, Minh-ngoc Vu

## Résumé

The excavation of deep tunnels in quasi-brittle rocks creates a damaged area whose generation and development are important to determine the short and long term properties of the material around these structures. In general, the extension of this zone is estimated from a stress field calculated in elasticity or based on an elastic-plastic calculation. While the first does not take into account the redistribution of stresses due to irreversible phenomena, conventional models in elastoplasticity seem insufficient to explain the observed patterns of the failure zone encountered in some cases. In-situ observations and laboratory tests suggest that phenomena of softening damage are crucial to the development of these zones and must be considered for geotechnical modelling.

Numerical simulations are performed with the code Porofis (Pouya, 2015) in plane strain conditions. A linear elastic behavior is considered before the yielding occurrence, modelled according to a Drucker-Prager criterion. Two softening laws based on the elastoplasticity or elastodamage are then considered. Even if the parameters of both models can be calibrated to reproduce the same stress-strain curves in monotonous compression, these models can lead to different results.

The plain strain simulations imply a homogeneous unloading of a circular cavity in order to reproduce the tunnel excavation. The medium around the cavity is defined with an isotropic material and an initial three-dimensional stress state is imposed. The tensor describing the stress state shows an anisotropic component perpendicular to the simulation plane ( $\sigma_{zz} \neq \sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ ).

If the elastoplastic material model is adopted, a plastic circular area develops around the gallery wall. The same simulation carried out for an isotropic elastodamage medium leads to a localized damage pattern around the cavity. A comparison of the displacements and strains field throughout the unloading process shows an overall instability related to the elastoplastic model (i.e. concerning the entire gallery wall), while a localized instability can be deduced with the elastodamage model.

Andra (French National Radioactive Waste Management Agency) is managing a feasibility study of the impact of a high-level and intermediate-level long lived waste disposal in the Callovo-Oxfordian claystone formation. The Andra Underground Research Laboratory (URL) provides evidences of the failure zones around the excavated tunnels. An anisotropic initial stress state is observed at the main level of the URL:  $\sigma_v \approx \sigma_h \approx 12.5$  MPa, and  $\sigma_H \approx 16$  MPa. In-situ observations concerning the failure zone for a tunnel parallel to  $\sigma_H$  are considered to evaluate the performances of an anisotropic damage mechanics based model. The anisotropy of both the elastic stiffness and failure criterion are taken into account. Conducting the 2D plane simulations, it is assumed that the damage does not affect the material stiffness in the out-of-plane direction.

The shape and extension of the simulated damaged area (i.e. failure zone) around the gallery is consistent to the observed failure zone in Andra URL for the reference tunnel. Regarding the tunnel short-term convergences (Armand et al., 2013; Guayacán-Carrillo et al., 2016), the horizontal closure (~40 mm) is slightly overestimated, while the vertical one (~20 mm) is slightly underestimated. To improve the model, further upgrades as a hardening phase before the resistance peak will be accounted.

## MOTS CLÉS

elastodamage model, softening, quasi-brittle rocks, damaged failure zone, tunneling, numerical modeling



# Altération des textiles : le rôle de la poussière

## AUTEURS

Pauline Uring, Anne Chabas, Stéphane Alfaro

## Résumé

Les textiles représentent une importante partie des collections d'objets d'art conservés dans les musées et les monuments historiques. Qu'il s'agisse de tentures, garnitures de fauteuils, rideaux ou tapisseries, leur conservation est délicate. En effet, les tissus sont très sensibles aux facteurs environnementaux : lumière, hygrométrie et attaques biologiques peuvent causer des dommages irréversibles. Cependant, un autre agent d'altération reste moins étudié : la poussière. D'abord perçue comme une simple nuisance esthétique, ses actions physico-chimiques directes et indirectes sur les œuvres ont été récemment mises en évidence. Néanmoins, les mécanismes par lesquels les particules altèrent les textiles restent méconnus.

Afin de mieux appréhender les impacts du dépôt de poussière sur un textile et de permettre aux conservateurs de mieux préserver leurs collections, des simulations en laboratoire couplées à des observations in-situ à long terme ont été mises en place. Des textiles modèles ont été artificiellement empoussiérés et seront vieillis en chambre environnementale (CIME du LISA) ; leur comportement sera comparé, par une approche multi-analytique, à celui de textiles déposés dans trois musées et monuments historiques français : le Château de Fontainebleau, la Villa Kérylos (Beaulieu-sur-Mer) et le Musée National du Moyen-Âge (Paris).

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Particules atmosphériques, textile, altération, musées, monuments



# Inactivation des entérovirus par la température et les rayons ultra-violet : effet protecteur de différents composés organiques

## AUTEURS

Prunelle Waldman, Sébastien Wurtzer, Laurent Moulin, Patricia Albanese, Françoise Lucas

## Résumé

Les virus entériques sont une des principales causes d'infections d'origine hydrique. Excrétés dans les eaux usées, ils traversent relativement facilement les stations d'épuration avant de rejoindre les eaux de surface dans lesquelles ils sont très fréquemment détectés et quantifiés à des concentrations de l'ordre de  $10^3$  à  $10^5$  unités génome par litre. Les eaux de surface constituent par ailleurs l'une des ressources majeures pour la production d'eau potable à Paris. Les virus entériques ayant de faibles doses infectieuses (l'ingestion de quelques particules virales peut suffire pour déclencher une infection), il est primordial que les traitements de désinfection multi-barrières appliqués en usine aboutissent à un abattement suffisant pour limiter le risque de contamination du consommateur. L'efficacité des traitements est généralement évaluée à l'échelle du laboratoire sur des suspensions virales purifiées. Ces conditions sont éloignées des conditions réelles dans lesquelles les virus peuvent entrer en contact avec un grand nombre d'éléments, et en particuliers avec des composés organiques. Si les interactions virus-matières organiques et leurs mécanismes sont encore relativement peu connus, des études récentes ont montré que des associations avec certains composants bactériens peuvent accroître la stabilité des particules virales.

Dans ce contexte, l'objectif des travaux présentés est de décrire l'impact des interactions entre des virus et de différents composés organiques sur l'efficacité de deux procédés permettant d'inactiver les virus via des mécanismes distincts : la température qui induit une dénaturation des protéines de capsid, et l'irradiation aux rayons ultra-violet (UV) basses pressions (254 nm) ciblant principalement le génome viral. À cet effet, quatre virus entériques du genre entérovirus ont été exposés à la chaleur ou aux UV en présence de différents composés, puis l'infectivité résiduelle a été mesurée. Les composés organiques considérés comprennent des lipopolysaccharides et peptidoglycanes (molécules présentes à la surface de nombreux micro-organismes retrouvés dans l'eau), des acides humiques, ou encore des extraits protéiques. Certains d'entre eux ont, dans l'un ou l'autre des modes d'inactivation, engendré une réduction de l'abattement viral. Dans le cas du traitement thermique, les lipopolysaccharides et peptidoglycanes ont conféré une protection des virus concentration-dépendante de l'ordre de  $3\text{-log}_{10}$ . De façon plus prévisible, ce sont les composés protéiques qui ont le plus altéré l'efficacité des UV du fait d'une forte absorption à la longueur d'onde 254 nm.

Ces travaux viennent renforcer l'idée que la nature de l'environnement des virus peut favoriser leur persistance dans les milieux aquatiques et au cours des traitements de désinfection en usine.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Virus entériques, traitement de désinfection, abattement viral



# Compréhension des mécanismes de transferts d'eau dans le bois

## AUTEURS

Meng Zhou, Denis Courtier-Murias, Paméla Faure, Stéphane Rodts, Sabine Caré, Philippe Coussot

## Résumé

Les transferts d'eau dans le bois jouent un rôle important dans de nombreux domaines, de la vie de l'arbre vivant aux applications du bois comme matériaux de construction. Malgré les études menées depuis un siècle sur la relation eau-bois, les mécanismes sont toujours mal appréhendés à cause de la structure multi-échelle et anisotrope particulière du bois qui est formé de canaux, ponctuations, cellules, à travers lesquels l'eau peut circuler ou pénétrer sous forme d'eau libre ou d'eau liée. En général, les modélisations supposent qu'on peut décrire le bois comme un matériau poreux à la structure bien définie et avec une certaine distribution de tailles de pores. Ce type de modèle ne permet notamment pas de décrire les propriétés particulières d'imbibition du bois. Par exemple il est admis que des propriétés *a priori* « intrinsèques » du bois, telles que la perméabilité, dépendent des dimensions de l'échantillon. Ce paradoxe illustre bien le niveau actuel de méconnaissance des phénomènes physiques en jeu.

De façon à comprendre l'origine de la perméabilité d'un peuplier nous nous intéressons à l'imbibition de deux types de liquide : l'eau et l'huile de silicone qui un liquide apolaire n'ayant pas d'effet sur le gonflement du bois et dont on peut facilement faire varier la viscosité. Nous avons effectué des expériences d'imbibition macroscopiques, qui a pour but de donner une vue globale de la perméabilité du bois vis-à-vis des liquides ayant différentes interactions avec le bois. Les résultats nous montrent que la loi de Darcy, qui décrit le transfert de liquide à travers un milieu poreux, prédit *a priori* la dynamique de l'imbibition de l'huile de silicone. Cependant pour l'eau, la pénétration est mille fois plus lente que la théorie. Nous avons ensuite réalisé des observations internes au sein du bois grâce à l'Imagerie par Résonances Magnétiques (IRM). L'IRM nous permet de différencier et visualiser directement des distributions spatiales et temporelles de l'eau libre dans les pores et de l'eau liée absorbé dans les parois cellulaires. Nous avons ainsi pu voir que d'un côté, l'eau libre ne pénètre pas dans le bois à la vitesse prévue sous l'effet capillaire, et de l'autre côté, l'eau liée diffuse dans les parois cellulaires et avance toujours devant le front d'avancée de l'eau libre, en laissant un plateau de saturation derrière son front de diffusion. A long terme, l'eau libre est capable d'atteindre une large distance comme si elle mouille bien le milieu. Nous en concluons que le ralentissement dramatique de la pénétration d'eau dans le bois est dû à l'absorption et la diffusion longitudinale de l'eau liée dans les parois cellulaires.

## Mots clés (3 A 6 MOTS CLES)

Imbibition, bois, IRM, eau liée, eau libre

Journée Scientifique - 27 avril 2017



# Elicitation des interactions entre ingénierie système et constructibilité. Application à un concept innovant de métro multifonctionnel.

## AUTEURS

Nicolas ZIV, Andrea KINDINIS, Christophe GOBIN

## Résumé

Pour répondre aux besoins des populations liés à l'urbanisation croissante à travers le monde, les besoins en infrastructures de tous types sont en constante augmentation. Paradoxalement, le secteur de la construction et plus particulièrement les mégaprojets d'infrastructures, souffrent de nombreux retards, surcoûts et de sous-qualité.

Pour répondre à ces enjeux, nous développons en coopération avec le bureau d'étude Egis le concept de métro multifonctionnel dont l'objectif est de répondre à l'ensemble des besoins de la ville grâce à un système optimisé permettant non seulement de transporter des passagers mais aussi de l'eau, de l'électricité, de la chaleur, du froid, des marchandises, des déchets, des données etc. afin de répondre globalement à l'ensemble des besoins de la ville.

Néanmoins, répondre à de multiples besoins des populations avec un seul ouvrage augmente la complexité du système à tous les niveaux. Comment gérer cette complexité nouvelle et pouvoir garantir des performances du produit (qualité) et du projet (coûts, délais) dans un secteur déjà peu performant sur ces critères ?

L'ingénierie système est un corpus méthodologiques dont l'objectif est la maîtrise et la gestion du développement des systèmes complexes. Ces méthodes ont surtout été utilisées dans d'autres domaines industriels comme l'aéronautique, l'aérospatial, la défense ou l'automobile mais très peu dans les bâtiments et les infrastructures. Ainsi, notre objectif est d'étudier ces méthodes et si nécessaire les adapter ou les modifier pour prendre en compte les particularités du domaine de la construction. La constructibilité consiste est « une démarche qui vise à fournir, dès le lancement du projet, une assurance raisonnée quant à l'atteinte des objectifs de tout projet de construction sur son cycle de vie ». On voit donc que les concepts développés dans ce domaine sont parfaitement complémentaire à l'ingénierie système pour maîtriser la complexité des systèmes complexes issus du domaine de la construction.

D'autre part, chacun de ces corpus ont développé des outils permettant de mettre en pratique leurs méthodes. Ces outils se sont développés avec des standards différents et ne sont pas nécessairement interopérables. Pourtant, leur utilisation nous paraît complémentaire et nous étudions comment développer des outils en lien entre ces deux domaines (par exemple : lien entre outil SysML et BIM). Nos travaux vont donc consister à développer des méthodes et des outils à l'intersection entre Ingénierie Système et Constructibilité dans l'objectif de développer des projets complexes dans les délais et les budgets prévus pour répondre aux besoins croissant des populations urbaines.

## MOTS CLES (3 à 6 mots clés)

Constructibilité, Ingénierie Système, Analyse fonctionnelle, Infrastructures, mutualisation

