



RAPPORT SCIENTIFIQUE

2016 / 2017



*maîtriser le risque |
pour un développement durable*



Créé en 1990, l'Ineris, Institut national de l'environnement industriel et des risques, est un établissement public à caractère industriel et commercial placé sous la tutelle du ministère de la Transition écologique et solidaire.

04

UN ANCRAGE SOLIDE DANS LA RECHERCHE
POUR ASSURER LA QUALITÉ ET LA CRÉDIBILITÉ
DE L'EXPERTISE



06

**UNE ANNÉE DE RECHERCHE
À L'INERIS**



08

ANTICIPER LES RISQUES ÉMERGENTS
ET INTÉGRER LES RISQUES LIÉS
AU CHANGEMENT CLIMATIQUE,
ACCOMPAGNER LA TRANSITION ÉNERGÉTIQUE



28

COMPRENDRE ET MAÎTRISER LES RISQUES
À L'ÉCHELLE D'UN SITE INDUSTRIEL
OU D'UN TERRITOIRE



48

**CARACTÉRISER LES DANGERS DES SUBSTANCES
ET PRODUITS** ET LEURS IMPACTS SUR L'AIR,
L'EAU, LES SOLS ET LES ORGANISMES VIVANTS

64

ANNEXES



Raymond COINTE, directeur général
Mehdi GHOREYCHI, directeur scientifique

UN ANCRAGE SOLIDE DANS LA RECHERCHE POUR ASSURER LA QUALITÉ ET LA CRÉDIBILITÉ DE L'EXPERTISE

Le développement d'une recherche de haut niveau constitue un élément fondamental de la politique d'excellence de l'Ineris. Cette recherche permet d'alimenter et de nourrir l'expertise que l'Institut met à disposition des politiques publiques et des industriels dans les domaines de la prévention et de la maîtrise des risques industriels et environnementaux.



L'activité de recherche sur subvention publique se structure au travers d'axes qui disposent de feuilles de route construites sur des objectifs à 3 ou 4 années. Si on y ajoute le financement résultant des succès sur appels à projets de recherche régionaux, nationaux et européens ainsi que les contrats de recherche partenariale avec des entreprises, la recherche représente environ 20 % de l'activité de l'Institut.

Le contrat d'objectifs et de performance 2016-2020 illustre parfaitement la complémentarité entre ces deux types d'activités. Les priorités de l'Institut qui y sont détaillées sont en effet regroupées au sein de thèmes structurants qui nécessitent des développements de connaissances préalables à l'élaboration de référentiels, guides techniques et méthodes indispensables au déploiement d'une action publique visant à mieux maîtriser les risques environnementaux.

Ce sont ces mêmes thèmes qui structurent le présent rapport scientifique. Le document livre, au travers d'un éventail de sujets d'actualités, un aperçu de la diversité des compétences, outils et démarches scientifiques mis en œuvre par l'Ineris pour mieux comprendre et anticiper les phénomènes physiques, chimiques et biologiques qui peuvent conduire à des situations à risques.

La très large majorité des recherches réalisées à l'Ineris s'effectue dans un cadre partenarial structurant. Bon nombre de ces partenariats ont une dimension communautaire, l'Institut étant particulièrement actif et performant en termes de participations à des projets de recherche européens (taux de succès de 43 % en 2017). À ce titre, l'Institut a récemment signé des accords de coopération avec le HSE/HSL (Grande-Bretagne) et le centre commun de recherche (JRC) de la Commission européenne, deux des partenaires les plus fréquents au sein des projets européens. L'Institut est également acteur de nombreux réseaux de partenaires au niveau national et régional. L'Ineris construit et entretient des partenariats forts aussi bien avec des acteurs académiques, d'autres établissements publics qu'avec des entreprises privées. On citera en particulier l'existence de deux UMR-I: PERITOX (Périnatalité et risques toxiques) avec l'UPJV d'Amiens et SEBIO (Stress environnementaux et biosurveillance des milieux aquatiques) avec les universités de Champagne-Ardenne et Le Havre-Normandie, toutes deux très positivement évaluées en 2017 par le Haut Conseil de l'évaluation de la recherche et de l'enseignement supérieur (HCERES). La recherche à l'Ineris s'appuie largement sur des plateformes d'essai, souvent à grande échelle, ainsi que sur une culture affirmée de l'expérimentation et de la modélisation numérique dans le but de mieux appréhender la survenue et la complexité des phénomènes dangereux.

L'Ineris est très attentif à la production scientifique de la recherche. Ainsi, depuis plusieurs années, ses chercheurs publient une centaine d'articles dans des revues à comités de lecture référencées dans la base *ISI web of science*. Un nombre important de ces publications est associé aux travaux de thèses de doctorat hébergés par l'Institut (une quarantaine de doctorats en

ENTRETIEN

AVEC **CORINNE GENDRON**,
PRÉSIDENTE DU CONSEIL
SCIENTIFIQUE



Professeure titulaire
Département
de stratégie,
responsabilité sociale
et environnementale
École des sciences
de la gestion, université
du Québec à Montréal (Canada)

moyenne), pour bon nombre encadrés par la vingtaine de HdR présents à l'effectif. La capacité à identifier les bons sujets de recherche dépend également de l'aptitude à anticiper les « problématiques de demain » afin de développer, dès l'amont, les connaissances qui seront nécessaires à l'accompagnement des décisions publiques qui seront attendues dès lors que les dossiers deviendront prioritaires. Pour ce faire, l'Institut mène depuis deux années, une activité de veille prospective visant à identifier les principales thématiques en émergence. Les sujets jugés prioritaires font alors l'objet d'une analyse simplifiée des enjeux visant à discerner les lacunes et verrous scientifiques qu'il conviendrait d'investiguer pour rendre possible la construction d'une expertise qui sera requise dès que le sujet surgira au cœur des débats publics.

16

thèses soutenues
en 2017

43 %

de succès à l'Europe*

100

publications dans
des revues à comité
de lecture référencées isi*

* Indicateurs de recherche du contrat d'objectifs et de performance en 2017.

Le contrat d'objectifs et de performance de l'Ineris pour la période 2016-2020 repose sur quatre blocs structurants. L'un d'entre eux concerne la maîtrise des risques émergents. Quel est selon vous l'apport de l'Institut dans ce domaine ?

L'Ineris est particulièrement bien positionné pour appréhender les risques émergents par sa recherche de pointe, réalisée notamment avec des équipements uniques, mais aussi compte tenu du fait qu'il est en dialogue tant avec le secteur public qu'avec les entreprises, les travailleurs et les citoyens. Ce dialogue avec tous les acteurs de la société est susceptible d'aiguiser son regard sur les risques avec une visée prospective. Il est en effet nécessaire d'anticiper les risques de demain en tenant compte des sensibilités et des attentes de la population afin de les maîtriser de manière optimale. Les recherches de l'Institut contribuent précisément à des choix éclairés quant aux politiques publiques à mettre en œuvre dans un avenir proche.

Quels sont les principaux leviers pour renforcer le rayonnement international de l'Institut ?

Les collaborations de recherche, non seulement entre chercheurs mais aussi entre chercheurs et acteurs de terrain, qu'il s'agisse des citoyens, des collectivités locales ou des entreprises sont à l'origine de partenariats qui peuvent rapidement devenir structurants. Au sein de ces collaborations qui se déploient aux échelles territoriale, nationale et internationale, se discutent les enjeux de risque tout autant que les méthodes et les résultats de recherche. L'Institut peut miser sur ses différentes équipes pour en faire des vecteurs efficaces et prisés de son expertise et de son rayonnement.

Quel est selon vous le rôle principal du conseil scientifique au sein de la gouvernance de l'Ineris ?

Composé de membres issus de disciplines diverses en mesure de poser un regard neuf sur les thématiques et les problématiques de l'Institut, le conseil scientifique cherche à nourrir les réflexions de l'équipe de direction en vue de construire une stratégie de recherche en phase avec les enjeux de la société et l'expertise de pointe à l'échelle mondiale.

UNE ANNÉE DE RECHERCHE À L'INERIS: RETOUR SUR

16 septembre 2016 / Un prix lors de la conférence LIBS 2016

Intitulée « From laser plasmas to analyses », l'édition 2016 de la conférence LIBS* était organisée le 16 septembre à Chamonix. Mohamed Boudhib, doctorant à l'Ineris, a présenté ses travaux au cours de la session « Liquids, Particles, Powders: Aerosols analysis *via* calibration-free laser-induced breakdown spectroscopy in helium ». Il y exposait aussi un poster décrivant le couplage d'un piège à nanoparticules avec un analyseur LIBS, pour lequel il a remporté le 1^{er} prix de sa session.



8 et 9 octobre 2016 / L'Ineris fête la science !

L'Institut s'est mobilisé à l'occasion de la Fête de la science 2016. À Paris, l'Ineris s'est associé à d'autres établissements de recherche et à L'Esprit Sorcier pour créer Science en direct les 8 et 9 octobre 2016 à la Cité des sciences et de l'industrie. Petits et grands ont pu ainsi se frotter aux expériences menées par nos experts en hydrogène, nanoparticules, pollution atmosphérique, poussières combustibles... En région, l'Ineris a ouvert le 11 octobre les portes de la Maison de la pierre à Saint-Maximin (Oise) pour faire découvrir les secrets des cavités souterraines. À Nancy, nos experts basés sur le campus Artem ont proposé une initiation en sismologie.



5 et 6 décembre 2016 / Sécurité globale des sols : une conférence internationale à Paris

À l'occasion de la Journée mondiale des sols, l'Inra, l'Association française pour l'étude du sol et l'Ineris ont organisé la 2^e Conférence internationale sur la sécurité mondiale des sols, les 5 et 6 décembre 2016 à Paris. La conférence a été ouverte par Stéphane Le Foll, ministre de l'Agriculture. Des acteurs d'horizons divers de la société – citoyens, politiques, utilisateurs et gestionnaires des sols – ont échangé ainsi sur cette question et partagé une vision commune.



9 décembre 2016 / L'Ineris, nouveau membre fondateur de la Fondation pour la Recherche sur la Biodiversité

Le 9 décembre, l'Institut est devenu membre fondateur de la Fondation pour la Recherche sur la Biodiversité (FRB). Cet engagement traduit la volonté de l'Institut de partager sa connaissance des polluants environnementaux et son expertise en écotoxicologie avec la communauté de recherche sur la biodiversité animée par la FRB.



15 mars 2017 / Arts & sciences: l'Institut à nouveau sur les planches

La rencontre entre un expert en auscultation des sols et un auteur de théâtre a donné naissance à une pièce de théâtre, intitulée [Effondrements]. Une représentation a eu lieu le 15 mars à la Maison de la pierre, à la carrière de Saint-Maximin (Oise), dans laquelle l'Ineris mène des recherches sur le sujet. Ces rencontres, appelées binôme et créées à l'initiative de la Compagnie de théâtre « Les sens des mots », visent à rapprocher arts et sciences. L'Ineris est partenaire depuis 2014.



21 avril 2017 / L'Ineris et l'Anses renouvellent leur convention de partenariat

Le 21 avril 2017, l'Ineris et l'Anses ont renouvelé un accord de partenariat, signé en 2013. Il vise à renforcer les liens établis depuis plusieurs années, au service de la prévention des risques en santé environnementale.

QUELQUES GRANDS FAITS MARQUANTS



23 novembre 2016 / Semaine de la recherche et de l'innovation 2016

L'Institut a participé aux journées scientifiques organisées par la région Hauts de France à Amiens Mégacité, en présentant ses travaux en matière de maîtrise des risques liés aux différents types de stockage de l'énergie.

6 décembre 2016 / Ineris Références : le stockage souterrain dans le contexte de la transition énergétique

Le dernier numéro de la collection Ineris Références porte sur le stockage souterrain dans le contexte de la transition énergétique. Conçu en étroite collaboration avec la Commission d'orientation de la recherche et de l'expertise, il est l'un des outils développés dans le cadre de l'ouverture à la société de l'Institut. Le document a été présenté le 6 décembre aux parties prenantes : exploitants, administrations, associations, chercheurs. <http://bit.ly/2BVgVES>



27 janvier 2017 / Un accord de partenariat avec le groupe INSA

Le groupe INSA et l'Ineris ont signé un accord de partenariat le 27 janvier. Il vise, pour les cinq ans à venir, à renforcer les relations scientifiques et techniques et leurs complémentarités. Il a également pour objectif de les élargir, notamment en développant de nouvelles collaborations couvrant la recherche et la formation, en France et à l'international, ainsi que le recrutement.



8 mars 2017 / Accord de partenariat avec Health and Safety Laboratory (HSL)

L'Ineris a signé le 8 mars un accord-cadre de partenariat avec Health and Safety Laboratory (HSL), département scientifique du Health and Safety Executive (HSE) situé au Royaume-Uni. Sa mission est de développer des connaissances et des mesures de prévention dans le domaine de la santé-sécurité au poste de travail, avec approche multi-disciplinaire de la démarche sécurité.



22 mai 2017 / Séminaire des orientations scientifiques et techniques

L'Ineris a organisé le 22 mai son séminaire annuel des orientations scientifiques et techniques. Cette édition a été consacrée à une réflexion transversale sur le positionnement de l'Institut dans la chaîne de gestion des risques, de la recherche amont à la recherche appliquée, à l'évaluation et à l'action du décideur. La réflexion a permis de contribuer à la structuration du positionnement de l'Ineris vis-à-vis du principe de précaution, en questionnant notamment la notion d'incertitude. Ce séminaire a également été l'occasion de mettre à l'honneur deux experts : Frédéric Bois, directeur de recherche en toxicologie, a été nommé chevalier des palmes académiques et Laurence Rouil, experte en modélisation de la qualité de l'air, chevalier de l'Ordre national du mérite. Pour lire le compte rendu : <http://bit.ly/2ksK7CG>



ANTICIPER LES RISQUES ÉMERGENTS
ET INTÉGRER LES RISQUES LIÉS
AU CHANGEMENT CLIMATIQUE,
ACCOMPAGNER LA TRANSITION
ÉNERGÉTIQUE



L'unité mixte de recherche SEBIO au service de la surveillance des milieux aquatiques	10
Bioessais et contaminants émergents, vers de nouvelles stratégies de surveillance dans la DCE	12
Les progestatifs, les poissons et les milieux aquatiques: apports du projet ANR « PROOFS »	14
Effet des radiofréquences sur des modèles de vulnérabilité cérébrale: développement et neuro-inflammation	16
Relargage de dioxyde de titane nanoparticulaire dans les milieux environnementaux à partir de nanomatériaux	18
CHIMERE: vers la modélisation de la qualité de l'air à l'échelle du globe	20
Risques NaTech: vulnérabilité et résilience des installations industrielles sous l'effet d'un tsunami	22
Détermination expérimentale du courant minimal d'inflammation de mélanges méthane/hydrogène contenant jusque 20 % d'hydrogène	24
Fuites massives sur les canalisations de transport de CO ₂ en phase dense	26

L'UNITÉ MIXTE DE RECHERCHE SEBIO AU SERVICE DE LA SURVEILLANCE DES MILIEUX AQUATIQUES

Contributeurs

Jean-Marc
PORCHER,

Alain
GEFFARD,
directeur
de l'UMR
SEBIO

En 2014, les universités de Reims Champagne-Ardenne, du Havre Normandie et l'Ineris ont mis en place une convention pour la création de l'unité mixte de recherche UMR-I-02 SEBIO, sur les « Stress environnementaux et la biosurveillance des milieux aquatiques ». L'objectif de ce projet est de se donner les moyens d'accélérer les travaux sur la compréhension des mécanismes fondamentaux à la base de l'action toxique et ainsi de développer et valider de nouveaux biomarqueurs chez différentes espèces (poissons, mollusques, crustacés) utilisables comme indicateurs pour la surveillance des milieux aquatiques. Depuis le 1^{er} janvier 2018, l'unité est composée de 30 enseignants-chercheurs ou cadres de recherche, 14 personnes d'appui à la recherche (BIATSS et ETAM) et 20 doctorants et post-doctorants. L'UMR-I SEBIO ayant été évaluée pour la première fois par le Haut Conseil d'évaluation de la recherche et de l'enseignement supérieur (HCERES) fin 2016, l'occasion est saisie pour présenter l'unité et ses principales activités.

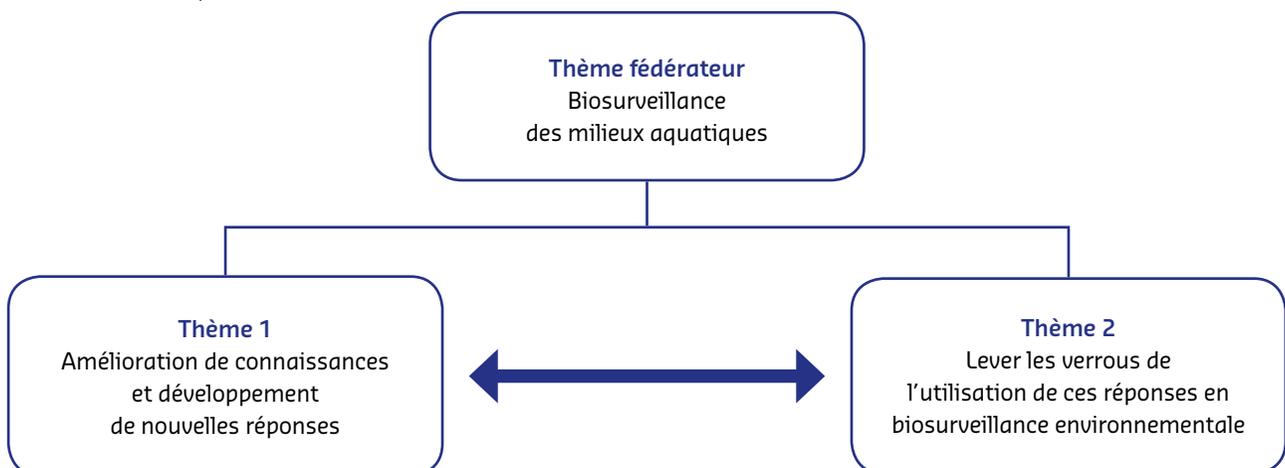
LA TOXICOLOGIE ET L'ÉCOTOXICOLOGIE AU CŒUR DES ACTIVITÉS

Les missions de l'UMR sont triples et comprennent les volets formation, recherche et expertise. Concernant tout particulièrement le volet recherche, les activités de l'UMR s'inscrivent en toxicologie et écotoxicologie aquatiques dont l'un des principes fondateurs est la relation de cause à effet qui relie une altération

à un niveau d'organisation biologique donné et ses conséquences au niveau supérieur. Ainsi, une interaction polluant-molécule biologique peut entraîner des désordres moléculaires pouvant compromettre en chaîne, le fonctionnement cellulaire, les capacités physiologiques d'un individu et, ainsi, atteindre les niveaux d'organisation biologique supérieurs, de la population aux écosystèmes, lorsque les mécanismes de compensation, de résistance et les rétroactions sont dépassés. Aussi, le développement de réponses prédictives de l'état de santé des organismes et de la qualité des milieux représente l'objectif premier de l'UMR dont le thème fédérateur est la biosurveillance des milieux aquatiques.

Cependant, la principale difficulté concernant l'utilisation de ces réponses biologiques comme indicateurs prédictifs réside dans la complexité du vivant. Chaque niveau d'organisation biologique est un réseau complexe d'interactions et aucune action ne peut être considérée comme simple, linéaire et univoque. Un ensemble d'acteurs et de systèmes interconnectés intervient à chaque niveau et constitue, dans un contexte dynamique (temporel et spatial), le réseau maintenant les systèmes en équilibre. Il apparaît donc important que la recherche puisse lever les verrous scientifiques et techniques à l'utilisation de ces indicateurs biologiques actuels mais également s'attache au développement des indicateurs de demain.

Figure 1 /
Structuration scientifique de l'UMR SEBIO.



DES PROJETS DE RECHERCHE ENGAGÉS

Dans ce contexte, la stratégie mise en place par l'UMR est double et s'appuie sur deux thèmes de recherche (figure 1). Le premier thème vise à l'amélioration des connaissances conduisant au développement de nouvelles réponses d'intérêt en tant qu'indicateurs. Le second thème a pour objectif de lever les verrous de l'utilisation de ces réponses en tant qu'outils en biosurveillance environnementale. La pertinence de l'utilisation des réponses biologiques pour la surveillance des milieux a été à nouveau soulignée dans un rapport technique pour la commission européenne¹.

Les recherches de l'UMR conduisent à coupler une approche mécanistique des interactions entre stress environnementaux et organismes et une valorisation des connaissances acquises sous la forme d'indicateurs biologiques utilisables dans un contexte de biosurveillance. La recherche concernant les mécanismes d'action et l'identification de réponses d'intérêt pour la surveillance des milieux se focalise sur trois fonctions qui sont « la reproduction et l'endocrinologie », « l'immunité et la capacité de défense » et « l'énergie et le métabolisme ». L'ensemble de ces travaux visent à renseigner la pertinence écologique des biomarqueurs moléculaires en précisant le lien entre leurs modulations et les conséquences éventuelles sur la *fitness* des organismes. En effet, la complexité biologique et son influence sur la modulation des réponses d'intérêt peut en partie expliquer la faible utilisation de ces outils pour la surveillance réglementaire dans le cadre de la directive-cadre sur l'eau (2000/60/CE) et de la directive-cadre stratégie pour le milieu marin (2008/56/CE).

Si les recherches de l'UMR doivent contribuer à lever ces verrous, l'applicabilité de ces outils et leur intérêt par rapport aux approches existantes doivent passer par le développement de protocoles communs de mesure des réponses sélectionnées au sein de l'UMR et la confrontation de ces protocoles à d'autres méthodologies afin d'en assurer l'optimisation, et la mise en œuvre des outils développés dans un contexte réaliste dans le cadre des études de cas ou contrôles d'enquête en lien avec la mission d'expertise de l'Ineris.

Dans ce contexte, l'UMR est porteuse de plusieurs projets, tel que le projet DIADeM « Développement d'une approche intégrée pour le diagnostic de la qualité des eaux de la Meuse » dans le cadre du programme INTERREG France-Wallonie-Vlaanderen (www.interregdiadem.fr).

ABSTRACT /

Reims Champagne-Ardenne university (URCA), University of Le Havre (ULH) and Ineris recently created together the research unit SEBIO "Environmental stress and aquatic biomonitoring" (UMR-I-02 SEBIO). The objective is the amplification of the works on the understanding of toxic fundamental mechanisms and therefore the development and validation of new biomarkers to various species (fishes, mollusks, shellfish) as suitable indicators to the surveillance of the aquatic environment.

The research focuses on three main functions such as "reproduction and endocrinology", "immunity and the capacity of defense" and "energy and metabolism". All these works will enable to improve the ecological relevance of the molecular biomarkers by specifying the link between their modulations and the possible consequences on the organisms fitness.



Pour consulter le rapport d'évaluation :
<http://bit.ly/2E9bVVR>

¹ Technical report on aquatic effect-based monitoring tools, technical Report - 2014 - 077

BIOESSAIS ET CONTAMINANTS ÉMERGENTS

VERS DE NOUVELLES STRATÉGIES DE SURVEILLANCE DANS LA DCE

Contributeurs

Selim
AÏT-AÏSSA,
François
BRION,
Valeria
DULIO,
Christine
FÉRAY

L'évaluation de la qualité chimique des milieux fait actuellement face à des défis scientifiques et techniques importants pour prendre en compte la complexité des contaminations et la toxicité des mélanges. Les milieux aquatiques sont contaminés par des milliers de molécules chimiques, de classes et d'origines très diverses, qui peuvent subir des transformations biotiques et abiotiques générant ainsi des métabolites et produits de dégradation parfois aussi, voire plus, toxiques que les composés parents. La prise en compte de la complexité de cette contamination constitue aujourd'hui un enjeu majeur dans la surveillance des pollutions aquatiques.

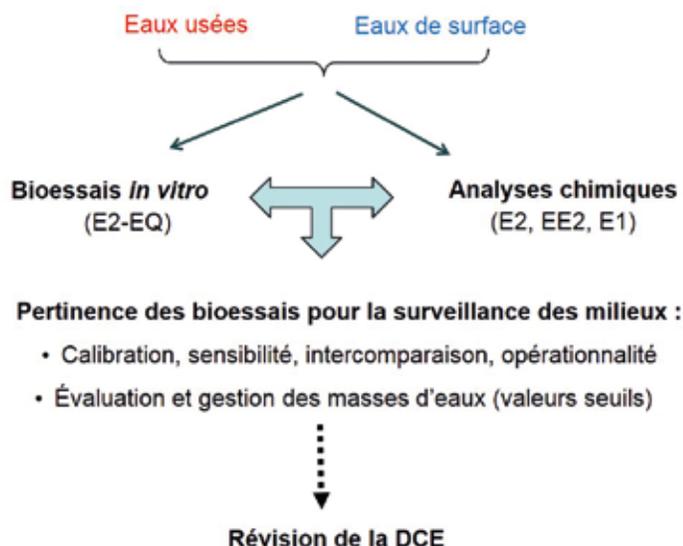
La directive-cadre européenne sur l'eau (DCE) impose une surveillance chimique des milieux basée sur l'analyse d'un nombre fini (53) de substances prioritaires, fournissant une information très limitée au regard de la réalité. L'utilisation de méthodes d'analyse plus intégratives et prenant en compte les interactions entre polluants est donc envisagée pour améliorer le

diagnostic. Les méthodes biologiques telles que les bioessais de laboratoire renseignent sur la toxicité de l'ensemble des molécules biologiquement actives présentes dans un échantillon, tout en intégrant les interactions entre molécules. Parmi les méthodes actuellement disponibles, les bioessais basés sur le mécanisme d'action des polluants, e.g. interaction avec un récepteur intracellulaire, fournissent une réponse sensible et spécifique de familles de polluants, tels que les composés *dioxin-like* ou les composés œstrogéniques.

DES BIOESSAIS *IN VITRO* ET *IN VIVO*

Dans le cadre de ses programmes de recherche, l'Ineris a contribué au développement de bioessais *in vitro* (tests cellulaires) et *in vivo* (tests sur embryons de poisson zèbre) fonctionnels pour la détection et la quantification (en hormone-équivalents) de perturbateurs endocriniens dans différentes matrices environnementales telles que les eaux de surface continentales, les rejets (urbains, industriels) ou les sédiments de rivière. Ces outils sont éprouvés dans des programmes prospectifs de surveillance au niveau national (e.g. campagnes prospectives de recherche de contaminants émergents, projets REGARD et MICROPOLIS¹) et dans le cadre de projets européens (e.g. NORMAN, FP7-EDA-Emerge, FP7-SOLUTIONS).

Figure 1 / Le projet européen « Estrogen monitoring » a permis de démontrer la pertinence des bioessais de mesure d'activité œstrogénique pour la surveillance des stéroïdes œstrogènes dans les eaux de surface et les rejets. Ce projet était soutenu par l'activité Science-Policy Interface (SPI) de la DG-Environnement de la Commission européenne. Son apport contribue à la réflexion sur le développement de nouvelles approches intégrant les bioessais pour la surveillance chimique dans le cadre de la DCE.



L'application de ces outils innovants pour la surveillance réglementaire nécessite une harmonisation internationale des protocoles (validation) et la définition de critères d'interprétation utiles pour la gestion des milieux. Dans le cadre du programme AQUAREF, l'Ineris a participé à une étude internationale (projet « Effect and chemical analytical monitoring for the steroidal estrogens », **figure 1**) qui visait à intercomparer différents bioessais *in vitro* de mesure de l'activité œstrogénique, et à les comparer à des méthodes analytiques de mesure des hormones stéroïdiennes œstrogènes, l'estradiol (E2), l'estrone (E1) et l'éthinyl-estradiol (EE2). Ces molécules, qui font partie de l'actuelle liste de vigilance de la DCE, ont des normes de qualité environnementales (NQE) très basses (0,035 pg/L pour l'EE2 et 0,4 ng/L pour l'E2) ce qui pose un réel défi de sensibilité analytique.

RÉSULTATS

Ce projet européen a permis de montrer que les différents bioessais évalués fournissent des résultats comparables [1] et sont complémentaires de l'approche analytique pour détecter, à des niveaux de concentrations très bas, les hormones dans les eaux de surface et les rejets. Pour évaluer le risque environnemental au regard des résultats de bioessais, des valeurs seuils en équivalents-estradiol (0,3-0,5 ng E2-équivalent/L) ont été proposées. Les bioessais *in vitro* évalués dans ce projet sont suffisamment sensibles pour quantifier les œstrogènes en deçà de ces seuils. De plus, l'application du bioessai *in vivo* EASZY développé par l'Ineris a permis d'éprouver expérimentalement ces valeurs seuils *in vitro* et de confirmer leur pertinence toxicologique au regard d'un effet mesuré *in vivo* [2]. Une méthodologie basée sur les quotients de risque à partir des résultats des bioessais a en outre été proposée pour déterminer le statut écotoxicologique des milieux pour ces substances [3].

La mise en œuvre de programmes prospectifs fournit des données systématiques qui prouvent l'applicabilité des bioessais pour la surveillance des milieux. Ces données alimentent les travaux en cours au sein du groupe de travail mis en place par la Commission européenne (DG-Environment, WG-Chemicals/ « Effect-based methods »), auquel l'Ineris participe, qui visent à proposer une approche plus holistique de l'évaluation de l'état chimique des eaux pour les prochains cycles de la DCE, avec le but d'introduire les outils biologiques dans une stratégie globale de gestion du risque.

¹ Projets financés dans le cadre de l'appel à projets « Micropolluants urbains » de l'ONEMA et des Agences de l'eau.

Références

[1] Kunz, P.Y.; Simon, E.; Creusot, N.; Jayasinghe, B.S.; Kienle, C.; Maletz, S.; Schifferli, A.; Schönlau, C.; Ait-Aïssa, S.; Denslow, N.; Hollert, H.; Werner, I.; Vermeirssen, ELM. (2017) Effect-based tools for monitoring estrogenic mixtures: Evaluation of five *in vitro* bioassays. *Water Research*, 110, 378-388.

[2] Brion, F.; Gussem, V.; Piccini, B.; Perceval, O.; Slobodnic, J.; Hollert, H.; Féray, C.; Dulio, V.; Kase, R.; Ait-Aïssa, S. (2017) Comparative estrogenic activities of estrogen monitoring samples *in vitro* and *in vivo*. Estrogen Monitoring Workshop, Dübendorf, Switzerland, 21st June 2017.

[3] Kase, R.; Javurkova, B.; Simon, E.; Swart, K.; Schlüsener, M.; Buchinger, S.; Könemann, S.; Escher, B.I.; Carere, M.; Dulio, V.; Ait-Aïssa, S.; Hollert, H.; Valsecchi, S.; Polesello, S.; Behnisch, P.; di Paolo, C.; Olbrich, D.; Tavazzi, S.; Sychrova, E.; Gundlach, M.; Schlichting, R.; Leborgne, L.; Clara, M.; Scheffknecht, C.; Marneffe, Y.; Chalou, C.; Tusil, P.; Soldan, P.; von Danwitz, B.; Schwaiger, J.; Moran Palao, A.; Bersani, F.; Perceval, O.; Kienle, C.; Vermeirssen, E.; Hilscherova, K.; Reifferscheid, G.; Werner, I. Screening and risk management solutions for steroidal oestrogens in surface and wastewater. Soumis pour publication.

ABSTRACT /

Water chemical quality assessment based on analyses of selected priority substances, as performed under the European Water Framework Directive (WFD), provides limited information on the diversity and complexity of environmental contaminations. Effect-based methods (EBM), such as bioassays, allow integrative assessment of all bioactive substances within a given environmental sample and are thus complementary to target chemical analyses. Ineris has contributed to the development of several *in vitro* and *in vivo* bioassays allowing sensitive and quantitative detection of endocrine disrupting chemicals in environmental matrices and applied them in both national and European prospective monitoring programs. In the framework of the AQUAREF program, we contributed to the European "Estrogen monitoring project" that showed operability of *in vitro* estrogenicity bioassays to detect estrogen steroids in surface and waste waters, to provide comparable information as cutting-edge chemical analysis methods, and to provide risk information on the basis of *in vitro* trigger values. The data obtained in such prospective monitoring programs are made available to regulatory bodies in the view of the integration of EBMs in water monitoring strategies for the next WFD cycles.

LES PROGESTATIFS, LES POISSONS ET LES MILIEUX AQUATIQUES : APPORTS DU PROJET ANR « PROOFS »

Contributeurs

François BRION,
Clémentine GAROCHE,
Nathalie HINFRAY,
Sélim AÏT-AÏSSA

Durant ces vingt dernières années, la question des effets des perturbateurs endocriniens (PE) sur des fonctions physiologiques clés telles que la reproduction a fait l'objet de nombreux travaux en raison des risques encourus pour les organismes et les milieux aquatiques. À cet égard, de nombreux travaux ont porté sur les risques associés aux composés œstrogéniques et, en particulier, les œstrogènes utilisés dans les pilules contraceptives [1; 2]. Pourtant, la présence d'autres pharmaceutiques stéroïdiens dans les milieux aquatiques est aujourd'hui avérée sans que l'on puisse en appréhender les conséquences. Parmi ces stéroïdes, les progestatifs de synthèse représentent un ensemble de substances largement utilisées en médecine humaine et vétérinaire. Certains progestatifs ont pu être quantifiés dans des effluents de stations d'épuration et des eaux de surface, à des concentrations faibles (ng/L-µg/L) mais capables d'affecter la reproduction des poissons exposés en laboratoire. Cependant, il existe un manque d'information sur les mécanismes, les effets et l'exposition des organismes aux progestatifs qu'il est nécessaire de combler dans l'optique d'évaluer les dangers et les risques que ces substances soulèvent pour les espèces aquatiques et l'environnement.

OBJECTIFS ET MÉTHODE

C'est dans ce contexte qu'un programme interdisciplinaire coordonné par l'Ineris impliquant différentes équipes de recherches nationales a été mené. Le projet ANR « PROOFS » (Occurrence and effects of environmental ligands of the progesterone

receptor on fish reproduction and neuro-development) visait à acquérir des informations nouvelles sur les modes d'actions et les effets potentiels de progestatifs dans l'environnement sur le neuro-développement et la reproduction des poissons. Il visait également à renseigner des activités progestatives d'échantillons environnementaux et à identifier les composés responsables de ces activités biologiques. Pour ce faire, la stratégie utilisée a reposé sur un panel de bio-essais de type gène-rapporteur *in vitro* et *in vivo* permettant d'évaluer la capacité des substances à interagir avec des voies de signalisation médiées par les récepteurs nucléaires stéroïdiens et à déréguler l'expression de gènes cibles dans différents tissus de l'embryon de poisson zèbre (figure 1).

Cette stratégie a été appliquée à un ensemble de 26 progestatifs et a permis d'acquérir des informations nouvelles sur l'interaction de ces molécules avec le récepteur de la progestérone de poisson zèbre en démontrant notamment que la majorité de ces composés se comportent comme des antagonistes du récepteur PR de poisson zèbre contrairement au récepteur humain. En outre, l'Ineris a démontré la multiplicité d'actions des progestatifs qui sont capables d'interférer avec différents récepteurs nucléaires tels que les récepteurs des androgènes, des œstrogènes et des glucocorticoïdes (figure 2). À l'échelle de l'organisme, ces mécanismes d'actions moléculaires se traduisent par des dérégulations précoces de l'expression tissu-spécifique de gènes impliqués dans la biosynthèse des neuro-stéroïdes (induction du gène de l'aromatase cérébrale) et des corticostéroïdes (inhibition du

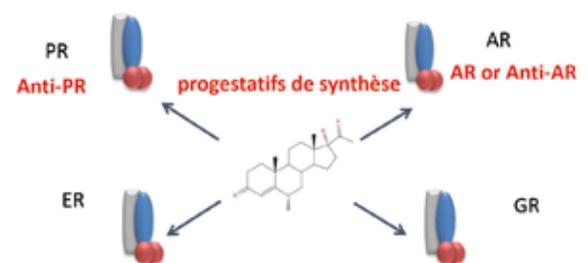
Figure 1 /

Stratégie développée pour renseigner des mécanismes et des effets PE d'un ensemble de progestatifs pharmaceutiques. Ces outils ont été combinés à de l'analyse chimique pour quantifier des activités progestagéniques dans les échantillons et identifier des substances chimiques.



Figure 2 /

Les progestatifs de synthèse se caractérisent par des profils toxicologiques complexes en raison de leurs capacités à interagir en tant qu'agoniste ou antagoniste de différents récepteurs nucléaires stéroïdiens chez le poisson zèbre.



gène de la 11 β -hydroxylase dans les cellules interrénales) (figure 3) [3; 4]. Une investigation plus poussée a permis de mettre en évidence que ces altérations s'accompagnent de modifications de la survie et/ou la prolifération neuronale ainsi que de la capacité des embryons à synthétiser du cortisol et à répondre à des stress. L'approche permet d'apporter des informations originales sur les dangers de ces molécules sur le système endocrinien d'un vertébré modèle. L'originalité de ce projet réside aussi dans l'utilisation intégrée d'outils *in vitro* et d'analyses chimiques au sein d'une démarche EDA (Effect Directed Analysis). Elle a permis de mettre en évidence, pour la première fois, des activités biologiques progestagéniques au sein de matrices environnementales (eaux usées, eaux de surface) en révélant des activités spécifiques des poissons et d'identifier des substances pharmaceutiques potentiellement impliquées dans ces réponses biologiques dont un métabolite dérivé d'un progestatif de synthèse.

CONCLUSION

Ce travail a permis l'acquisition d'un ensemble de données et de connaissances originales sur les dangers des progestatifs de synthèse sur le système endocrinien des poissons ainsi que sur l'occurrence environnementale d'activités biologiques associées à des ligands du récepteur de la progestérone. Ce projet souligne l'intérêt des stratégies combinant modèles *in vitro* et *in vivo* spécifiques du poisson que ce soit pour caractériser le potentiel perturbateur endocrinien des substances seules ou les matrices environnementales. À la lumière de ces travaux, il semble nécessaire de poursuivre des actions de recherche sur ces polluants aquatiques émergents afin d'en évaluer les risques pour les milieux aquatiques et adopter des actions de gestion adéquates.

Références

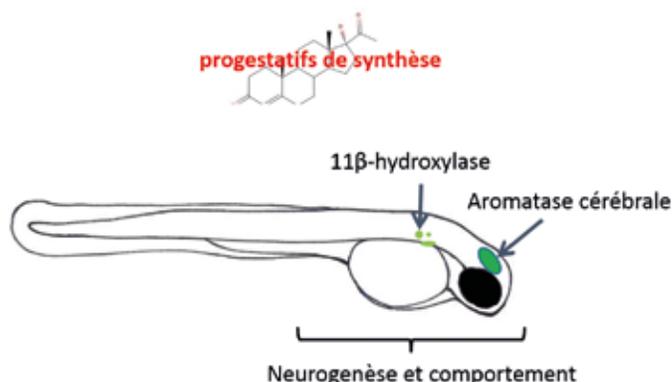
- [1] Brion, F.; Tyler, C. R.; Palazzi, X.; Laillet, B.; Porcher, J. M.; Garric, J. and Flammarion, P. (2004). Impacts of 17 β estradiol, including environmentally relevant concentrations, on reproduction after exposure during embryo-larval-juvenile- and adult life stages in zebrafish (*Danio rerio*). *Aquat Toxicol*, 68: 193-217.
- [2] Vosges, M.; Le Page, Y.; Chung, B.-C.; Combarous, Y.; Porcher, J.-M.; Kah, O. and Brion, F. (2010). 17 α -ethinylestradiol disrupts the ontogeny of the forebrain GnRH system and the expression of brain aromatase during early development of zebrafish. *Aquat Toxicol* 99(4): 479-491.
- [3] Cano-Nicolau, J.; Garoche, C.; Hinfray, N.; Pellegrini, E.; Boujrad, N.; Pakdel, F.; Kah, O.; Brion, F. (2016) Several synthetic progestins disrupt the glial cell specific-brain aromatase expression in developing zebra fish. *Toxicol Appl Pharmacol*. 15;305:12-21.
- [4] Hinfray, N.; Tebby, C.; Garoche, C.; Piccini, B.; Bourguine, G.; Ait-Aïssa, S.; Kah, O.; Pakdel, F.; Brion, F. (2016). Additive effects of levonorgestrel and ethinylestradiol on brain aromatase (cyp19a1b) in zebrafish specific *in vitro* and *in vivo* bioassays. *Toxicol Appl Pharmacol*. 15;307:108-14.

ABSTRACT /

During the past twenty years, numerous studies have examined the effects of estrogenic compounds, notably 17 α -ethinylestradiol a potent synthetic steroidal estrogen used as pharmaceuticals in contraceptive pills, because these substances were among the first identified as endocrine disrupting compounds responsible for the feminization of wild populations of fish observed worldwide. There is now evidence of the occurrence of other natural and synthetic steroids in aquatic environment. Among steroidal pharmaceuticals, the risks encountered by synthetic progestins on aquatic species have been recently pointed out but data on their occurrence and effects on fish endocrinology and physiology are missing to properly assess their hazard and risk to aquatic species. The national project ANR "PROOFS" aimed at investigating the effect of progestins on key molecular and cellular targets of the endocrine system using zebrafish *in vitro* and *in vivo* reporter gene mechanism-based assays. It also aimed at providing data on the occurrence of progestagenic activity of environmental samples and to identify substances responsible for these activities through an effect-directed analysis (EDA) approach. Among the 26 pharmaceutical progestins investigated, our data revealed that they can act on several steroidal nuclear receptors. By using novel transgenic zebrafish models, we demonstrated for the first time their estrogenic activity in the developing brain and their capacity to disrupt corticosteroidogenesis in interrenal cells. Finally, we reported strong progestagenic activity in waste waters and identified several pharmaceuticals as potential candidate responsible for these activities. Overall, the ANR project "PROOFS" brings novel and relevant data on occurrence and endocrine potency of progestins stressing the need to further study these emerging contaminants.

Figure 3 /

Les progestatifs de synthèse sont capables d'altérer l'expression de différents gènes cibles dans le cerveau (aromatase cérébrale) et les cellules interrénales (11 β -hydroxylase) et altérer des processus clés du développement (neurogenèse) et le comportement.



EFFET DES RADIOFRÉQUENCES SUR DES MODÈLES DE VULNÉRABILITÉ CÉRÉBRALE : DÉVELOPPEMENT ET NEURO-INFLAMMATION

Contributeur
Anne-Sophie
VILLÉGIÉ

Les applications utilisant les champs électromagnétiques (CEM) se sont considérablement développées depuis plusieurs années. Quotidiennement, ces applications peuvent notamment fonctionner dans l'environnement rapproché des femmes enceintes ou être intensivement utilisées au niveau de la tête dès l'adolescence. Les organismes immatures sont susceptibles d'être fragilisés par des expositions combinées (à des agents infectieux par exemple), pertinentes d'un point de vue environnemental.

Dans ce contexte, l'Ineris a réalisé des expériences visant à étudier si des CEM appliqués en prénatal ou à l'adolescence modifieraient à long terme l'homéostasie des cellules gliales et les capacités sensori-motrices, émotionnelles, et de recherche de nouveauté. De plus, l'hypothèse selon laquelle un état inflammatoire pourrait rendre ces organismes plus vulnérables en réponse aux CEM a été testée.

MATÉRIELS ET MÉTHODES

Des rats en contention ont été exposés aux CEM (puissance d'émission 0, 1 et 4 W, 45 min/jours, 20 jours). Les antennes boucles ont été positionnées soit contre l'abdomen entre les jours gestationnels 2 et 20 (débit d'absorption spécifique (DAS) moyen : 0, 0,7 et 2,6 W/kg) (Expérience 1), soit sur la tête à l'adolescence (DAS : 0, 1,5 et 6 W/kg) (Expériences 2 et 3).

- DAS cérébral maximum dans ces études = 6 W/kg
- Durée : 45 min, répétées (1 exposition/jour, durant 1 mois)
- Rapport théorique exposition homme/rat = 4
- Exposition humaine correspondante = 24 W/kg
- Limite de la commission internationale sur la radioprotection non ionisante (ICNIRP) = 2 W/kg,
- Utilisation d'un téléphone = 0,5 W/kg

=> Donc *6 W/kg chez le rat* correspond chez l'Homme à 12 fois les limites de l'ICNIRP et *48 fois le niveau induit par l'utilisation du téléphone portable*.

Les effets d'une co-exposition CEM / agents bactériens ont été étudiés avec les lipopolysaccharides (LPS) des fragments bactériens connus pour déclencher une réponse inflammatoire. Afin d'induire une fragilisation, les LPS ont été injectés soit aux jours gestationnels 15, 17 et 19 (Expériences 1 et 2) soit par micro-perfusion intra-cérébrale dès l'adolescence (Expérience 3).

Les mesures ont été effectuées chez l'adolescent et l'adulte pour l'inhibition du réflexe de sursaut (filtrage sensoriel), le conditionnement de peur (mémoire émotionnelle), le champ ouvert (exploration et adaptation à la nouveauté, anxiété), et le labyrinthe en croix surélevé (anxiété), et depuis le stade juvénile pour les niveaux cérébraux de glial fibrillary acidic protein (GFAP) et d'interleukines. L'augmentation de ces deux marqueurs indique une réponse inflammatoire.

RÉSULTATS

D'après les résultats, des expositions gestationnelles ont affecté à long terme la fonction cérébrale :

- À l'adolescence, l'exploration de la nouveauté est diminuée (-19 %) avec le niveau élevé de CEM.
- Chez l'adulte :
 - > Le niveau élevé de CEM réduit la capacité de filtrage sensoriel uniquement dans le groupe avec neuro-inflammation (**figure 1**).
 - > L'activité exploratoire est augmentée avec le LPS (+48 %).

Des expositions commencées à l'adolescence affectent la fonction cérébrale adulte :

- La micro-perfusion de LPS augmente les niveaux de GFAP dans plusieurs régions du cerveau (le cortex, l'hippocampe, l'amygdale et le striatum).
- Lorsque le niveau de GFAP est augmenté dans l'amygdale antérieure, la mémoire émotionnelle est réduite de manière DAS-dépendante (**figure 2**).

Les résultats n'indiquent pas d'effet sur les réponses comportementales en lien avec l'anxiété et sur les niveaux cérébraux d'interleukines.

CONCLUSION

Pour la première fois, l’hypothèse d’une fragilité liée aux co-expositions CEM / inflammation a été testée en prénatal et chez l’adolescent. Les données obtenues soutiennent les hypothèses selon lesquelles des expositions aux CEM durant le développement du cerveau peuvent induire des désadaptations comportementales à long terme et un évènement inflammatoire combiné à ces expositions augmente la vulnérabilité des organismes aux CEM. Des effets DAS-dépendants ont été mis en évidence, renforçant l’hypothèse d’une causalité entre exposition et déficit. Cette étude, avec d’autres, apporte des résultats en faveur d’une attention particulière à accorder à la protection des organismes en développement pré et post-natal, susceptibles de recevoir des expositions environnementales combinées avec les CEM.

Références

Petitdant, N.; Lecomte, A.; Robidel, F.; Gamez, C.; Blazy, K.; Villégier, A.S. Cerebral radiofrequency exposures during adolescence: Impact on astrocytes and brain functions in healthy and pathologic rat models. *Bioelectromagnetics*. 2016 Jul;37(5):338-50.

Petitdant, N.; Lecomte, A.; Robidel, F.; Gamez, C.; Blazy, K.; Villégier, A.S. Alteration of adaptive behaviors in progeny after maternal mobile phone exposure. *Soumis au Schizophrenia Research Journal*.

ABSTRACT /

The widespread exposure of radiofrequency electromagnetic fields (RF-EMF) devices raises questions on their possible health consequences on the immature brain. Neuro-development is a period of sensitivity to environmental challenges such as inflammatory insults. Here, we assessed whether sensory-motor gating, emotionality, and novelty seeking were affected by RF-EMF exposures in fetus or adolescent rats, and tested whether maternal immune activation or adolescent neuro-inflammation would increase RF-EMF toxicity.

Rats were daily exposed to RF-EMF with loop antennas adjoining the abdomen of pregnant females (fetus body specific absorption rates (SAR): 0, 0.7 or 2.6 W/kg) or the head of adolescents (brain SAR: 0, 1.5 or 6 W/kg).

Our result indicated that novelty seeking at adolescence was reduced after gestational exposure at 2.6 W/kg. Maternal immune activation induced a SAR-dependent reduction of sensory-motor gating in adults and adolescent neuro-inflammation elicited a SAR-dependent reduction of emotionality.

These data support the fact that special attention is needed for protection of developing organisms from combined environmental exposures with RF-EMF.

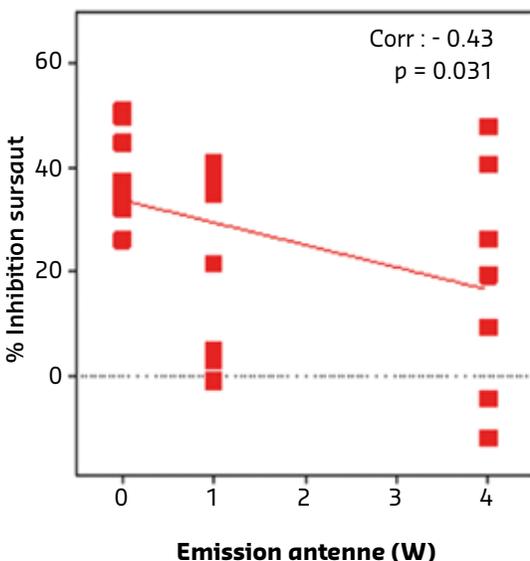


Figure 1 / La capacité de filtrage sensoriel mesurée par l’inhibition du reflex de sursaut est réduite chez l’adolescent à la suite d’expositions gestationnelles combinées aux CEM-RF et aux LPS. N = 9 / groupe.

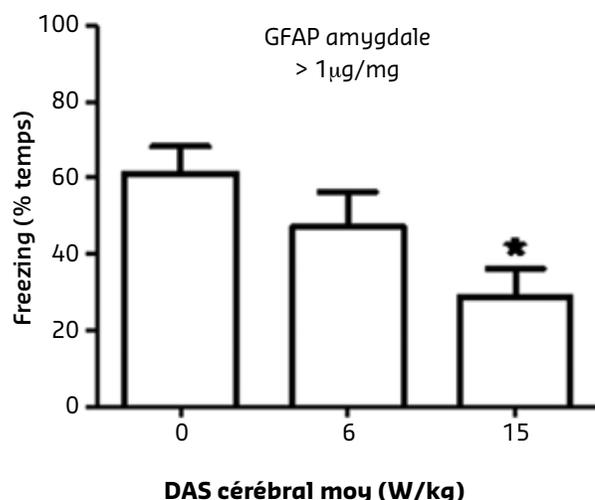


Figure 2 / La mémoire émotionnelle mesurée par Freezing (immobilisation de l’animal) est réduite chez l’adulte à la suite d’expositions commencées chez l’adolescent combinant les CEM-RF et une neuro-inflammation dans l’amygdale (niveaux augmentés de GFAP). N = 10 / groupe.

RELARGAGE DE DIOXYDE DE TITANE NANOPARTICULAIRE DANS LES MILIEUX ENVIRONNEMENTAUX À PARTIR DE NANOMATÉRIAUX

Contributeurs

Olivier
AGUERRE-
CHARIOL,
Christophe
BRESSOT

Le dioxyde de titane sous forme nanoparticulaire est une substance photocatalytique produite depuis quelques décennies. Elle trouve des usages industriels dans des domaines variés, tels que la protection anti-UV (crèmes solaires) ou les matériaux auto-nettoyants et antibactériens (pare-brises ou façades en verre, ciments, revêtements de façade, revêtements antibactériens). La forte croissance de ces usages pose la question des expositions éventuelles des milieux environnementaux (et par voie de conséquence des populations) aux relargages pouvant être provoqués par les sollicitations diverses subies par les matériaux contenant cette substance, au cours de leur cycle de vie.

TRAVAUX

L'Ineris a récemment effectué deux études ciblées sur cette problématique. La première est axée sur la phase d'usage et concerne le relargage d'aérosols induit par l'abrasion mécanique de carrelages auto-nettoyants recouverts d'un revêtement chargé en dioxyde de titane à l'état nanoparticulaire. La deuxième étude est axée sur la fin de vie et concerne le relargage par lixiviation de ciments chargés en dioxyde de titane à l'état nanoparticulaire.

Dans la première étude, des carrelages ont été soumis à une abrasion mécanique selon un protocole standardisé (figure 1). Les aérosols émis ont été caractérisés en termes de nature et de quantités émises. Dans ces conditions, l'émissivité a été multipliée par 175 entre le carrelage classique et son équivalent avec dépôts de nano-TiO₂ antibactérien en surface. Les objets recueillis par échantillonnage

par *mini particle sampler* (MPS) et caractérisés par microscopie électronique en transmission (MET) sont majoritairement des débris de carrelage sans dioxyde de titane avec une fraction minoritaire contenant des nano-objets agrégés ou agglomérés submicroniques ou microniques de nano-TiO₂ (figure 2). Les carrelages avant dépôt de nano-TiO₂ ont des surfaces irrégulières qui facilitent l'accroche lors du processus de fabrication ce qui explique la forte émissivité de ces surfaces par abrasion de cette rugosité. On constate donc que les carrelages revêtus, possédant une rugosité supérieure pour faciliter l'accrochage du revêtement, conduisent à une émissivité particulaire beaucoup plus importante, dont une fraction minoritaire (non quantifiable dans l'état de l'art actuel) est constituée de nano-objets agrégés ou agglomérés de nano-TiO₂.

Les objectifs principaux de la deuxième étude (effectuée dans le cadre d'une thèse co-encadrée avec le CEREGE) étaient d'identifier les mécanismes de relargage, et en particulier d'élucider le rôle du gradient de porosité qui se développe dans la matrice cimentaire durant la lixiviation. Pour cela, plusieurs ciments de porosité initiale croissante et contenant 2,8 % (en poids) de nano-TiO₂ ont été fabriqués et soumis à un protocole de lixiviation qui permet de séparer et quantifier (par ICP-AES) les fractions particulaires et dissoutes. L'examen de la littérature

Figure 1 /
Description du montage d'abrasion de carrelage avec l'abrasimètre Taber®.

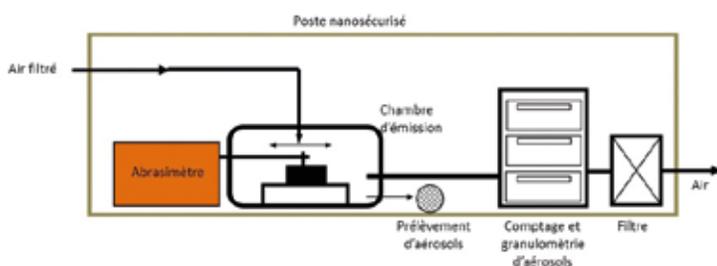
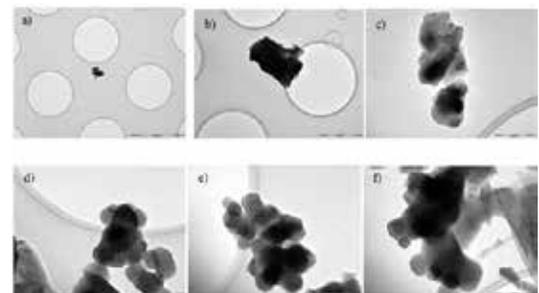


Figure 2 /

Particules ou NOAA recueillies sur grilles MET pendant le test d'abrasion. Dans a) le silicium domine la particule. Dans b) Zr (97 %) domine les particules. Dans c) composite contenant du nano-TiO₂ (avec 20 % de Si). Dans d), e) et f) NOAA de nano-TiO₂ (minoritaires).



permet d'estimer que ce protocole est grossièrement équivalent à quelques années de vieillissement en conditions réelles. Les matrices cimentaires ont été, en parallèle, caractérisées par des techniques physiques (X-ray μ -fluorescence (μ -XRF), micro and nano X-ray computed tomography (X-ray CT)) et microscopies électroniques à balayage et en transmission (MEB et MET).

RÉSULTATS

Ces techniques d'analyse physique ont permis d'évaluer l'évolution de l'épaisseur de la couche altérée de surface en fonction du temps de lixiviation. Elles ont montré une dissolution partielle de la matrice cimentaire (chute de la concentration en calcium).

Après 7 jours de lixiviation, on observe un relargage uniquement sous forme particulaire (figure 3). Il correspond à environ 0,02 % de la masse totale de nano-TiO₂ initialement présente et environ à 0,2 % de la masse présente dans la couche altérée. Il n'y a pas de dissolution. Le relargage est légèrement plus important dans les ciments les plus poreux. La dissolution partielle de la matrice cimentaire conduit au relargage de particules de dioxyde de titane isolées et non recouvertes de matrice cimentaire (contrairement à ce qui est observé dans d'autres matériaux, tels que les polymères par exemple).

L'épaisseur de la couche altérée augmente avec le temps de lixiviation, et ce d'autant plus vite que la porosité initiale du ciment est élevée (figure 4). La porosité augmente également dans cette couche altérée.

Les mécanismes identifiés sont, dans l'ordre chronologique :

- la dissolution partielle de la matrice cimentaire ;
- l'augmentation de porosité dans la couche altérée ;
- le transfert de particules de nano-TiO₂ dans la solution remplissant les pores ;
- la diffusion de ces particules vers la surface.

Cependant, les relargages observés sont notablement inférieurs à ceux qui seraient induits par les mécanismes ci-dessus, ce qui semble impliquer des mécanismes de rétention des nanoparticules au sein de la couche altérée, même si la dégradation de celle-ci est importante. Cette rétention pourrait être due à une morphologie spécifique du réseau poreux (faible connectivité, goulots d'étranglement). Une prochaine étape pourrait consister à utiliser des protocoles de vieillissement plus réalistes (pluie, UV, cycles de température...).

ABSTRACT /

The increasing use of nano-sized titanium dioxide in various building materials raises the question of the possible release of nanoparticles over the lifecycle of these materials.

Ineris has completed two studies on this topic: a first on the characterization of the release of aerosols under mechanical stress, the second on the release of particles in water by building materials during leaching experiments.

Self-cleaning tiles covered with a coating containing nano-sized titanium dioxide have been submitted to a standardized mechanical abrasion. Aerosols have been quantified in terms of nature and quantity. It appears that emissions from coated tiles are far more important than those produced by uncoated reference tiles. This is explained by the higher rugosity of coated tiles.

Samples of controlled porosity cement containing nano-sized titanium dioxide have been submitted to a static leaching test. The increase in porosity induced an increase in the thickness of the surface layer affected by partial dissolution of calcium. This leads to a greater release of nano-sized TiO₂ in this altered layer; however, only a small fraction reaches the surface and is actually released, because of blocking mechanisms in narrow pores or bottlenecks.

Figure 3 / Images MEB de particules lixiviées après 168 h (ciment 40 %). Compositions chimiques déterminées par microanalyse EDS.

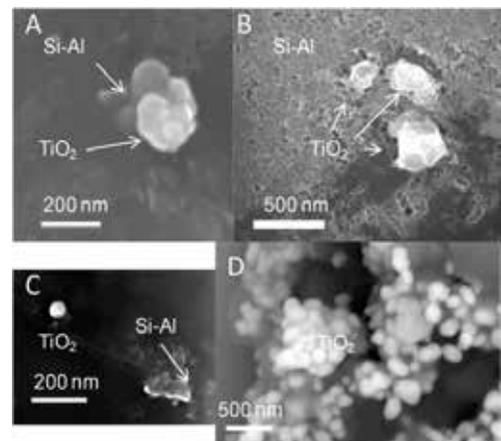
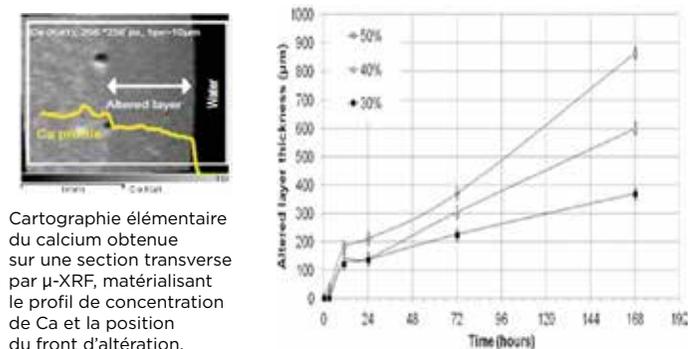


Figure 4 / Variations de l'épaisseur de la couche altérée en fonction du temps, pour les trois porosités de ciment.



Cartographie élémentaire du calcium obtenue sur une section transverse par μ -XRF, matérialisant le profil de concentration de Ca et la position du front d'altération.

CHIMERE : VERS LA MODÉLISATION DE LA QUALITÉ DE L'AIR À L'ÉCHELLE DU GLOBE

Contributeurs

Augustin
COLETTE,

Florian
COUVIDAT,

Bertrand
BESSAGNET

L'unité de modélisation atmosphérique et cartographie environnementale de l'Ineris développe et met en œuvre le modèle de chimie-transport CHIMERE pour ses missions d'appui aux politiques publiques, de recherche et ses activités d'expertise. La partie la plus visible de la modélisation de la qualité de l'air concerne la plateforme nationale de prévision de la qualité de l'air PREV'AIR¹ coordonnée par l'Institut en collaboration avec Météo-France, le CNRS et le LCSQA. PREV'AIR met à disposition des prévisions à courte échéance (de l'ordre de quelques jours), mais les modélisations CHIMERE servent aussi à évaluer l'efficacité des politiques de gestion de la qualité de l'air que ce soit en rétrospectif (pour des analyses de tendances) ou en projection (pour évaluer l'amélioration de qualité de l'air qui est attendue en termes de baisses d'émissions programmées, comme cela avait été fait pour le Plan national de réduction des polluants atmosphériques - PREPA).

CHIMERE est un modèle déterministe. À l'inverse des modèles statistiques, il n'est pas calibré sur des observations mais repose sur les équations de physique et de chimie de l'atmosphère qui régissent le transport et la transformation des polluants. Les données d'entrée qu'il requiert sont les flux d'émissions induits principalement par les activités humaines, et aussi les champs météorologiques qui influent sur l'accumulation des polluants.

DE NOUVELLES PROJECTIONS

En 2016, le modèle a bénéficié d'une évolution majeure avec le passage vers l'échelle du globe. Comme tous les modèles de qualité de l'air, CHIMERE a historiquement été mis en œuvre sur des domaines restreints : typiquement une ville, une région, un pays ou – au maximum – un continent. Les développements récents ont permis de lever ce verrou de telle sorte que le modèle peut à présent être déployé sur l'ensemble du globe. Pour atteindre cet objectif, un travail important a été conduit pour modifier les projections géographiques utilisées et éviter les singularités numériques que présentent les maillages réguliers en latitude/longitude aux pôles Nord et Sud, mais aussi pour mieux prendre en compte la spécificité de l'utilisation des sols et du cycle de végétation sur le globe, ou encore étendre l'extension verticale du domaine. Un travail majeur a aussi été nécessaire pour

déployer des inventaires d'émissions à l'échelle du globe. L'ensemble de ces évolutions a été publié dans l'article introduisant la version mise à disposition des utilisateurs en licence libre en 2017 [1].

UNE RÉOLUTION SANS PRÉCÉDENT

L'Ineris, en tant que co-développeur de ce modèle, a proposé de mettre en œuvre cette nouvelle version avant sa distribution publique dans une configuration tout à fait inédite. Le domaine de simulation recouvrait l'ensemble de l'hémisphère nord, et ce à une résolution sans précédent de l'ordre de 10 km. Il existe certes depuis plusieurs années des modèles de chimie de l'atmosphère globaux, qui deviennent de plus en plus raffinés spatialement avec l'augmentation des ressources de calcul. Leur résolution atteint aujourd'hui les 50 km dans les configurations les plus ambitieuses. Mais surtout il faut noter que ces modèles globaux ont été conçus pour étudier la chimie troposphérique et stratosphérique. Alors que seuls les modèles de qualité de l'air proposent aujourd'hui une représentation fine des processus de surface importants pour la pollution atmosphérique notamment dans les zones densément peuplées, comme la chimie complexe des aérosols.

Le déploiement de CHIMERE sur un domaine hémisphérique à une telle résolution spatiale a été possible grâce aux ressources de calcul mises à disposition par le Centre de calcul recherche et technologie (CCRT, dont l'Ineris est partenaire) dans le cadre du grand challenge de l'inauguration du calculateur Cobalt. Ce supercalculateur de marque Atos-Bull a été livré en 2016. Il possède près de 40 000 cœurs de calcul pour une puissance totale de 1,5 petaflop.

Des cartographies hémisphériques sont présentées (figure 1) pour divers polluants. Pour les particules fines (PM_{2,5}), le champ de concentration de mi-mars 2014 correspond à un des pires épisodes de pollution particulaire en Europe de ces dernières années, mais on constate que, même pour cette journée, les niveaux de pollution sont largement plus importants sur l'Asie. Le caractère transfrontalier de cette pollution apparaît bien sur ces cartes, mais les panaches intercontinentaux sont encore plus visibles sur la cartographie de l'ozone. De la

même manière, des panaches massifs de poussières désertiques ont été simulés, tels que ceux qui affectent régulièrement les Antilles.

Ces simulations n'auraient pas été possibles sans l'évolution du modèle CHIMERE dans sa version 2017 [1]. Elles feront l'objet de plus amples analyses dans des publications à venir. Elles ont également servi de support à une vidéo de présentation générale de la modélisation de la qualité de l'air mise à disposition sur la chaîne Youtube de l'Ineris².

¹ www.prevoir.org

² <http://bit.ly/2Aj0bAt>

Référence

[1] Mailler, S.; Menut, L.; Khvorostyanov, D.; Valari, M.; Couvidat, F.; Siour, G.; Turquety, S.; Briant, R.; Tuccella, P.; Bessagnet, B.; Colette, A.; Létinois, L.; Markakis, K.; and Meleux, F.: CHIMERE-2017: from urban to hemispheric chemistry-transport modeling, *Geosci. Model Dev.*, 10, 2397-2423, 10.5194/gmd-10-2397-2017, 2017.

ABSTRACT /

Ineris operates and develops the CHIMERE chemistry transport model which is now widely used throughout Europe and beyond for air quality forecasting and assessment. Ineris also relies on this model for operational air quality forecasting in France through the prevoir.org platform, but also in Europe for the Copernicus Atmospheric Monitoring Service. A new version of the model has been completed in 2017 that allows to reach out to global air quality modeling. Taking the opportunity of the 2016 computing challenge of the new high performance computer of the Centre de Calcul Recherche et Technologie, unprecedented air quality simulations were performed by Ineris over the northern hemisphere at an outstanding resolution of 10 km. The modeling results offer an excellent illustration of the global air quality issue, where fine knowledge of physics and chemistry is required over the main polluted areas that also affect the wider atmosphere throughout the globe.

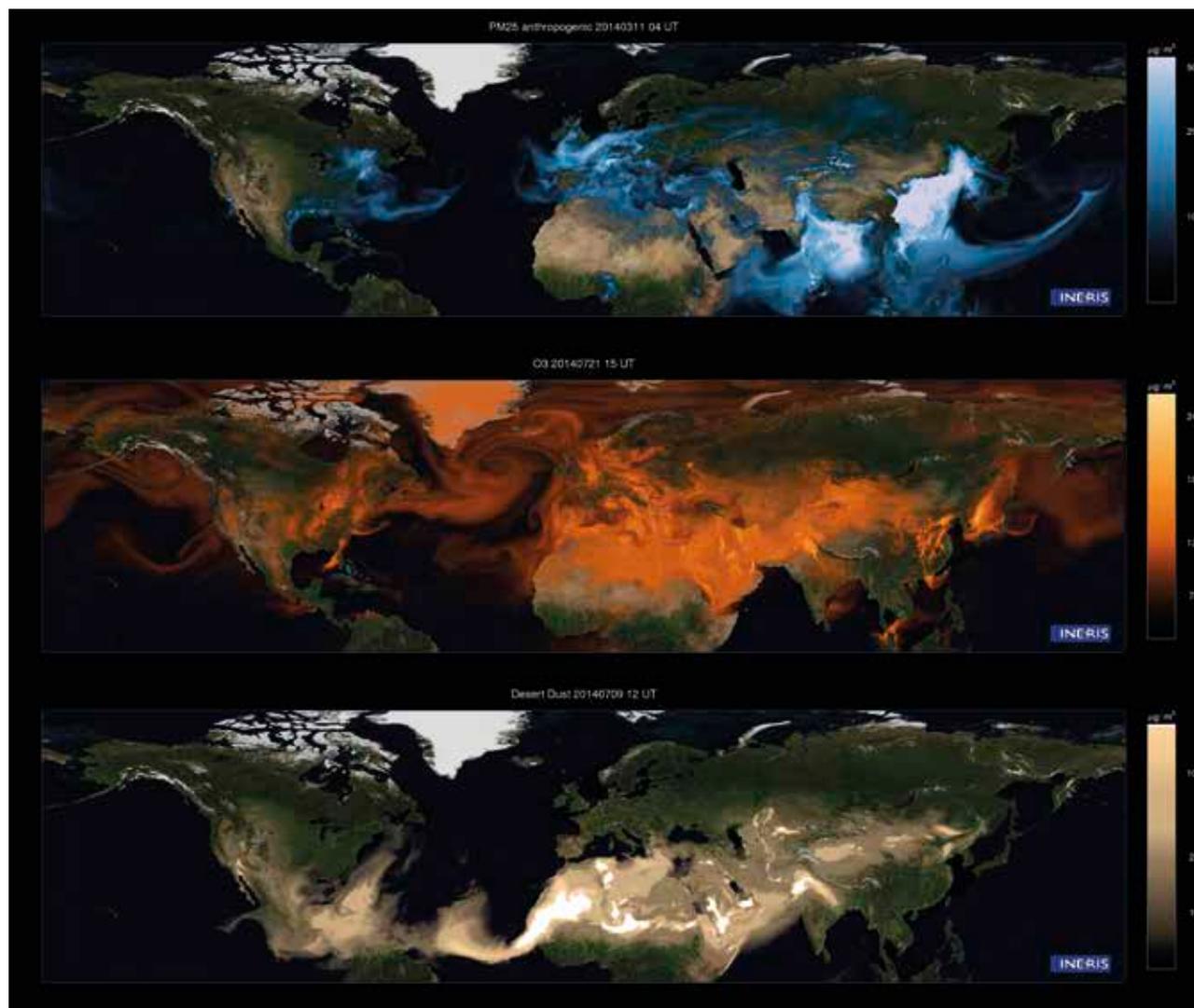


Figure 1 /

Cartographies de particules fines (PM_{2,5}), d'ozone (O₃) et de poussières désertiques simulées avec la version hémisphérique du modèle CHIMERE à une résolution spatiale sans précédent de 10 km.

RISQUES NATECH : VULNÉRABILITÉ ET RÉSILIENCE DES INSTALLATIONS INDUSTRIELLES SOUS L'EFFET D'UN TSUNAMI

Contributeurs

Gaëtan
PROD'HOMME,

Benjamin
LE ROUX

Un accident NaTech (contraction de « naturel » et « technologique ») est un accident technologique majeur engendré par un événement naturel et dont les conséquences sont susceptibles de porter atteinte à des tiers ou à l'environnement. Les accidents de type NaTech ne représentent qu'une faible part de l'ensemble des accidents industriels connus en Europe (5 %) et en France (7 %). Toutefois, les interactions entre aléas naturels et installations industrielles font aujourd'hui l'objet d'une attention soutenue compte tenu notamment des conséquences du changement climatique, qui a pour effet reconnu une fréquence accrue des phénomènes naturels extrêmes.

Un des exemples les plus marquants de la décennie en termes de risque NaTech est le séisme de mars 2011 au Japon qui a montré qu'un aléa naturel (séisme et tsunami) pouvait avoir un impact sur une installation industrielle et être à l'origine d'une série d'accidents technologiques notoires. Ainsi de nombreuses défaillances techniques ont été relatées sur ces installations suite à la catastrophe, ce qui a par exemple provoqué l'explosion de sphères GPL dans la baie de Chiba ou encore des incendies durant plusieurs jours dans la raffinerie de Sendai (figure 1).

Les objectifs qui guident la conception de la stratégie de maîtrise du risque NaTech peuvent porter sur la

protection des équipements industriels, sur leur maintien structurel ou fonctionnel en cas d'événement naturel, voire, dans certains cas, sur la nature du risque résiduel. L'évaluation de la capacité de résilience d'un système peut être évaluée en précisant deux de ses caractéristiques :

- la quantification des dommages induits sur le système;
- la capacité à mettre en œuvre des mesures d'adaptation ou de récupération.

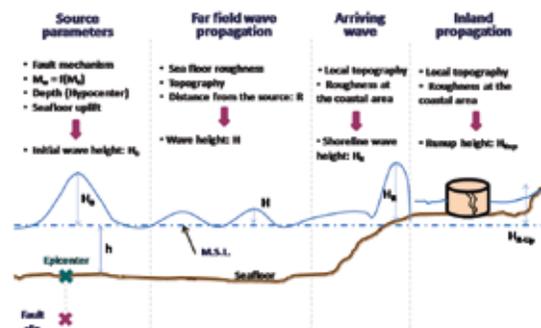
Dans le cadre du projet de recherche Internatech (*Interdisciplinary study on the mitigation of NaTech risks in a complex world: learning from the Japanese experience applying ERRA NaTech method, iNTeg-Risk project*), l'Ineris a collaboré dès octobre 2011 avec l'Advanced industrial science technology (AIST) japonais, le laboratoire Modélisation et simulation multi-échelle (MSME) de l'université de Marne-la-Vallée Paris-Est et la société Phimeca afin de développer une méthode globale d'évaluation de la résilience d'équipements industriels (réservoirs d'hydrocarbures, tuyauteries...) soumis à un séisme ou un tsunami [1; 2].

Dans l'objectif d'appliquer cette démarche pour les événements naturels de type tsunamis, le laboratoire MSME a développé des modèles de prédiction de hauteur de vagues. Ces modèles permettent d'établir des hauteurs de vagues attendues sur le littoral en cas de tsunami, en fonction de la distance de l'épicentre du séisme, de sa profondeur, du type de fond marin, de la topographie et de l'altitude des cibles (figure 2). Une évaluation de la vulnérabilité des équipements industriels, tels que des réservoirs d'hydrocarbures,

Figure 1 / Photographie post-accidentelle : renversement d'un réservoir par le tsunami (Japon, 2011).



Figure 2 / Formation du tsunami de l'épicentre vers les côtes [1].



soumis à la pression des vagues a ensuite été menée. Pour ce faire, l’Ineris a développé des modèles de prédiction du comportement mécanique de ces équipements tenant compte de leurs principaux modes de défaillance: glissement (D1), renversement (D2), soulèvement (D3), instabilité de type voilement mécanique (D4) ou encore impact par des objets flottants (D5). L’ensemble de ces modes pouvant conduire à l’arrachement de tuyauteries connectées (figure 3).

Les modèles développés permettent de tenir compte de différents paramètres tels que la hauteur de vague, le taux de remplissage du réservoir et intégrant une capacité de déformation plastique (figure 4).

En appliquant à ces modèles une approche paramétrique des hauteurs de vagues, il est possible d’obtenir des courbes de fragilité indiquant la probabilité de défaillance d’un équipement en fonction de la nature de sollicitation envisageable (figure 5).

Ces courbes de fragilité peuvent alors être implémentées au sein d’une méthodologie d’analyse de risques contribuant à l’identification des séquences accidentelles à l’origine du risque et à la réflexion sur les mesures techniques et/ou organisationnelles à mettre en place afin de minimiser les dommages induits en cas d’évènements naturels de type tsunami.

Dans la continuité du projet Internatech, il pourrait être envisagé de développer une démarche similaire pour d’autres types de submersions marines, et plus largement d’autres aléas inondations tels que les ruptures de barrages, les débordements de cours d’eau. Des travaux ont par ailleurs d’ores et déjà été menés pour des équipements industriels soumis à un aléa sismique.

L’ensemble de ces travaux a alimenté les réflexions de l’Ineris sur les NaTech menées dans le cadre d’instances internationales telle que l’OCDE ou encore dans le cadre de l’application de la circulaire du 10 mai 2010 avec le *Référentiel méthodologique relatif à la maîtrise du risque inondation dans les installations classées* [3].

Références

[1] Mebarki, Ahmed ; Jerez, Sandra ; Prod’homme, Gaëtan ; Reimeringer, Mathieu. Natural hazards, vulnerability and structural resilience: tsunamis, *Geomatics, natural hazards and risk*, 2016 VOL. 7, NO. S1, 5_17
 [2] Mebarki, Ahmed ; Willot, Adrien ; Jerez, Sandra ; Reimeringer, Mathieu ; Prod’homme, Gaëtan. Vulnerability and resilience under effects of tsunamis : case of industrial plants *Procedia Engineering*, 2014, 84 : p. 116-121
 [3] Ineris, Référentiel méthodologique relatif à la maîtrise du risque inondation dans les installations classées, ref. Ineris- DRA-14-141515-03596A (2014)
 Duval, Christophe ; Willot, Adrien ; Hyvernage, Olivier. (Ineris) Maîtrise des accidents NaTech dans les installations industrielles, *Techniques de l’Ingénieur* (2017)

ABSTRACT /

Natural hazards have triggered major industrial accidents in the past, even if these NaTech accidents – a contraction of the words “natural” and “technological” – were not so numerous. Earthquake and Tsunami event in Japan in March 2011 is one of the most striking examples during the last decade. Several industrial plants have suffered irreversible damages and have generated important socioeconomic consequences. Internatech Project conducted by Ineris in collaboration with AIST, MSME Laboratory Marne-la-Vallée University and Phimeca company aimed to develop a resilience evaluation method of industrial structure subjected to tsunami and earthquake. Simplified models have been developed to describe the wave height profile in case of tsunamis. The mechanical vulnerability of cylindrical metal tanks has been investigated, taking into account multimodal failures (overturning, rupture of anchorages and sliding, buoyancy or buckling). Fragility curves have then been developed and could be implemented in resilience analyses. A similar framework was also developed for earthquake events and could be adapted in the future to other kinds of flooding events. The results contributed to the work carried out by Ineris in international group and the application of French regulations.

Figure 3 / A gauche, principaux modes de défaillance d’un réservoir atmosphérique à une vague [1], à droite, rupture d’une tuyauterie connectée à un réservoir.

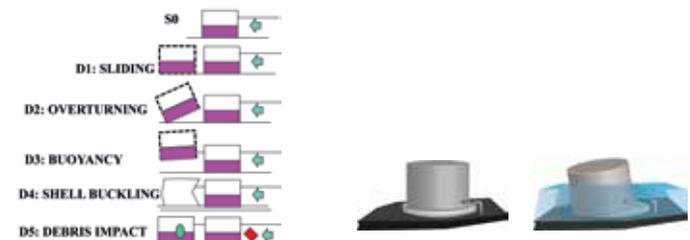


Figure 4 / Modélisation de l’effet du tsunami sur les réservoirs de stockage d’hydrocarbures (à gauche, un modèle simple de flexion à un degré de liberté [1]) (à droite, le calcul des efforts induits par un séisme dans la coque d’un réservoir d’hydrocarbures par simulation numérique).

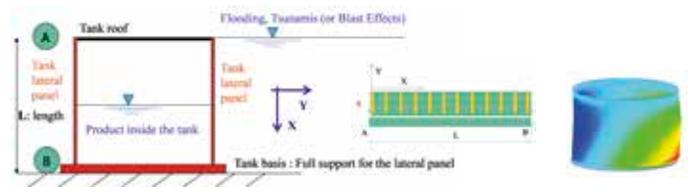
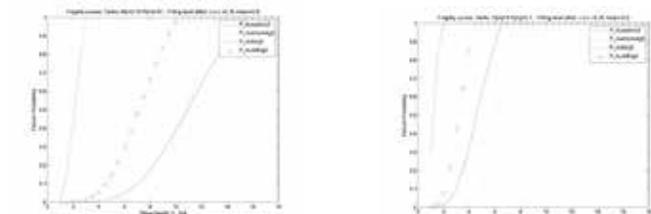


Figure 5 / Courbes de fragilité de réservoirs atmosphériques d’hydrocarbures soumis à un tsunami pour différents niveaux de dommage (a) : grand réservoir (hauteur=19m, rayon=10m, (b) : petit réservoir (hauteur=8m, rayon=5,57 m) [1].



DÉTERMINATION EXPÉRIMENTALE DU COURANT MINIMAL D'INFLAMMATION DE MÉLANGES MÉTHANE/HYDROGÈNE CONTENANT JUSQUE 20% D'HYDROGÈNE

Contributeurs

Jérôme
LESAGE,
Bruno
DEBRAY,
Agnès
JANES

À la suite de l'adoption du paquet Énergie-Climat 2030 en octobre 2014, l'Union européenne s'est fixé des objectifs ambitieux de diminution de ses émissions de gaz à effet de serre :

- 40 % d'ici à 2030,
- 80 % en 2050,
- zéro émission nette en 2100.

L'atteinte de ces objectifs implique la mise en œuvre d'une véritable transition énergétique. Le procédé « Power-to-Gas » pourrait contribuer à cette transition. Il consiste à transformer l'énergie électrique en gaz (hydrogène ou méthane), afin de la stocker dans un objectif de recours croissant à des énergies renouvelables. Ainsi, dans les périodes de production excédentaire, l'électricité renouvelable est stockée sous forme de gaz, et peut donc être utilisée à tout moment.

Le gaz ainsi généré peut être consommé de plusieurs façons. L'une d'entre elles consiste à injecter l'hydrogène obtenu directement dans le réseau de gaz naturel, jusqu'à une concentration de 20 %. L'hydrogène est un gaz bien plus facilement inflammable que le gaz naturel. L'ajout d'hydrogène dans le réseau de gaz naturel traditionnel soulève donc des questions relatives à la sécurité. En particulier, les équipements électriques déjà installés sur le réseau de gaz naturel en zone ATEX sont-ils compatibles avec la mise en œuvre de ce mélange ?

MÉTHODE ET RÉSULTATS

Afin de répondre à cette question, l'Ineris a déterminé expérimentalement l'inflammabilité de mélanges méthane/hydrogène, contenant de 2 % à 20 % d'hydrogène par la mesure du courant minimal d'inflammation (CMI). Il s'agit de réaliser des étincelles d'origine électrique dans le mélange de gaz de composition connue à tester que l'on fait circuler dans un « éclateur » (figure 1).

Si le courant circulant dans l'étincelle est suffisamment élevé, le mélange de gaz qui circule à l'intérieur de la cloche s'enflamme. Dans le cas contraire, il n'y a pas d'inflammation. Le CMI est le courant minimal à faire circuler pour que l'étincelle générée provoque l'inflammation du mélange gazeux. Ce paramètre caractérise la propension d'un gaz ou d'une vapeur à s'enflammer par étincelle.

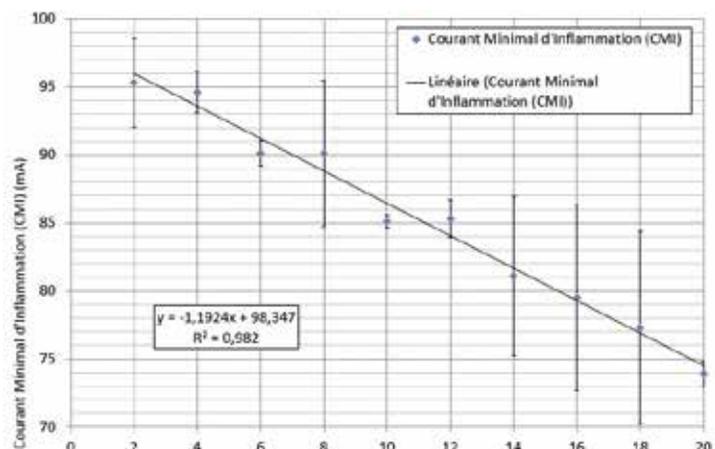
La figure 2 présente, pour chaque mélange testé, le CMI déterminé et son incertitude de mesure associée. Le CMI décroît linéairement à mesure que la concentration d'hydrogène contenu dans le mélange augmente. Toutefois, l'incertitude de mesure est élevée.

La norme IEC 60079-20-1 permet de classer les gaz en trois groupes en fonction de leur sensibilité à l'inflammation, sur la base du CMI ou de l'IEMS (interstice expérimental maximal de sécurité). Les textes de transposition de la directive européenne 1999/92/CE imposent aux employeurs l'utilisation

Figure 1 /
Illustration du banc d'essai : l'éclateur.



Figure 2 /
CMI des mélanges méthane/hydrogène.



de matériel électrique adapté à la sensibilité à l'inflammation des gaz ou mélanges gazeux mis en œuvre dans leur procédé.

Les gaz classés dans le groupe IIA nécessitent plus d'énergie pour s'enflammer par étincelle que les gaz du groupe IIB, eux-mêmes nécessitant plus d'énergie que ceux du groupe IIC (figure 3).

Le gaz naturel est classé dans le groupe IIA. Aussi, les équipements électriques déjà utilisés sur le réseau de gaz naturel doivent avoir été certifiés comme étant d'un niveau de sécurité adapté à leur utilisation avec les gaz classés dans le groupe IIA. Les résultats obtenus dans le cadre de cette étude devraient permettre de déterminer si l'ajout d'hydrogène jusqu'à 20 % dans du méthane nécessite d'adapter ce matériel électrique. Selon l'IEC 60079-20-1, un gaz est classé dans le groupe IIA si le rapport de son CMI au CMI du méthane est supérieur à 0,8. Toutefois, entre 0,8 et 0,9, ce classement doit être confirmé par la détermination de l'IEMS.

En utilisant les valeurs de CMI déterminées sur les mélanges méthane/hydrogène testés et les critères de classement de la norme, il apparaît que les mélanges contenant 16 %, 18 % et 20 % d'hydrogène seraient classés dans le groupe IIB (figure 4).

Cependant, d'autres données publiées récemment dans la littérature scientifique ne conduisent pas exactement à la même conclusion. En effet, des résultats de mesure d'IEMS confirment le classement des mélanges méthane/hydrogène contenant jusqu'à 20 % d'hydrogène dans le groupe de gaz IIA.

Cette apparente contradiction est pour partie liée au fait que lors de la rédaction de la norme IEC 60079-20-1, les critères de classement ont été définis pour des substances pures. Leur application pour des mélanges de gaz apparaît plus complexe et doit donc être réexaminée.

PERSPECTIVES

Ces éléments ont été discutés au sous-comité 31M de la Commission électrotechnique internationale (CEI), en charge de la maintenance de la norme IEC 60079-20-1. Le principe d'un classement dans le groupe IIA des mélanges méthane/hydrogène jusqu'à 25 % d'hydrogène n'est, en l'état, pas remis en cause. Cependant, ces discussions devraient conduire à une campagne d'essais inter-laboratoires portant sur la mesure d'IEMS des mélanges de gaz, qui permettrait de valider la modification des critères de classement.

Référence

Process Safety and Environmental Protection
 Volume 107, April 2017, Pages 299-308
 Experimental determination of minimum ignition current (MIC) ratio of hydrogen/methane (H2NG) blends up to 20 vol.% of hydrogen
 Agnès Janès, Jérôme Lesage, Benno Weinberger, Douglas Carson
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957582017300629>

ABSTRACT /

The European Union aims to reduce its carbon emission by up to 80% until 2050. To reach this objective, a possible way consists in injecting hydrogen - produced from renewable energy - into the natural gas network, at a concentration of up to 20%.

But hydrogen is more easily ignitable than natural gas. Therefore, use of such a hydrogen/natural gas blend in the existing natural gas network shall be carefully assessed. Especially, are the equipment already used in the natural gas network compatible with this type of blends?

The applicable standard for classification of ignition sensitivity prescribes a classification of such hydrogen/methane blends in the same group as the natural gas for a concentration of hydrogen up to 25%.

To investigate this issue, Ineris experimentally determined the Minimum Ignition Current (MIC) of hydrogen/methane blends, containing from 2% to 20% of hydrogen. The MIC is one of the two parameters used to classify a gas in its ignition sensibility group.

This work demonstrates the need of a modification of the classification criteria defined in the applicable standard.

Figure 3 /
Groupes de gaz.

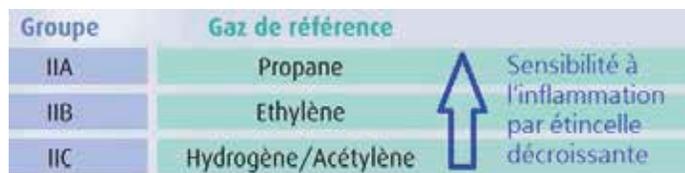
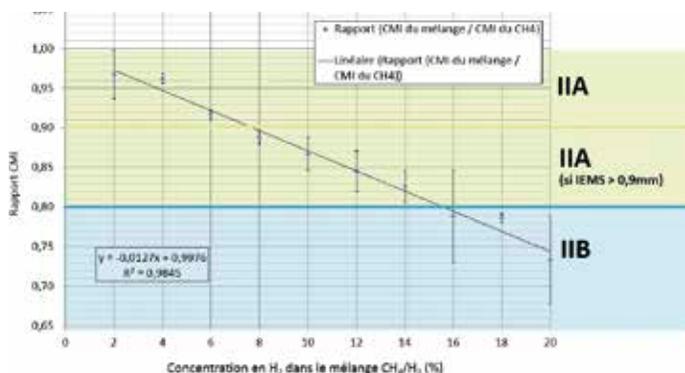


Figure 4 /
Rapport CMI des mélanges méthane/hydrogène.



FUITES MASSIVES SUR LES CANALISATIONS DE TRANSPORT DE CO₂ EN PHASE DENSE

Contributeur
Christophe
PROUST

Bien que le rôle des émissions de CO₂ dans le réchauffement de la planète fasse une très large unanimité, l'industrie mondiale dépend encore à 70% des hydrocarbures. Au-delà des transitions technologiques qui s'amorcent pour réduire cette proportion (nouvelles sources d'énergie, bio-économie etc.) mais qui vont prendre du temps pour se répandre, il semble indispensable de recourir au captage et au stockage du CO₂ par des procédés adaptés pour obtenir un effet significatif et rapide sur la réduction des émissions.

Dans ce contexte, l'Ineris a participé à plusieurs projets de R&D internationaux (CO₂ PIPEHAZ [1], CO₂-Quest [2]...) centrés sur la question de la sécurité des infrastructures nécessaires dont, en particulier, le transport par canalisations depuis le captage jusqu'aux sites de stockage. Leur principal objectif était de développer des moyens de simulation des fuites massives suffisamment précis pour analyser la physique et notamment les changements d'état du CO₂ et prédire les dimensions des « zones d'effet » dans des conditions de fuite réalistes c'est-à-dire la taille des nuages toxiques autour du point de fuite. Le rôle de l'Ineris a consisté à étudier l'état du fluide pendant la dépressurisation d'une canalisation et à développer des moyens d'essais permettant de caractériser le nuage formé. Cette seconde mission a permis le développement d'une installation de grande taille par l'un des partenaires des projets.

LA DÉPRESSURISATION D'UNE CANALISATION

Le CO₂, plus ou moins pur, a vocation à être transporté sous une pression de l'ordre de 10 MPa de façon à ce qu'il se trouve systématiquement en phase dense, liquide si la température est plus faible que 35 °C, supercritique au-delà. Un débat porte sur les modèles à retenir pour décrire l'état du fluide et définir, en particulier, si l'hypothèse d'un écoulement homogène et à l'équilibre thermodynamique local peut être faite

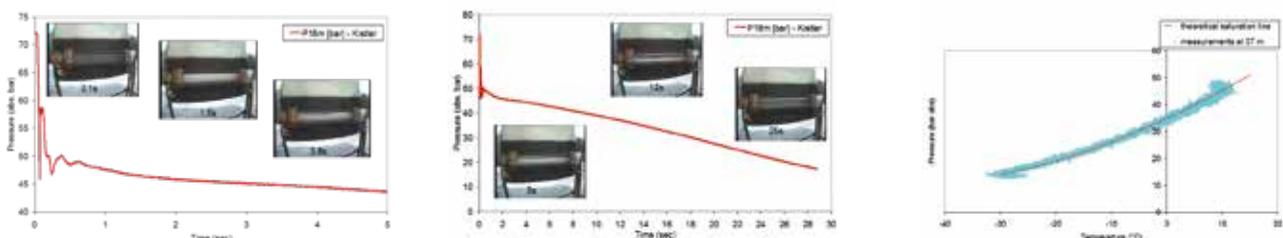
(modèles « HEM » pour *Homogeneous Equilibrium Model*). Pour examiner ce point, l'Ineris [3] a mis au point une installation de taille modeste par rapport à la réalité mais suffisamment grande néanmoins pour reproduire les principaux phénomènes physiques. Il s'agit d'un tube horizontal long de 40 m, de diamètre interne 40 mm, posé sur pesons de manière à mesurer le débit réel. Un tronçon transparent permet de visualiser le fluide. Les capteurs de pression, de température et de flux thermique sont disposés tout le long. La température du tube peut être réglée soit en le refroidissant par remplissage/purges successives (le CO₂ est un réfrigérant) soit en le chauffant par l'extérieur par traçage électrique.

Un exemple de résultat est présenté sur la **figure 1** où l'on constate systématiquement l'apparition de deux phases bien distinctes, très peu de temps après le début de la décharge. L'écoulement n'est pas homogène. En revanche, les conditions d'équilibre thermodynamiques sont assez bien respectées (les mesures pression-température réalisées le long du tube sont situées sur la courbe de saturation représentative de l'équilibre thermodynamique du CO₂). Il a par ailleurs été constaté que la nature de la dispersion dans l'atmosphère est nettement affectée par cette situation (section suivante). Ainsi les modèles HEM classiques doivent être employés avec de grandes précautions.

INSTRUMENTATION DES NUAGES

Être capable de déterminer les caractéristiques comme les champs de densité et de concentration dans le nuage est un défi. Constatant que, pour des fuites massives, le mélange CO₂-air est quasi-adiabatique, l'Ineris a proposé une instrumentation par thermocouples qui présente pour avantages d'être robuste, de temps de réponses faible (par rapport à des mesures directes de concentration) et d'offrir

Figure 1 / État du fluide dans la canalisation pendant la dépressurisation.



la possibilité de déduire en même temps la densité du mélange et la concentration locale de CO₂. Un travail significatif de validation a été conduit [4] qui a permis par ailleurs de tester des mesures de concentration. Pour cela, des fuites établies ont été produites en utilisant une sphère de 2 m³ alimentant la canalisation. L'installation est utilisée de manière à ce que la fuite soit uniquement en phase liquide.

Il est rapidement apparu que la question de la quantité de mouvement du fluide immédiatement en aval du point de fuite et de la proportion de neige carbonique devait être traitée pour imaginer un modèle de dispersion fiable et extrapolable. À cet effet, l'Ineris a conçu et testé un dispositif associant mesures de température et pression dynamique dans le champ proche (quelques dizaines de centimètres de l'orifice). En croisant ces mesures, il est possible d'obtenir la vitesse, la densité moyenne et le débit instantané de la fuite. Ce dispositif a ainsi permis de constater que les caractéristiques de l'écoulement changent drastiquement lorsque le niveau de liquide dans la canalisation atteint l'altitude de l'orifice.

TRANSFERT VERS L'ÉCHELLE RÉELLE

Ces techniques ont été employées [5; 6] pour constituer une installation à une échelle plus grande. Il s'agit d'un tube long de 260 m, d'un diamètre interne de 233 mm capable de résister à 20 MPa de pression. Il peut contenir jusqu'à 7 tonnes de CO₂. L'installation a été construite et installée chez un partenaire des projets, en Chine, non loin de Dalian.

Un exemple de résultat est montré sur la **figure 2** représentant l'aspect du nuage suite à une ouverture de 50 mm. Si on retient que 5% (en volume relatif v/v) est une concentration de CO₂ seuil pour les effets toxiques sur l'homme, on s'aperçoit que cette concentration est atteinte à une trentaine de mètres du point de fuite. Pour une fuite en pleine section, cette distance dépasse 100 m. Le mélange est froid, dense et a tendance à stagner près du sol.

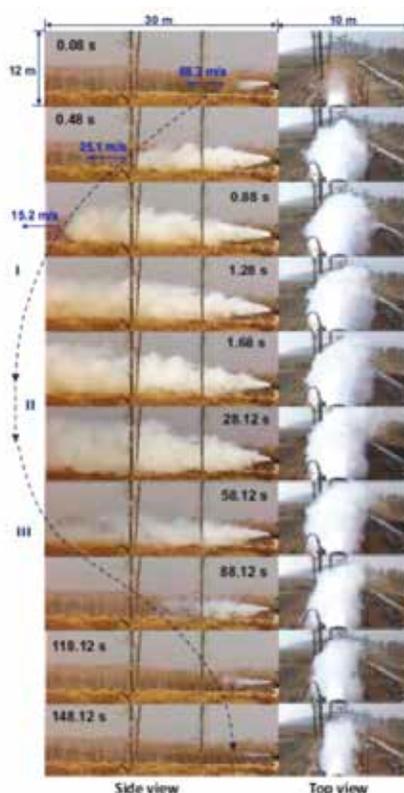
CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Ces travaux ont été complétés par des développements numériques et par la mise au point d'outils d'ingénieur permettant de prévoir les distances d'effet potentielles. Globalement, il est possible de prédire raisonnablement ces distances à condition toutefois d'être capable de prendre en compte la présence des impuretés dans le CO₂ qui, en pratique, n'est pas pur. Les conséquences d'une fuite massive peuvent être importantes et il importe de réduire au minimum le risque de fuite, ce qui suppose des règles strictes de conception, de maintenance et d'exploitation du réseau. C'est dans cette direction que s'orientent désormais les travaux.

ABSTRACT /

Within the course of the UE projects CO₂-PIPEHAZ and CO₂-Quest, new experimental techniques were developed at Ineris to highlight the physical mechanisms involved during an accidental blowdown of a CO₂ transport pipeline. Both the depressurization of the pie and the formation of the cloud outside were investigated. Completely original datasets were produced enabling the development of modelling strategies. Besides, this work and these techniques were employed to scale up our equipment to nearly the industrial dimensions.

Figure 2 / Panache de CO₂ lors d'une fuite sous 7 MPa par un orifice de 50 mm.



Références

- [1] CO₂PipeHaz, 2009. Quantitative Failure Consequence Hazard Assessment for Next Generation CO₂ Pipelines: The Missing Link. <http://www.co2pipehaz.eu/>
- [2] CO₂Quest, 2013, Impact of the quality of CO₂ on storage and transport, <http://www.co2quest.eu>
- [3] Hebrard, J.; Jamois, D.; Proust, C.; Farret, R. (2015), Inside and outside flow from pipes containing a dense CO₂ mixture incorporating impurities Pipe leakage of CO₂ mixtures with impurities: a dedicated experimental set-up and preliminary first results, Communication at the workshop, "Leading the Way to CCS Implementation II'26th - 27th March 2015, Athens Ledra Hotel, Athens, Greece
- [4] Jamois, D.; Proust, C.; Hebrard, J.; Gentilhomme, O. (2015) La sécurité du captage et du stockage du CO₂ : un défi pour les industries de l'énergie, *Récents Progrès en génie des procédés*, Numéro 104 - 2013, ISSN: 1775-335X; ISBN: 978-2-910239-78-7, Ed. SFGP, Paris, France
- [5] Guo, X.; Yan, X.; Yu, J.; Zhang, Y.; Chen, S.; Mahgerefteh, H.; Martynov, S.; Collard, A.; Proust, C. (2016), Pressure response and phase transition in supercritical CO₂ releases from a large-scale pipeline, *Applied Energy*, 178, 189-192
- [6] Guo, X.; Yan, X.; Yu, J.; Zhang, Y.; Chen, S.; Mahgerefteh, H.; Martynov, S.; Collard, A.; Proust, C. (2016), Under expanded jets and dispersion in supercritical CO₂ releases from a large-scale pipeline, *Applied Energy*, 183, 1279-1291



COMPRENDRE ET MAÎTRISER
LES RISQUES À L'ÉCHELLE D'UN SITE
INDUSTRIEL ET D'UN TERRITOIRE



Apport de la surveillance microsismique pour la compréhension des mécanismes d'effondrement dans les mines de sel exploitées par dissolution	30
Modélisation hydro-élasto-visco-plastique d'une galerie du laboratoire souterrain de Meuse/Haute-Marne de l'Andra	32
Avancées sur la caractérisation du comportement hydromécanique à court et long terme de la craie du bassin parisien	34
Dissolution du gypse: analyse et modélisations	36
FOCUS Étude des transferts et des risques pour l'homme et les écosystèmes liés à des substances organiques persistantes dans des sols contaminés: le projet TROPHÉ	39
Torréfaction et pyrolyse de peupliers utilisés en phytotechnologies: effet de la température et du contenu en chlore de la biomasse sur la distribution des métaux dans les émissions et options de valorisation	40
Évaluation des risques cumulatifs en Lorraine: un cadre de travail pour caractériser les inégalités environnementales	42
Genèse, pratique et mutation des analyses de risques, l'éclairage des SHS	44
Contribution du rayonnement thermique aux explosions de poussières métalliques: analyse et expérimentations	46

APPORT DE LA SURVEILLANCE MICROSISMIQUE POUR LA COMPRÉHENSION DES MÉCANISMES D'EFFONDREMENT DANS LES MINES DE SEL EXPLOITÉES PAR DISSOLUTION

Contributeur

Jannes
KINSCHER

Du fait de sa nature souvent brutale, l'effondrement de terrain provoqué par l'instabilité de cavités souterraines représente un aléa important rencontré dans de nombreuses exploitations minières. Lors des opérations d'extraction de sel par dissolution, ces effondrements peuvent généralement être anticipés à partir de l'inspection des paramètres de production enregistrés aux puits d'injection et d'extraction (par exemple, le niveau de nappe, sa température et sa salinité). De plus, des mesures *in situ*, comme le sonar, le GPS ou les campagnes de nivellement, sont souvent réalisées pour caractériser l'évolution de la cavité souterraine. Les recherches actuelles se concentrent sur la compréhension du processus de dissolution à différentes échelles, comprenant les interactions entre la convection naturelle ou forcée en lien avec l'évolution de la cavité dans le temps et dans l'espace.

OBJECTIF ET MÉTHODE

Dans cette étude, l'Ineris a démontré que la surveillance microsismique peut constituer une solution fiable pour prévenir de tels risques. Elle peut également être un outil intéressant pour optimiser la stratégie d'exploitation locale. Les résultats de cette étude ont été basés sur une approche multiparamétrique effectuée sur une mine de sel située à Cerville-Buissoncourt (Lorraine, France). La surveillance microsismique a été accompagnée par plusieurs campagnes de mesures géotechniques

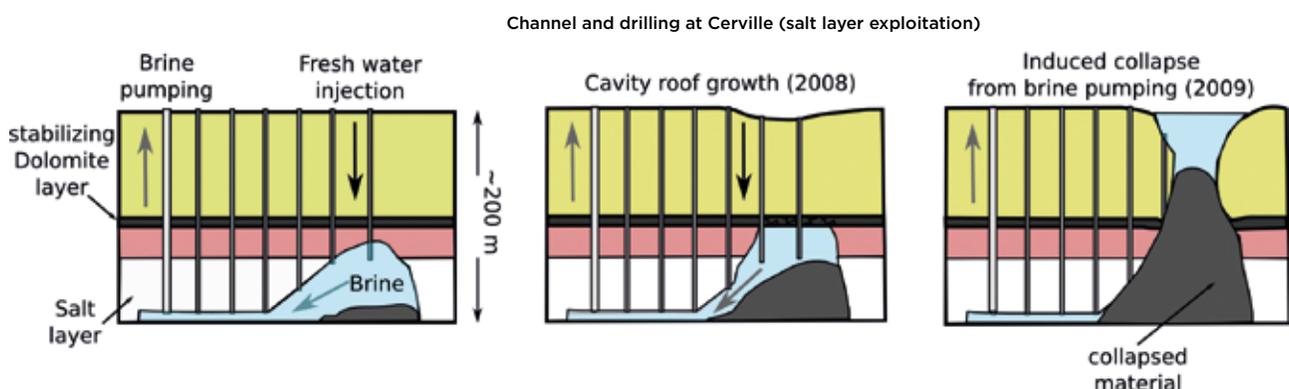
complémentaires, offrant ainsi l'opportunité de comprendre en détail la signature microsismique des mécanismes d'effondrement et de développer des outils de traitement de données adaptés. Cette approche multiparamétrique a été appliquée à un cycle d'exploitation quasi complet, comprenant la croissance et l'effondrement induit d'une vaste cavité souterraine d'un diamètre voisin de 130 m (figure 1).

Les événements microsismiques (d'un total de ~ 50 000) apparaissaient principalement (~ 80 %) sous forme d'essaims sismiques caractérisés par des superpositions denses et complexes. La détection et la localisation de ces événements particuliers ont pu être réalisées grâce au développement d'une approche probabiliste combinant l'information de la polarisation du signal des ondes P et l'amplitude du signal. Les mécanismes et les paramètres des sources sismiques ont ensuite été étudiés en comparant les formes d'ondes, les spectres de fréquence et les rapports d'amplitude issus des données observées et des données synthétiques, basées sur différents modèles standards de sources.

RÉSULTATS

Les résultats de localisation des événements sismiques ont montré que l'origine de la sismicité est principalement liée aux processus de déformation du toit de la cavité. Ainsi, la surveillance microsismique permet de suivre directement l'évolution de la cavité

Figure 1 / Illustration des différentes étapes d'extraction du sel par dissolution dans la mine de Cerville-Buissoncourt.



souterraine dans l'espace et le temps, avant qu'elle n'atteigne la surface.

Une activité microsismique significative a ainsi notamment été enregistrée 48 heures avant le déclenchement de l'effondrement. En outre, la distribution spatio-énergétique de la sismicité illustre approximativement l'extension spatiale de la cavité souterraine et permet donc de contraindre spatialement la zone d'effondrement en surface (figure 2a).

L'analyse des sources microsismiques approfondie dans une étape de post-traitement pour l'ensemble des événements a indiqué une dominance de deux groupes de failles inverses. Un groupe orienté NW-SE pour au moins 60 % des événements et l'autre, mineur, orienté NE-SW (figure 2b). L'explication la plus probable pour cette ressemblance entre les mécanismes des sources sismiques, est très probablement liée à la réactivation de structures ou failles préexistantes. Ainsi, il est supposé que la création de la structure de la cavité de Cerville a considérablement réduit les contraintes verticales au sein d'une zone au toit de la cavité, ce qui a conduit à des glissements le long des structures préexistantes. Cette hypothèse a pu être récemment confirmée à partir d'images satellites montrant le cratère en surface plusieurs années après l'effondrement. Ces images ont clairement révélé la présence de deux familles de failles qui ont formé des linéaments distincts au bord du cratère (figure 2b). Ces résultats montrent que la surveillance microsismique peut fournir des informations très importantes pour identifier les mécanismes d'effondrement liés à des caractéristiques géologiques spécifiques. Il est évident que la compréhension de ces mécanismes est fondamentale pour anticiper le temps de déclenchement et la cinétique de l'effondrement et pour optimiser la stratégie d'exploitation.

Références

Kinscher, J., Bernard, P., Contrucci, I., Mangeney, A., Pigué, J. P., & Bigarre, P. (2014). Location of microseismic swarms induced by salt solution mining. *Geophysical Journal International*, 200(1), 337-362.

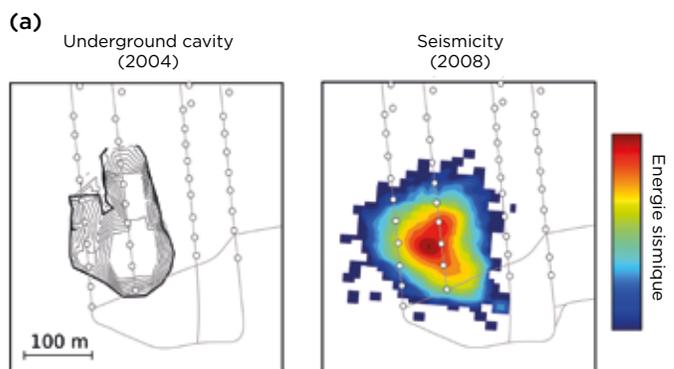
Kinscher, J. L. (2015). The analysis and interpretation of microseismicity induced by a collapsing solution mining cavity: A contribution for progress in hazard assessment of underground cavities (Doctoral dissertation, université de Lorraine).

Kinscher, J., Cesca, S., Bernard, P., Contrucci, I., Mangeney, A., Pigué, J. P., & Bigarré, P. (2016). Resolving source mechanisms of microseismic swarms induced by solution mining. *Geophysical Journal International*, 206(1), 696-715.

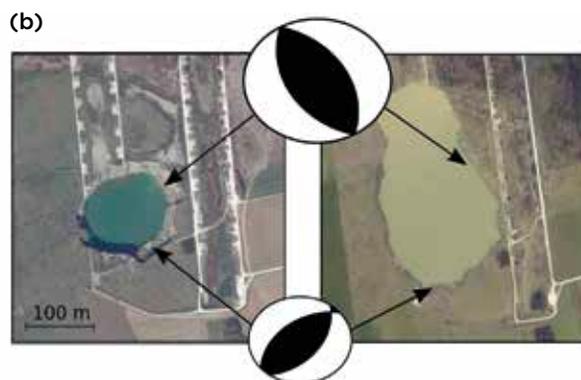
ABSTRACT /

Surface collapses are a common phenomenon in salt solution mining operations and represent often the main source of risk to manage to ensure the safety of miners working on site. As part of a surface collapse experiment carried out at a salt solution mine at Cerville-Buissoncourt (Lorraine, France), Ineris aimed to develop and optimize collapsing hazard assessment based on microseismic monitoring. A series of innovative seismic signal processing approaches have been developed, particularly in terms of source location and mechanism analysis. The results indicate that the surface collapsing mechanism was controlled by the reactivation of pre-existing structures, oriented mainly NE-SW and NW-SE. The identification of this preferential orientation of fracturing represent an important element to adapt and plan upcoming exploitation on site and to better anticipate the nature of potential collapses of underground cavities.

Figure 2 /
Résumé de la sismicité à Cerville-Buissoncourt.



Topographie de la cavité souterraine et distribution spatio-énergétique de la sismicité avant l'effondrement de la surface.



Cratère en surface (quelques mois et quelques années) après l'effondrement. Les bords du cratère de forme linéaire, confirment l'existence des deux familles de failles inverses en cohérence avec les mécanismes au foyer des sources sismiques calculés dans cette étude.

MODÉLISATION HYDRO-ÉLASTO-VISCO-PLASTIQUE D'UNE GALERIE DU LABORATOIRE SOUTERRAIN DE MEUSE/Haute-MARNE DE L'ANDRA

Contributeurs

Mountaka
SOULEY,

Jean-Bernard
KAZMIERCZAK

L'Ineris a été sollicité par l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra) pour contribuer aux travaux de recherche en amont sur le comportement géomécanique des roches argileuses. De nombreux travaux ont déjà été réalisés depuis plusieurs années sur le comportement et les propriétés des matériaux argileux et les ouvrages souterrains qui y sont réalisés. Le creusement d'excavations souterraines entraîne généralement la création d'une zone perturbée (EdZ) ou zone endommagée (EDZ) au sens de [1], résultant de la micro et la macro-fracturation induites par une redistribution et un réarrangement des contraintes initiales. Il est important de connaître la géométrie, les extensions des EdZ/EDZ, la densité des fissures, leur connectivité et les variations de perméabilité qui peuvent en résulter. Les formations argileuses dans leur état naturel présentent des propriétés favorables au stockage souterrain en raison notamment de leurs faibles conductivités hydrauliques, de leur faible diffusion moléculaire et d'une capacité de rétention de certains éléments.

UN NOUVEAU MODÈLE DE COMPORTEMENT

Les travaux de recherche ont été réalisés sur les argilites du Callovo-Oxfordien (COx) au sein desquelles l'Andra dispose d'un laboratoire souterrain de recherche à Bure dans la Meuse (figure 1). Une caractérisation importante du réseau de fractures induites autour des galeries expérimentales a été réalisée au niveau principal du laboratoire souterrain par l'analyse structurelle du front et des parois, l'analyse des carottes imprégnées de résine, etc. [2]. Ces travaux

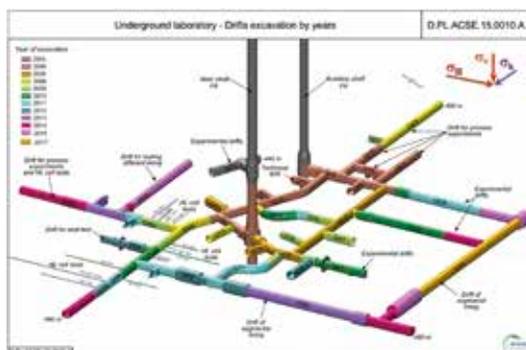
ont permis de connaître précisément les extensions de EDZ et EdZ.

Un grand nombre d'essais hydromécaniques ont été effectués sur de nombreux échantillons afin de mieux comprendre et caractériser le comportement hydromécanique des argilites. Ces essais ont été réalisés par plusieurs laboratoires européens et ont permis de développer des modèles de comportement regroupés en quatre grandes familles [3] : les modèles visco-élasto-plastiques, les modèles endommageables basés sur la mécanique de l'endommagement, les modèles discrets généralement utilisés pour les milieux granulaires et les modèles micromécaniques faisant appel à des techniques d'homogénéisation. Les modèles développés par l'Ineris relèvent de la première famille. En effet, un modèle de comportement a été développé [4], dans un cadre unifié tenant compte des réponses instantanées et différées des argilites. Le retour d'expériences des observations *in situ* effectuées indique que l'endommagement et les fractures induits ont une forte influence sur le comportement différé des galeries, par une augmentation significative des déformations visqueuses. Ces observations ont permis d'apporter des améliorations au modèle initial dont : (a) l'impact de l'endommagement et la fracturation sur les déformations et vitesses de déformations viscoplastiques, (b) le couplage hydromécanique, (c) les variations de perméabilité dans les EDZ et EdZ [5]. Les vérifications du nouveau modèle constitutif ont été faites avec succès en simulant des essais de laboratoire, de compression triaxiale pour le court terme et de fluage uniaxial monophasé pour le comportement différé (figure 2).

La galerie GCS creusée dans la direction de la contrainte horizontale majeure (figure 1), est utilisée comme une application du modèle développé aux calculs de structures. Cette galerie est de forme circulaire avec un rayon moyen de 2,6 m, creusée à la vitesse moyenne de 0,36 m/j. Elle est modélisée avec une géométrie 2D en conditions de déformations planes soumise à un état de contraintes et à la pression interstitielle régnant à - 490 m.

De par les caractéristiques géomécaniques utilisées dans cette intercomparaison de modélisations et la très faible anisotropie de l'état de contrainte dans la section de la galerie GCS, un domaine peu étendu de zones plastiques et une faible anisotropie de convergences sont attendus de la modélisation

Figure 1 / Réseaux des galeries expérimentales du laboratoire souterrain de l'Andra.



numérique. Aussi, comme les déformations plastiques numériques sont très faibles, le comportement reste gouverné par l'élasticité. Comparées aux mesures *in situ*, les convergences horizontale et verticale sont respectivement sous-estimée et surestimée, comme pour la totalité des modèles isotropes utilisés dans l'exercice d'intercomparaison [3]. Par contre, les vitesses des deux convergences semblent être raisonnablement reproduites numériquement à très long terme [5].

La **figure 3a** montre l'évolution du déplacement radial relatif mesuré et prédit entre la tête de l'extensomètre (en paroi) et des points à l'intérieur du massif pour un forage vertical situé en voûte. Comme pour la convergence verticale, le modèle surestime les déplacements verticaux dans le massif, mais avec des écarts moins importants. Toutefois, les vitesses de déplacement prédites sont conformes aux observations.

La **figure 3b** illustre la comparaison entre les mesures et la simulation numérique pour la pression interstitielle dans les chambres du forage OHZ1522 (horizontal). Elle montre clairement que les chutes de la pression interstitielle à moyen terme sont bien reproduites. En revanche, à très court terme (au passage du front) les surpressions interstitielles mesurées dans les chambres à proximité de la paroi ne sont pas reproduites par la simulation numérique dans la mesure où (a) la simulation est en 2D, donc n'intègre pas l'anisotropie induite du champ de contrainte qui conduit à des surpressions en conditions non drainées, (b) le comportement hydraulique est également isotrope.

L'expertise développée par l'Ineris dans ce projet permet aussi de mieux étudier et d'évaluer la sécurité géotechnique d'autres types d'ouvrages profonds.

Références

[1] Tsang CF, Bernier F, Davies C. Geohydromechanical processes in the excavation damaged zone in crystalline rock, rock salt, and indurated and plastic clays – in the context of radioactive waste disposal. *Int J Rock Mech Min Sci* 2005;42 (1):109–25

[2] Armand, G.; Leveau, F.; Nussbaum, C.; de La Vaissiere, R.; Noiret, A.; Jaeggi, D. et al. Geometry and properties of the excavation induced fractures at the Meuse/ Haute-Marne URL drifts. *Rock Mech Rock Eng* 2014;47(1):21–41

[3] Seyedi, D.M.; Armand, G.; Noiret, A. "Transverse Action" – A model benchmark exercise for numerical analysis of the Callovo-Oxfordian claystone hydromechanical response to excavation operations. *Computers and Geotechnics* 85 (2017) 287–305

[4] Souley, M.; Armand, G.; Su, K.; Ghoreychi, M. Modelling of the viscoplastic behaviour including damage for deep argillaceous rocks. *Phys Chem Earth* 2011;36:1949–59.

[5] Souley, M.; Armand, G.; Kazmierczak, J.-B. Hydro-elasto-viscoplastic modeling of a drift at the Meuse/Haute-Marne underground research laboratory (URL). *Computers and Geotechnics* 85 (2017) 306–320

[6] Armand, G.; Conil, N.; Talandier, J.; Seyedi, D.M. Fundamental aspects of the hydromechanical behavior of Callovo-Oxfordian claystone: From experimental studies to model calibration and validation. *Computers and Geotechnics* 85 (2017) 277–86

ABSTRACT /

Clay formations in their natural state show very favourable confining conditions with respect to underground storage due to their generally low hydraulic conductivity, low molecular diffusion and significant retention capacity for some elements.

This research work has been performed on Callovo-Oxfordian Clay (also called "Argillite") in which Andra has constructed an underground research laboratory. As illustrated in figure 1 several specific *in situ* experiments were carried out with the main objectives basically to characterize the short and long term response of the rock to different drift construction methods in order to optimize the design of component and to assess the Excavation Damaged Zone (EDZ) and its evolution. The model developed by Souley et al. (2011 [4]) is phenomenological and elastic-visco-plastic and takes into account the short- and long-term responses of COx claystone. However, it only considers mechanical behaviour. More recently, Souley *et al.* (2017) [5] propose to extend this model in order to reflect: (a) the impact of excavation induced fracturing and damage on the delayed strains as indicated by *in situ* measurements at the Meuse/Haute-Marne URL; (b) hydro mechanical couplings in saturated conditions, (c) changes in the permeability, firstly in the EDZ.

The new model is used to numerically simulate the excavation of the GCS drift of MHM-URL (figure 1). Comparisons with *in situ* measured data are presented in terms of change in strain and pore pressure fields, and then discussed to contribute to the understanding of the COx claystone. Improvement and discrepancy of the modelling are also discussed.

Figure 2 / (a) À gauche, courbes de compression triaxiale à 6 MPa de confinement : contrainte déviatorique en fonctions des déformations axiale, latérale et volumique. (b) À droite, courbes de fluage de déformation viscoplastique axiale en fonction du temps pour 3 niveaux de contrainte axiale: 50, 70 et 90 % de la résistance uniaxiale.

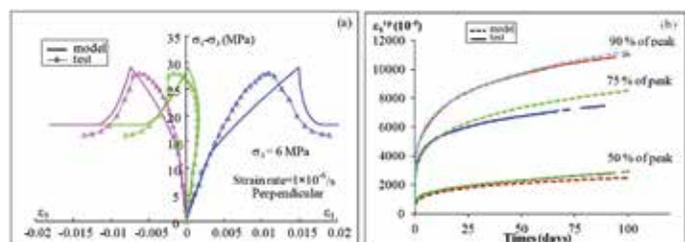
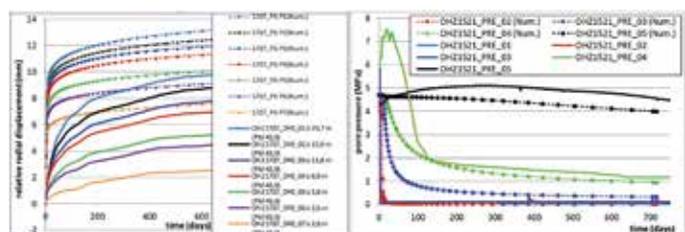


Figure 3 / Confrontation avec les mesures *in situ*: (a) à gauche, déplacement relatif à la paroi dans le massif en voûte en fonction du temps; (b) à droite, évolution de pression interstitielle dans les chambres d'un forage horizontal en reins.



AVANCÉES SUR LA CARACTÉRISATION DU COMPORTEMENT HYDROMÉCANIQUE À COURT ET LONG TERMES DE LA CRAIE DU BASSIN PARISIEN

Contributeur
Mountaka
SOULEY

Les retours d'expérience sur les études de stabilité menées dans des carrières souterraines de craie montrent que l'estimation du coefficient de sécurité butte bien souvent sur le choix des valeurs de résistance à retenir et sur les caractéristiques à prendre en compte pour reproduire le comportement de ce matériau en présence d'eau. En effet, l'extraction de la craie s'est généralement cantonnée aux seuls terrains situés au-dessus de la nappe phréatique mais la modification dans le temps des conditions hydrogéologiques (arrêt des pompages industriels, changement climatique, crues exceptionnelles) peut agir sur l'amplitude des battements de nappes et contribuer à saturer le massif encaissant, voire parfois à ennoyer les carrières. Trois sites (figure 1), déjà instrumentés ou ayant fait l'objet d'une démarche en retour d'expérience, ont permis d'étudier ces paramètres pour des craies exploitées depuis plus de cent ans en carrière souterraine et soumises de manière récurrente à des ennoyages naturels ou accidentels.

Une caractérisation physico-mécanique en fonction de l'hygrométrie a été menée en laboratoire pour les trois craies. Il ressort que la craie de Château-Landon est un peu différente des deux autres dans le sens où la saturation d'un échantillon fait brutalement chuter sa résistance à la compression uniaxiale. Néanmoins, lorsque le matériau est saturé, la forme de la rupture n'est pas aussi nette: la craie s'écrase, le matériau rentre en plasticité rapidement et présente de la dilatance (augmentation de volume) avant la rupture. Sur la base des essais de laboratoire à court terme, les critères de rupture de Mohr-Coulomb et Hoek & Brown

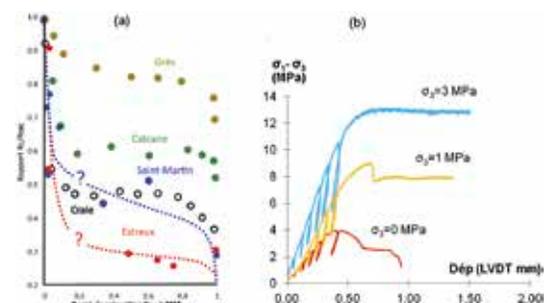
(généralement utilisés en mécanique des roches) ont été déterminés, et les paramètres associés ont été identifiés pour les trois craies en conditions saturées et sèches [1]. Les essais de caractérisation à hygrométrie contrôlée ont permis d'établir que les propriétés mécaniques telles que les modules de déformabilité (axiale et latérale) et les résistances en compression uniaxiale et triaxiale diminuent lorsque le degré de saturation (ou l'humidité relative H_r) augmente. La figure 2 montre un exemple type de courbes du déviateur de contrainte en fonction des déformations axiale et latérale et de résistance en compression uniaxiale en fonction de H_r . Les résultats obtenus sur différents sites démontrent bien l'hétérogénéité de ce matériau, bien souvent considéré comme homogène à l'échelle d'une formation rocheuse.

Le comportement hygro-mécanique différé (dans le temps) a également été étudié à travers des essais de fluage uniaxiaux sous atmosphère contrôlée (85 %, 90 % et 98 % généralement rencontrées *in situ*) et dont la figure 3 montre un exemple de courbes expérimentales. Il ressort que la part argileuse de la craie d'Estreux lui confère un comportement viscoplastique (caractérisé par un fluage de la roche) non négligeable devant son comportement dit instantané, à la différence des deux autres craies. Ceci est en accord avec les résultats relatifs au comportement à court terme. Quelle que soit l'hygrométrie, le fluage se manifeste à partir d'un certain seuil de contrainte, qui lui-même dépend de

Figure 1 / Sites suivis par l'Ineris.

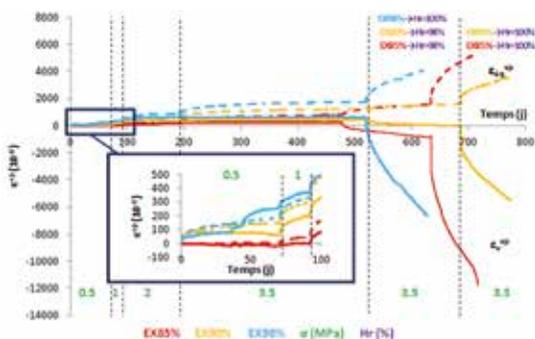


Figure 2 / Influence de l'hygrométrie (a) ratio de résistance $R_c(H_r)/R_c(sec)$ en fonction du degré de saturation S_{rw} à 20 °C des craies d'Estreux et de Saint-Martin-le-Nœud (Lafrance 2016) et une comparaison avec des données de littérature (Watelet 1996), (b) essais triaxiaux à 0, 1 et 3 MPa de confinement et une hygrométrie imposée de 98 % pour la craie d'Estreux.



l'humidité relative Hr: plus Hr est grande, plus le seuil de déclenchement du fluage est bas. Il a également été établi que pour une variété de craie donnée, la relation entre la déformation volumique différée et la distorsion différée (liée à la déformation de la roche) ne dépendait que du couple déviateur/hygrométrie et non de l'histoire de chargement. Les déformations viscoplastiques augmentent d'une manière non linéaire avec le temps et avec l'hygrométrie, pour un déviateur donné. Par ailleurs, la vitesse de déformation dépend de l'amplitude de la déformation viscoplastique. Enfin l'ennoyage augmente également significativement les déformations viscoplastiques. Plus l'échantillon est saturé (plus l'hygrométrie est importante), plus la déformation que subit l'échantillon est importante. Sur la base des différents mécanismes du comportement court terme et long terme des craies étudiées, un modèle rhéologique de comportement a été proposé et implanté dans le code de calcul FLAC3D pour des études de simulation numérique avec une bonne reproduction des courbes obtenues en laboratoire [2] comme illustré sur la figure 4. Une des perspectives importantes de cette recherche sera l'application à des études d'aléa liées aux carrières de craie.

Figure 3 / Courbes de fluage des échantillons partiellement saturés de craie de la carrière d'Estreux. Déformations différées volumique et déviatorique en fonction du temps.



Références

[1] Lafrance, N. 2016 : Étude des effets de l'eau sur les phénomènes de rupture et de déformation affectant les carrières souterraines de craie, thèse de doctorat de l'UL

[2] Souley, M.; Lafrance, N.; Auvray, C.; Labiouse, V. & Belem, T. 2016: An elastoplastic and viscoplastic model for porous geomaterials. *Rock Mechanics and Rock Engineering: From the Past to the Future* - Ulusay et al. (Eds) © 2016 Taylor & Francis Group, London, ISBN 978-1-138-03265-1, p.481-486

Gombert, P.; Auvray, C.; Al Heib, M. (2013). In-situ and laboratory tests to evaluate the impact of water table fluctuations on stability of underground chalk mines. *Procedia Earth and Planetary Science* 7 304-308

Watelet, J.M. 1996 : Méthode d'analyse et diagnostic des conditions de stabilité des carrières souterraines, mémoire de fin d'études. ISAM-SNAM. Paris

ABSTRACT /

The risk of ground failures related to underground structures (natural or anthropogenic) involves over 10 000 towns in France. Accidents due to the collapse of underground chalk mines are among the most destructive, both humanly and materially.

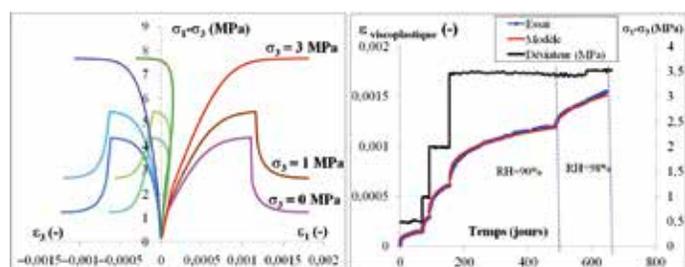
The main objective of this research is to study the effects of water-rock interactions on the mechanical behaviour of three chalks sampled from three underground abandoned mines situated in the Parisian Basin, in the framework of a multi-scale and multi-physics approach. Laboratory characterization was conducted to understand the short and long terms behavior of these two chalks depending on the relative humidity. Although this work was limited to the investigation of relative humidity levels ranging between 90% and 100% which are the most representative of the in situ conditions of abandoned underground openings.

First, physical and mechanical characteristics of chalks and their interactions with water were carried out. The results obtained through short-term hydro-mechanical tests remain consistent with those found in previous published works.

Second, the study of the long-term behaviour of each chalk was developed through uniaxial creep tests with controlled humidity and sample flooding. It was established that creep depends on the mineralogy / micro-structure and the couple (deviatoric stress, relative humidity) but not on the loading history. The mechanisms believed to be the origin of creep deformations are of a physico-mechanical nature and involve the breaking and the restoring of electrostatic bonds between grains. The interpretation of the tests carried out allowed to quantify the importance of the relative contributions of various parameters on the long-term behaviour. The long-term goal remains to power both the expertise and the computer calculations so that one can assess the impact of groundwater level variation on the long-term stability of chalk underground abandoned mines.

Finally, a rheological model has been developed with good agreement with the experimental laboratory curves [2].

Figure 4 / Résultats des simulations d'essai et comparaison aux mesures : (a) cas d'essais triaxiaux sur la craie d'Estreux, (b) cas des essais de fluage multipaliers (à σ_1 et Hr imposés) les paliers étant les suivants: $\sigma_1 = 0,5$ MPa et Hr = 90 % ; $\sigma_1 = 1$ MPa et Hr = 90 % ; $\sigma_1 = 2$ MPa et Hr = 90 % ; $\sigma_1 = 3,5$ MPa et Hr = 90 % ; $\sigma_1 = 3,5$ MPa et Hr = 98 %.



DISSOLUTION DU GYPSE : ANALYSE ET MODÉLISATIONS

Contributeurs

Farid
LAOUAFA,
Xavier
DAUPLÉY

Le gypse est une ressource minérale importante en France et en particulier en Ile-de-France où les masses de gypse que renferme son sous-sol sont exploitées en carrières, à ciel ouvert et en souterrain. Matière première du plâtre, le gypse est une roche évaporitique soluble. Ainsi, dans un contexte naturel ou dans celui d'exploitations anthropiques, cette spécificité occasionne, au contact de l'eau, la dissolution de la roche et peut créer, en fonction des configurations, des vides souterrains de dimensions plus ou moins importantes. Des recherches ont été entreprises par l'Ineris afin d'améliorer la connaissance de ces mécanismes de dissolution et de développer des outils de modélisation permettant de quantifier l'évolution spatio-temporelle de systèmes de dissolution dans des environnements variés. Les enjeux qui sous-tendent ces recherches résident dans une meilleure prédiction des mouvements de terrain (et leurs impacts) induits par la dissolution de telles évaporites. Dans le cadre de l'analyse des risques liés à la présence de cavités souterraines, il est nécessaire de connaître ou, au minimum, d'estimer la présence de cavités, leur localisation et leurs formes géométriques.

MODÉLISATION DE LA DISSOLUTION

La dissolution se traduit par un transport de masse et la création de vide au sein du milieu. L'Ineris s'est principalement intéressé au lessivage qui correspond à une dissolution de surface plus qu'à une dissolution matricielle qui, elle, affecte la matrice du solide poreux. La modélisation numérique de l'évolution spatio-temporelle de la géométrie des cavités formées par dissolution est complexe. Les processus physico-chimiques en présence sont nombreux et interagissent. Le problème est multiéchelle et multiphysique. Les réactions chimiques sont régies par les lois d'équilibre définies dans le cadre de la thermodynamique et de la cinétique chimique. La dissolution étant conditionnée par la nature du fluide, il est nécessaire de reproduire correctement la concentration des espèces et son évolution au sein du fluide. Il est donc indispensable de décrire précisément les écoulements et le transport des espèces dissoutes dans le milieu. Le principal défi scientifique relatif à la formalisation du problème, réside dans la prise en compte simultanée des couplages thermo-hydro-chimiques et de l'évolution de la géométrie du domaine. L'Ineris a successivement étudié des systèmes bi-phasiques (fluide-solide) [1] puis tri-phasiques (gaz-liquide-solide) [2].

Figure 1 /

Vues d'un même pilier dans la carrière abandonnée de Roquevaire (Bouches-du-Rhône) avec deux niveaux d'ennoyage différent (en 1996 à gauche et en 2010 à droite). Les observations faites depuis une vingtaine d'années ne montrent pas d'évolutions significatives liées à la dissolution.



Le formalisme mathématique de la dissolution est basé sur une approche thermodynamique, contrôlée par la condition d'équilibre à la surface. Pour un milieu poreux, le passage d'une description microscopique (échelle du pore) à une description macroscopique (échelle d'un volume) s'effectue par homogénéisation (théorie de la moyenne). La résolution du problème de transport avec évolution de l'interface a été traitée en utilisant deux méthodes d'interface; franche (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) et diffuse (*Diffuse Interface Method*). La prise en compte des effets densitaires induits par la dissolution crée des instabilités hydrodynamiques (instabilités de Rayleigh) bien reproduites par notre modèle.

Pour optimiser le temps de calcul, une méthode de raffinement adaptatif du maillage a été développée. La méthode de champ de phase introduite il y a une vingtaine d'années pour décrire la solidification de mélanges polyphasiques permet de s'affranchir de la difficulté du suivi du front de dissolution, en créant une interface spatialement diffuse d'épaisseur finie. On passe alors d'un modèle discontinu à un modèle continu. L'interface diffuse est construite sur la base de variables scalaires (variable de champ de phase, ici la porosité). La porosité est constante dans la zone solide et décroît rapidement au sein de l'interface. Cette approche est capable de modéliser l'évolution de morphologies arbitraires et de microstructures complexes.

EXEMPLES D'APPLICATION

Les figures présentées ci-après montrent quelques modes de dissolution en 3D. S'agissant de configurations simplifiées de cas réels de dissolution, on retiendra les ordres de grandeurs des temps de dissolution et les tendances d'évolution spatiale des cavités. Les configurations présentées correspondent à :

1. un cas de dissolution d'un pilier de gypse ennoyé d'une carrière souterraine avec écoulement du fluide de dissolution (**figures 1 et 2**);
2. un cas de dissolution d'une lentille de gypse se situant dans un milieu poreux saturé avec écoulement de l'eau (**figure 3**);
3. une comparaison des cinétiques et des géométries pour deux évaporites (gypse et sel) soumises aux mêmes conditions hydrodynamiques (**figure 4**).

Ces exemples de dissolution montrent les potentialités du modèle à décrire des dissolutions ayant des cinétiques mais également des configurations très différentes.

Cas d'un pilier de gypse dans une carrière

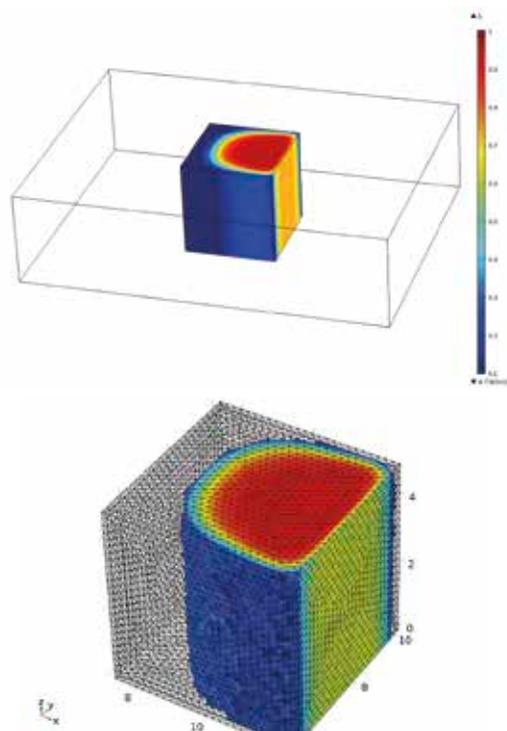
Les simulations présentées ci-contre illustrent, pour un cas similaire à celui de la carrière souterraine de Roquevaire (Bouches-du-Rhône), l'effet de la dissolution sur le pilier (de dimension 5x5x5 m) →

ABSTRACT /

In this research, we are interested in the issue of dissolution of soluble rocks, and their geomechanical consequences like continuous and discontinuous subsidence and sinkholes. This research focuses on gypsum rocks, although the developed method is also adapted to salt rocks. A large-scale Diffuse Interface Model (DIM) is used to describe the evolution of a gypsum cavity induced by dissolution. The method is based upon the assumption of a pseudo-component dissolving with a thermodynamic equilibrium boundary condition. A methodology is proposed based on numerical computations with fixed boundaries to choose suitable parameters for the DIM model and hence predict the correct dissolution fluxes and surface recession velocity. Additional simulations were performed to check which type of momentum balance equation should be used. The potential of the methodology is illustrated on two large-scale configurations: one corresponding to a gypsum lens within a porous rock layer and the other to a pillar in a flooded gypsum mine. A final case is a comparison between salt and gypsum dissolution rate.

Figure 2 /

Dissolution d'un pilier de carrière ennoyée de gypse. État après 30 ans d'une dissolution entretenue par l'écoulement d'une eau pure (vitesse $V = 10^{-6}$ m/s) (dimension 5x5x5 m). De haut en bas, configuration du système pilier-écoulement, isovaleurs de la saturation en gypse et représentation 3D du pilier dissous.

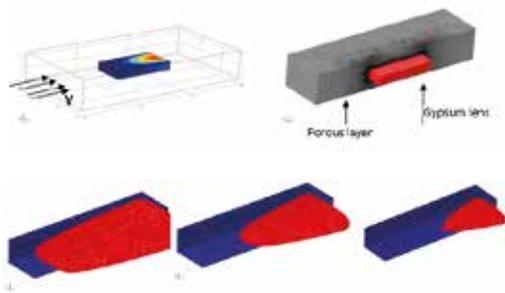


de gypse lorsqu'une eau pure circule en continu et à son contact. Dans ce cas, le pilier est entièrement noyé et le fluide circule à une vitesse très faible de 10^{-6} m/s ($\mu\text{m/s}$), étant donné la faible perméabilité du gypse.

Lentille de gypse

Les simulations présentées en **figure 3** illustrent le cas d'une lentille de gypse soumise à un écoulement d'une eau pure à son pourtour, dans la matrice poreuse des terrains encaissants. Cette situation peut se rapprocher des conditions géologiques rencontrées dans la formation des marnes et caillasses du Lutétien en Ile-de-France. Là encore,

Figure 3 / La figure du haut représente le maillage (domaine d'étude) et la localisation de la lentille. Les figures du bas montrent la reconstruction de la forme de la lentille de gypse initialement parallélépipédique ($10 \times 5 \times 2$ m) à trois instants (3, 15 et 30 ans).

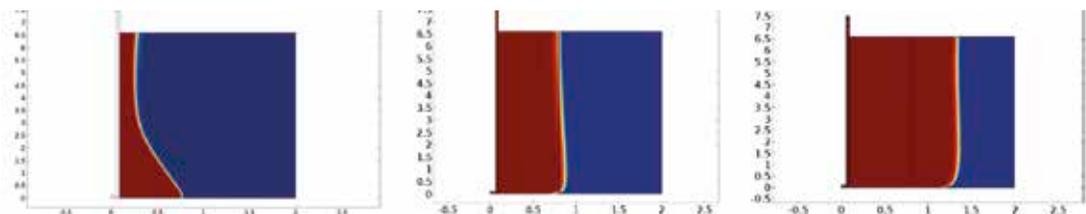


la vitesse du fluide imposée est caractéristique d'écoulement dans un milieu semi-perméable (faible perméabilité). La vitesse de dissolution est principalement contrôlée par la mise en contact permanente d'une eau douce avec le gypse.

Comparaison gypse-halite

Les représentations de la **figure 4** correspondent à des simulations de dissolution d'une injection d'eau douce à partir d'un forage dans une roche soluble. Deux substances ont été considérées, du gypse et de la halite (sel gemme). L'injection s'effectue à la base de la couche, le fluide de dissolution est évacué à l'extrados du forage d'injection, au sommet de la couche. La vitesse du fluide d'injection imposée en entrée est ici élevée ($8 \cdot 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$, vitesse d'injection adoptée lors du test *in situ*) comparativement aux autres configurations étudiées (10^{-6} ms^{-1}). Dans le cas du gypse, une cavité dont le rayon moyen reste très largement inférieur à 1 m s'est formée sur une période de temps de trois ans. En comparaison, quelques jours suffisent pour créer une cavité d'un mètre de rayon dans le sel gemme. On retrouve ici un écart en termes de vitesse de dissolution de sel gemme par rapport au gypse, de deux ordres de grandeur environ qui correspond à celui des taux de dissolution obtenus expérimentalement au laboratoire entre le gypse ($t \approx 33$ à $50 \text{ mg/m}^2/\text{s}$ ou $1,4 \cdot 10^{-2}$ à $2,15 \cdot 10^{-2} \mu\text{m/s}$) et la halite ($3 \text{ g m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ou $1,4 \mu\text{m s}^{-1}$).

Figure 4 / Demi-vues en plan de la forme géométrique de la cavité (rouge) du gypse (gauche) après 3 ans d'injection d'une eau pure à la vitesse de 8 cm/s et celle du sel (à droite) obtenues après 4 jours (à gauche) et 12 jours (à droite).



Collaborations

J. Billotte,
Mines ParisTech,
Centre de géosciences,
Fontainebleau

M. Quintard,
INPT/UPS/CNRS/IMFT
(Institut de mécanique
des fluides de Toulouse),
Institut national
polytechnique
de Toulouse

J. Guo,
INPT/UPS/CNRS/IMFT
(Institut de mécanique
des fluides de Toulouse),
Institut national
polytechnique de
Toulouse

Références

- [1] Luo H., Quintard M., Debenest G., Laouafa F. Properties of a diffuse interface model based on a porous medium theory for solid-liquid dissolution problems. *Transport in Porous Media*. *Comput Geosci* (2012). DOI 10.1007/s10596-012-9295-1
- [2] Luo H., Laouafa F., Quintard M. (2014). Numerical modeling of three-phase dissolution of underground cavities using a diffuse interface model. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* DOI: 10.1002/nag.2274
- Haishan Luo, Farid Laouafa, Gerald Debenest, Michel Quintard (2015). Large scale cavity dissolution: From the physical problem to its numerical solution. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 2015, Pages 131-146.
- Guo J., Laouafa, F., Quintard, M. (2015). Dispersion in porous media with heterogeneous nonlinear reactions, *Transport In Porous Media*. *Transp Porous Med* (2015) 109:541-570 DOI 10.1007/s11242-015-0535-4
- Guo J., Laouafa, F., Quintard (2016). A theoretical and numerical framework for modeling gypsum cavity dissolution. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech. Vol. 40, 1662-1689*
- Daupley, X., Laouafa, F., Billotte, J., Quintard, M. (2016). La dissolution du gypse : quantifier les phénomènes. *Mines & Carrières*, 2015 (229, Hors série) : p. 35-43

FOCUS / ÉTUDE DES TRANSFERTS ET DES RISQUES POUR L'HOMME ET LES ÉCOSYSTÈMES

LIÉS À DES SUBSTANCES ORGANIQUES PERSISTANTES DANS DES SOLS CONTAMINÉS : LE PROJET TROPHÉ

Contributeurs

- Karen PERRONNET,
- Emmanuelle BOULVERT,
- Nicolas MANIER,
- Nicolas PUCHEUX

Piloté par l'Ineris et cofinancé par l'Ademe, le projet TROPHÉ a porté sur le transfert des PolyChloroBiphényles (PCB) et des PolyChloroDibenzoDioxines /Furanes (PCDD/F) à partir de sols contaminés vers les chaînes alimentaire et trophique terrestre ainsi qu'à sa prise en compte dans les évaluations de risque.

Une meilleure considération des transferts dans les évaluations des risques sanitaires (ERS) destinées à la protection de l'homme et dans les évaluations des risques pour les écosystèmes (éRé) a été rendue possible par la détermination expérimentale de facteurs de bioconcentration (BCF). Ceux-ci ont été obtenus pour cinq légumes potagers (salade, courgette, pomme de terre, carotte, haricot) et pour les vers de compost (premier maillon trophique en conditions contrôlées au sein de l'Institut.

L'analyse croisée des démarches d'ERS et d'éRé au travers respectivement, des logiciels de modélisation multicompartimentaux MODUL'ERS (développé par l'Ineris) et TerraSys (développé par Sanexen, Canada), complète cette étude.

Dans le cadre de la consommation de végétaux potagers cultivés sur des sols contaminés, la contribution des PCB dans l'exposition

est majoritaire en raison de leur transfert plus élevé, mais ce sont les PCDD/F qui portent majoritairement le risque sanitaire. La contribution des congénères à l'exposition est variable en fonction des végétaux considérés dans le bol alimentaire. L'étude de sensibilité des paramètres met en évidence, d'une part, la faible incidence de la biodisponibilité relative des PCB dans les sols en raison de sa valeur élevée (> 80%), et d'autre part, l'incidence plus conséquente de la fraction du sol analysée (fraction granulométrique < 250 µm pour le scénario ingestion non intentionnelle de sol). Le retour d'expérience de l'application du logiciel TerraSys pour évaluer les risques pour les écosystèmes met en évidence la sensibilité de certains paramètres et conduit à recommander de prendre en compte des coefficients de transfert sol-invertébrés les plus élevés (et non moyen), et de considérer un réseau trophique constitué d'un premier prédateur suivi d'un prédateur supérieur.

Plus de 150 valeurs de BCF ont été obtenues expérimentalement. Elles ont été intégrées dans les paramètres de MODUL'ERS et alimenteront la base de données nationale BAPPOP lors de son actualisation. À ce jour, les risques pour l'homme sont davantage évalués que ceux pour les écosystèmes en raison des outils existants, de la connaissance des scénarii d'exposition et des valeurs toxicologiques de référence disponibles dans la littérature. Les approches d'évaluation du risque sanitaire pour l'homme et du risque pour les écosystèmes restent complémentaires pour appréhender l'impact des PCB et des PCDD/F sur l'environnement.

Figure 1 / Réseau trophique retenu avec deux prédateurs (hérisson, renard) pour le logiciel TerraSys.

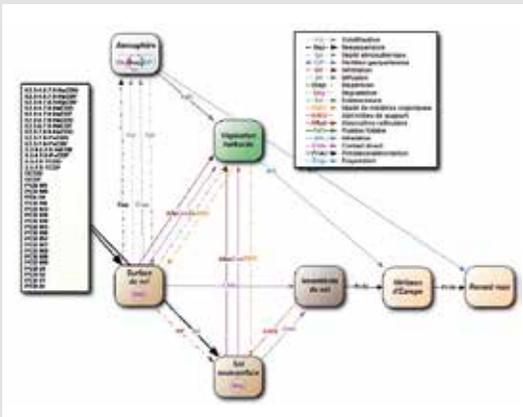
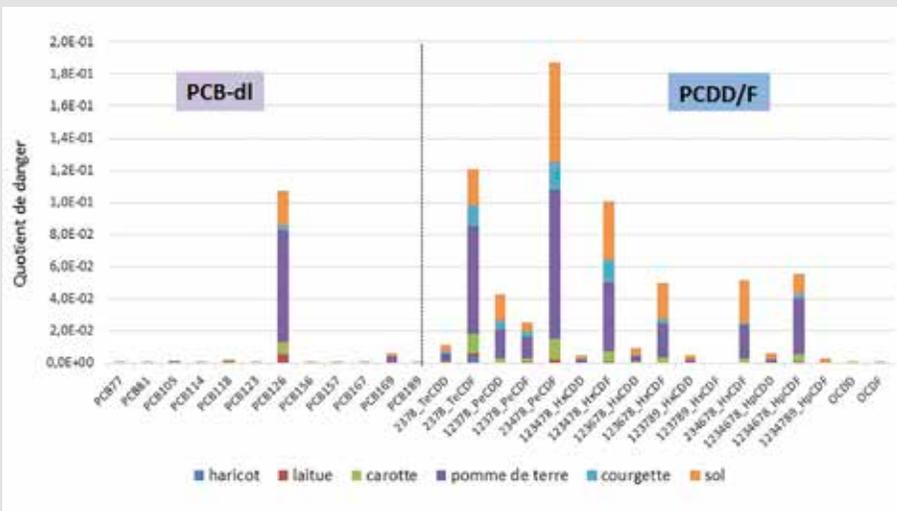


Figure 2 / Niveau de risque sanitaire pour l'homme pour les effets avec seuil – contribution des voies d'exposition (ingestion de sol, consommation de végétaux auto-produits) pour les PCB-dl (à gauche) et les PCDD/F (à droite), classés selon le nombre croissant d'atomes de chlore – Cas des adultes exposés au sol le plus contaminé.



TORRÉFACTION ET PYROLYSE DE PEUPLIERS UTILISÉS EN PHYTOTECNOLOGIES: EFFET DE LA TEMPÉRATURE ET DU CONTENU EN CHLORE DE LA BIOMASSE SUR LA DISTRIBUTION DES MÉTAUX DANS LES ÉMISSIONS ET OPTIONS DE VALORISATION

Contributeurs

Valérie
BERT,
Rodolphe
GAUCHER.

La directive 2009/28/CE modifiée relative à la promotion de l'utilisation de l'énergie produite à partir de sources renouvelables crée un cadre commun pour l'utilisation des énergies renouvelables afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre et de promouvoir des transports plus propres. À cette fin, la directive encourage la restauration des sols qui ont été sévèrement dégradés ou fortement pollués pour la production de biofuels et de bioliquides. Dans ce contexte, les phytotechnologies peuvent contribuer aux objectifs de la directive. En plus de contribuer à restaurer la qualité et les fonctions du sol, les phytotechnologies peuvent produire de la biomasse renouvelable (herbacée ou ligneuse) utilisable dans différentes voies de valorisation énergétique ou de la matière. En fonction de la phytotechnologie utilisée sur un site pollué, dépendant du comportement de(s) la plante(s) vis-à-vis des polluants, des paramètres physico-chimiques et des caractéristiques agronomiques des sols, la biomasse récoltée peut contenir des éléments métalliques (ETM) dont les concentrations peuvent être supérieures à celles habituellement mesurées dans une végétation similaire poussant sur des sols non pollués. Cette biomasse végétale peut intégrer, dans les conditions fixées par la réglementation, les filières de valorisation existantes à condition qu'elle ne perturbe pas le fonctionnement et la performance des procédés et que les émissions d'ETM soient maîtrisées afin de prévenir les transferts dans l'environnement. Depuis

quelques années, des tests en laboratoire et en pilotes industriels sont conduits pour définir les paramètres d'entrée de telles biomasses dans les filières existantes et les éventuelles limites ou contraintes. La torréfaction et la pyrolyse sont deux procédés thermo-chimiques en émergence. Ces procédés ont récemment été mis en œuvre dans le cadre du projet ANR « BIOFILTREE » sur des biomasses ligneuses (peupliers) résultant des phytotechnologies à l'échelle de pilotes industriels.

CONCENTRATION EN ETM ET PROPRIÉTÉS DES BOIS UTILISÉS DANS LES ESSAIS

Des essais de torréfaction (290 °C) et de pyrolyse (450 et 800 °C) ont été conduits dans un réacteur breveté avec du bois de peupliers SKADO enrichis en Cd, Pb, Cu et Zn provenant de sol pollué (Leforest, région Hauts-de-France) et témoin provenant de pépinière. Le témoin présentait, pour sa part, une concentration naturelle en chlore (Cl) supérieure à celle du peuplier enrichi.

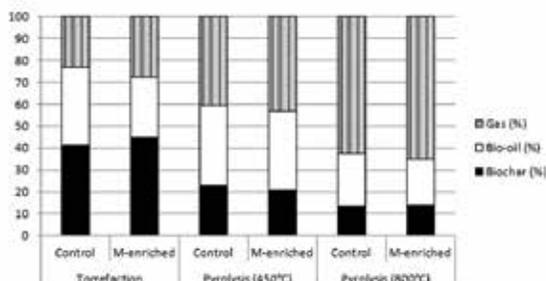
RENDEMENT DES ÉMISSIONS (BIOCHAR, BIO-HUILE, GAZ)

Le rendement en biochar/biomasse torréfié diminue avec l'augmentation de température du fait d'un relargage plus important de matières volatiles (figure 1). L'excès de métaux, en particulier le Cd, contenu dans le peuplier enrichi n'influence pas le procédé, les rendements en biochar, bio-huile et gaz étant similaires, quel que soit le bois utilisé.

DISTRIBUTION DES ETM DANS LES ÉMISSIONS

Pour la torréfaction, les ETM, dans le cas du peuplier enrichi, se retrouvent préférentiellement dans la biomasse torréfiée puis dans la bio-huile et enfin dans les gaz, qui constituent une fraction mineure (figure 2). La distribution du Pb dans le cas du témoin diffère de la distribution des autres ETM, le Pb se trouvant préférentiellement dans la bio-huile. À 450 °C, la majorité des métaux sont récupérés dans le biochar, puis dans la bio-huile et finalement dans les gaz. À 800 °C, le Cu se retrouve majoritairement dans le biochar, confirmant son caractère faiblement

Figure 1 / Rendement (%) en biochar, bio-huile et gaz des peupliers « contrôle » et enrichis en métaux après torréfaction et pyrolyse. Le gaz est calculé comme suit: $100\% - [(\% \text{ bio-huile}) + (\% \text{ biochar})]$.



volatil. Au contraire du Cu, l'augmentation de température favorise la volatilisation du Zn, du Pb et du Cd. À 800 °C, les gaz constituent le compartiment le plus important après le biochar en termes de quantité récupérée d'ETM. Ces résultats suggèrent que le Cd, le Zn et le Pb forment des complexes volatils à des températures inférieures aux points d'ébullition de ces mêmes métaux sous forme élémentaire. La plus forte volatilisation du Zn et du Pb à 800 °C dans le cas du peuplier témoin peut s'expliquer par une concentration naturelle en Cl supérieure à celle du peuplier enrichi, le Zn et le Pb étant respectivement volatilisés sous forme de ZnCl₂ et de PbCl₂. Le Cd serait présent quant à lui sous formes élémentaire et CdCl₂.

OPTIONS DE VALORISATIONS DES ÉMISSIONS

La possibilité de valoriser le biochar, la biomasse torréfiée, les bio-huiles et les gaz a été étudiée au regard des réglementations et normes françaises et internationales existantes. Le Cd s'est avéré limitant pour les options de valorisation envisagées des émissions (ex: amendement organique, support de culture, pellets) dans le cas du peuplier enrichi, et dans une moindre mesure, pour le peuplier contrôle.

CONCLUSIONS

Les essais de torréfaction et de pyrolyse ont permis de mieux comprendre le comportement des ETM en fonction de la température opérée et des différents facteurs d'influence, notamment du chlore. La connaissance de la composition des biomasses est primordiale pour prédire le comportement des ETM dans les émissions des procédés. Afin de garantir l'utilisation en toute sécurité des biomasses végétales issues de sol pollué en pyrolyse et torréfaction, il est conseillé de réaliser des mesures de Cd et autres éléments métalliques dans les émissions.

REMERCIEMENTS

Cette étude a été financée dans le cadre du programme ANR blanc international BIOFILTREE (2010-INTB-1703-03) et Phytosed 2 (ADEME, 1072C0044 et VNF, 2011/01/22).

Références

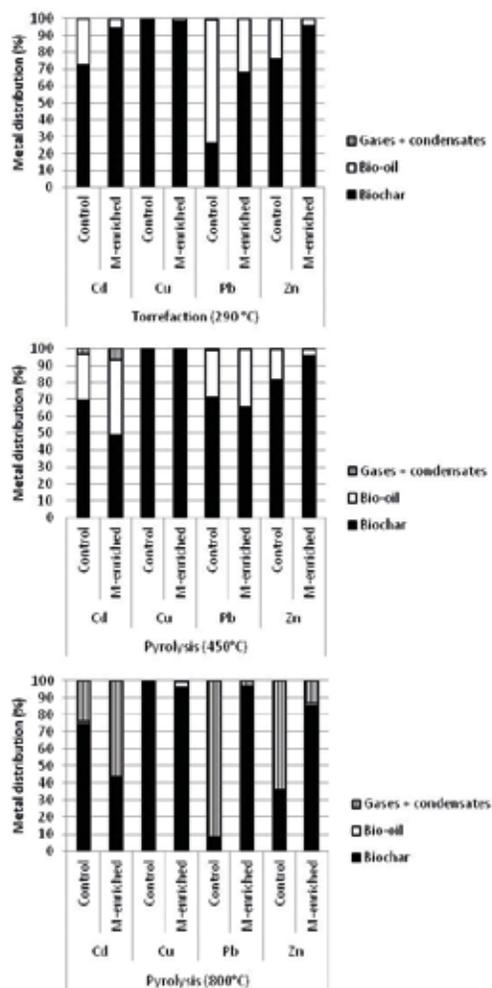
Bert, V.; Allemon, J.; Sajat, Ph.; Dieu, S.; Papin, A.; Collet, S.; Gaucher, R.; Chalot, M.; Michiels, B.; Raventos, C. 2017. Torrefaction and pyrolysis of metal-enriched poplars from phytotechnologies : effect of temperature and biomass chlorine content on metal distribution in end-products and valorization options. *Biomass and Bioenergy*, 96: 1-11.
 Bert, V.; Douay, F.; Faure, O.; Cadiere, F. 2017. Les phytotechnologies appliquées aux sites et sols pollués (Nouveaux résultats de recherche et démonstration). ADEME. Ed. ADEME Collection Expertises. P68. ISBN : 979-10-297-0786-5. <http://www.ineris.fr/centredoc/guidephyto2-mars2017-1496923668.pdf>

ABSTRACT /

Torrefaction (290°C) and pyrolysis (450 and 800°C) trials were performed at pilot scale on metal-enriched poplars from a phytomanaged soil and poplars from uncontaminated soil. The evolution of the end-product yield, i.e. biochar, bio-oil and gas fractions, depended on temperature rather than other parameters such as the origin or metal content of the tested poplars. Torrefaction decreased the processed poplars weight, leading to metal-enriched torrefied biomass as a major end-product. At 450 and 800°C, metal behavior was governed by temperature. At 450°C, metals were recovered in biochar, then in bio-oil and finally in gases. At 800°C, similar results were obtained for Cu, confirming that Cu was not easily volatilized. On the contrary, Zn, Pb and Cd were mostly recovered in gases, which became the second metal recovery compartment. Zn and Pb were assumed to form volatile metal chlorides, therefore increased metal volatilization from Control poplar biomass could be explained by increased chlorine content of such biomass.

According to metal concentrations, valorization options were discussed for end-products.

Figure 2 / Distribution des métaux dans le biochar, les bio-huiles et les gaz et condensats pour chaque procédé, exprimé en % de la quantité totale de métal récupérée.



ÉVALUATION DES RISQUES CUMULATIFS EN LORRAINE : UN CADRE DE TRAVAIL POUR CARACTÉRISER LES INÉGALITÉS ENVIRONNEMENTALES

Contributeurs

Julien
CAUDEVILLE,
Despoina
IOANNIDOU,
Emmanuelle
BOULVERT,
Roseline
BONNARD

Le Plan national santé environnement (PNSE) vise à prendre en compte, de façon pérenne, la santé environnementale dans les politiques publiques. Ainsi, les actions des PNSE sont développées selon deux axes structurants :

- réduire les expositions responsables de pathologies à fort impact sur la santé ;
- réduire les inégalités environnementales.

LA PLATEFORME PLAINE POUR LA LORRAINE

Chaque région a sélectionné les actions qui répondent aux préoccupations majeures de santé environnementale de la population locale, en tenant compte des priorités régionales de santé publique, notamment en matière de réduction des inégalités de santé. Cette analyse a abouti à l'élaboration de PRSE (Plans régionaux en santé environnement).

En région Lorraine, une des actions du PRSE vise à définir des priorités d'une future politique publique de réduction des expositions par l'identification des zones de cumul d'exposition aux compartiments air, eau, sol et au bruit. Cette démarche implique de disposer de données environnementales acquises par la mesure ou la modélisation servant ensuite à élaborer des indicateurs composites de risque. La plateforme intégrée d'analyses des inégalités environnementales (PLAINE) de l'Ineris qui permet d'interfacer le modèle d'exposition multimedia MODUL'ERS dans un système d'information géographique (SIG) a été utilisée pour le

traitement et la construction de variables d'exposition. Au regard des données disponibles dans les différentes bases de données environnementales exploitables (tableau 1), trois approches ont été mises en œuvre selon le compartiment étudié pour construire des cartes d'indicateurs de risque :

- la caractérisation de la contamination des milieux ;
- la quantification de l'exposition à travers la démarche d'évaluation des risques ;
- la détection de zones à risque par la construction d'indicateurs de contexte (proximité des sources par exemple).

Les indicateurs composites correspondent à la combinaison mathématique (ou « agrégation ») des différents indicateurs qui représentent différentes dimensions du risque établies à partir de données de bruit et de contamination aux substances chimiques des compartiments environnementaux étudiés (eau, air, et sol). Ils permettent d'attribuer des scores à chacune des entités géographiques définies à partir d'informations quantitatives et qualitatives. Leur cartographie permet de hiérarchiser les zones et les populations potentiellement exposées.

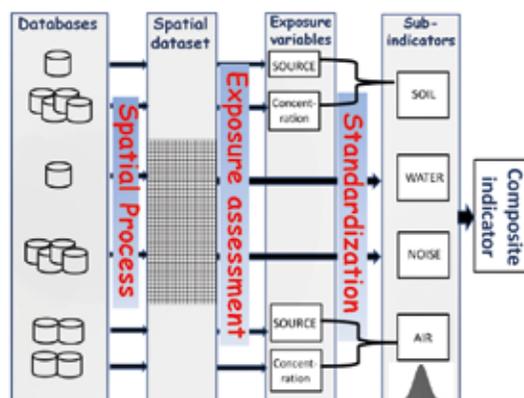
Les méthodologies utilisées permettent de transformer les variables d'exposition (standardisation des variables d'exposition ou utilisation d'indicatrices binaires) pour obtenir des contributions équivalentes pour l'eau, l'air, le sol et le bruit sur l'ensemble de la région.

RÉSULTATS

La figure 1 illustre la première phase des travaux qui a permis l'identification de zones de surexposition de la population à partir de la collecte et du traitement des données environnementales disponibles en Lorraine. La contribution des parties prenantes dans la réalisation de l'étude a facilité la collecte de données, la sélection des facteurs de risque et la coconstruction d'hypothèses pour pallier les manques scientifiques liés à l'utilisation de données lacunaires.

Les zones de surexposition potentielles identifiées sont principalement localisées le long du Sillon lorrain (figure 2). Les zones de cumul correspondent principalement aux facteurs de risque air, bruit et sol (figure 3). Les contributions liées à l'eau sont très faibles sur les zones de cumul.

Figure 1 / Schéma conceptuel de traitement de données pour la construction de l'indicateur composite.

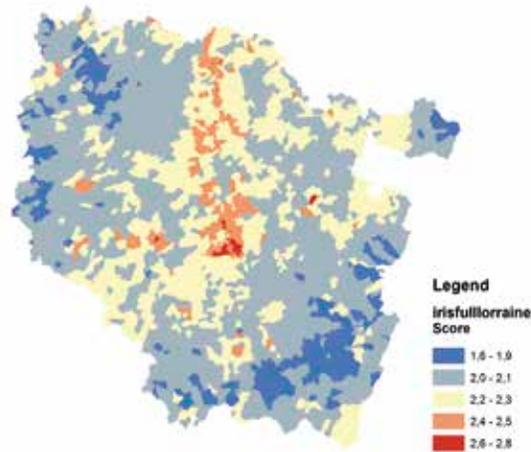


Un test sur les hypothèses du modèle a montré l'impact du mode de transformation des données sur la hiérarchisation des zones de surexposition. La visualisation des zones de cumul et l'analyse des déterminants de l'exposition sont facilitées par le développement d'outils d'appropriation des résultats qui permettent d'associer aux zones de cumul les contributions relatives des différents types de risque et polluants impliqués.

Références

Caudeville, J. et al. Cumulative Risk Assessment in the Lorraine Region: A Framework to Characterize Environmental Health Inequalities. *Int. J. Environ. Res. Public Health* 2017, 14(3), 291.
 Caudeville, J. Retour d'expérience des travaux de caractérisation des inégalités environnementales réalisés en région. Ineris-DRC-15-152407-12400A, 2015.

Figure 2 / Cartographie de l'indicateur composite agrégé au niveau de l'IRIS.



ABSTRACT /

The study explores spatial data processing methods and the associated impact on the characterization and quantification of a combined health risk indicator at a regional scale with fine resolution. To illustrate the methodology of combining multiple publicly available data sources, we present a case study of the Lorraine region (France), where regional stakeholders were involved in the global procedures for data collection and data processing. Different indicators are developed by combining technical approaches for assessing and characterizing human health exposure to chemical substances (in soil, air and water) and noise risk factors. The results allow identification of pollutant sources, determinants of exposure, and potential hotspot areas. A test of the model's assumptions to changes in sub-indicator spatial distribution showed the impact of data transformation on identifying more impacted areas. Cumulative risk assessment enable the combination of quantitative and qualitative evaluation of health risks by including stakeholders in the decision process, helping to define a subjective conceptual analysis framework or assumptions when uncertainties or knowledge gaps exist.

Figure 3 / Histogramme des contributions des différents facteurs de risque dans les zones de cumul d'exposition (au-dessus du 90^e percentile) pour différentes méthodes de transformation (transformation normale en bleu-SN ; rang en vert-Perc).

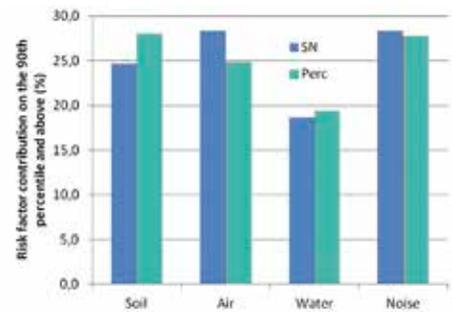


Tableau 1 / Inventaire des bases de données intégrées dans l'étude.

DONNÉES CONCERNÉES	NIVEAU	NOM	GESTIONNAIRE	TERRITOIRE ADMINISTRATIF	INFORMATIONS	REPRÉSENTATIVITÉ SPATIALE	REPRÉSENTATIVITÉ TEMPORELLE	EXPOSITION CARACTÉRISÉE	NIVEAU DE DÉTAIL GÉOGRAPHIQUE
BRUIT	Compartment	Classement sonore (et zones de bruit critique)	Directions départementales des Territoires et de la Mer (DDTM)	Lorraine par département	Classement sonore des infrastructures de transports terrestres	Routes et rues, voies de chemin de fer à partir de niveaux	Arrêté préfectoraux de 1998/1999/2004 pour 54 et 57 (2012 pour voie ferrée), 2001/2012 pour 55 et 88	Bruit	Résolutions fines (<1 km ²)
		Carte de bruit stratégique	Directions départementales des Territoires et de la Mer (DDTM) et agglomération	Grande infrastructure de voie terrestre et agglomération	Carte de bruit par agglomération (routes, voies ferrées, aéroports, industries); + infrastructure concernée	Metz, Nancy et Thionville	Aléatoire selon données d'entrée		
SOL	Site de contamination	BASOL	MEDDE/ alimenté par DREAL	France	Sites et sols pollués ou potentiellement pollués par des activités industrielles	Ensemble de la région	Selon inscription du site dans la base	Les principaux, description de leur potentielle présence	Points
	Compartment	Plan d'épandage	Chambre d'agriculture	Lorraine	Concentration dans les sols de surface	Environ 6 000 données sur la région Lorraine. Répartition hétérogène (utilisé déjà dans la BD ETM pour année < 2010)	Plusieurs années	Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Zn	Points et surfaces
EAU	Compartment	Sise'Eaux	ARS/DGS	France	Qualité de l'eau : concentration eau d'alimentation	Ensemble de la région	Fréquence de mesure faible; plusieurs années	Quelques centaines	UDI, CAP, TTP relié aux communes INSEE
AIR	Source d'émission	Inventaire des émissions	Air Lorraine	Lorraine	Emissions annuelles des polluants, ensemble des sources	Ensemble de la région	2 années; émissions annuelles	ETM, HAP, Benzene, dioxines,PCB, HF, HCl	Communal, cadastral
	Compartment	Modélisation à l'échelle urbaine			Concentrations annuelles moyennes de polluants atmosphériques modélisées	2 zones aux périmètres des PPA	2011 et antérieur	NO ₂ , PM ₁₀	Résolutions fines (<1 km ²)
		Prev/Est			Concentrations atmo. modélisées	Ensemble de la région		NO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5} , O ₃	Cadastral (<1 km ²)

GENÈSE, PRATIQUE ET MUTATION DES ANALYSES DE RISQUES, L'ÉCLAIRAGE DES SHS

Contributeurs

Jean-Christophe
LE COZE,

Jean
ESCANDE,

Christophe
PROUST

Les ingénieurs des grands systèmes à risques, comme le nucléaire, le ferroviaire, l'aéronautique ou encore la chimie ont développé des méthodes d'analyse de risques dans le but d'identifier et d'évaluer les scénarios susceptibles de mener à des incidents ou accidents. Ces méthodes, telles que les « Hazop » pour « *Hazard operability study* » ou les « Amdec » pour « analyse des modes de défaillances et de leur criticité », et autres variantes, sont aujourd'hui largement utilisées dans différentes industries. Cependant, ces méthodes ont été, jusqu'à présent, peu étudiées sur le plan de ce qu'on peut appeler de manière un peu simplifiée, leur pratique. Une recherche à l'Ineris se propose d'y réfléchir à l'aide des sciences humaines et sociales (e.g. ergonomie, sociologie) en éclairant leurs dimensions historique, matérielle, cognitive, organisationnelle et sociale. Quelques résultats de ces recherches sont succinctement présentés dans un contexte de renouvellement du paysage des risques [1; 2; 3].

HISTOIRE DES MÉTHODES

Les méthodes d'analyse de risques ont ceci de commun que leurs principes reposent sur une décomposition des systèmes pour procéder de manière systématique à une analyse des scénarios de défaillance qui pourraient entraîner des conséquences plus ou moins graves. Elles diffèrent néanmoins dans les détails, ce qui est dû pour une grande part aux origines des développements méthodologiques, même si cette histoire est pour le moment assez peu étudiée. L'Hazop, conçue pour l'ingénierie des procédés dans la chimie, propose de faire varier des paramètres clés, comme la température, la pression ou encore la quantité de matière. Ces paramètres permettent de simuler mentalement dans quelle mesure une modification des conditions de fonctionnement des procédés est susceptible de conduire à des comportements non souhaités, dont les conséquences seraient plus ou moins graves (explosion de réacteurs, incendie, etc.). Le but est de concevoir des parades pour prévenir de tels événements.

L'Amdec, conçue pour des systèmes technologiques comme les armes nucléaires ou les avions, procède par une identification des possibilités de défaillances des équipements, et envisage quelles en sont les conséquences potentielles. La différence entre Hazop et Amdec résulte donc pour partie de la nature des systèmes pour lesquels elles ont été développées (déviation de paramètre en ingénierie des procédés, défaillance de composants ou d'équipements dans

l'aviation). Ces approches ne sont pas exclusives mais potentiellement complémentaires. Il est d'ailleurs légitime, au regard des évolutions technologiques (digitalisation, robotisation, transition écologique), de s'interroger sur le besoin de développer de nouvelles méthodes. Avant de commencer à répondre à cette question, procédons à un niveau supplémentaire d'analyse en complément du regard historique, en mobilisant la dimension cognitive de la pratique de l'analyse de risque.

L'IMAGINATION STRUCTURÉE: ENTRE DÉDUCTION, INDUCTION ET ABDUCTION

En effet, si l'on monte d'un cran dans le questionnement et que l'on met les différences cette fois de côté, qu'ont-elles en commun? Il a été dit plus haut qu'elles ont de commun des principes de décomposition et de questionnement systématique. Ces principes ont pour but de passer en revue un grand nombre de possibilités de variations de paramètres ou de défaillances d'équipements, en d'autres termes, l'application de ces principes stimule l'imagination. Pour anticiper les problèmes il faut pouvoir en effet imaginer ce qui peut se passer, mais cette imagination doit malgré tout être orientée, guidée, ce à quoi servent ces principes. Nous définissons donc cette démarche méthodologique inhérente aux analyses de risques « d'imagination structurée » [1]. Sur le plan cognitif, c'est-à-dire sur le plan des processus mentaux ou de pensée, cette imagination mobilise des connaissances théoriques mais aussi tirées du retour d'expérience.

Les scénarios sont à la fois anticipés par des déductions ou des inductions, c'est-à-dire anticipés à partir de lois ou de régularités connues. Par exemple l'équation $PV=nRT$ permet de simuler une possibilité de scénario, « si on a telle montée en température, alors on aura telle conséquence ». Mais l'imagination repose aussi sur des abductions, c'est-à-dire par la formulation d'hypothèses plausibles qui envisagent la concomitance de plusieurs événements ou processus qui pourraient, potentiellement, produire un scénario. Il ne s'agit plus de prédiction au sens strict (aucune loi ne s'applique), mais de scénarios plausibles qu'il faut envisager, en prenant en compte plusieurs événements, pour les prévenir. On se situe dans l'activité créative des analyses de risques, où les analogies avec des cas passés jouent notamment un grand rôle. De ce point de vue, les contextes à la fois matériels et sociaux de cette pratique sont déterminants pour favoriser cette imagination structurée.

L'ANCRAGE MATÉRIEL ET SOCIAL DES ANALYSES DE RISQUES

Maquettes, plans, visite de site ou encore simulation sont autant de dimensions matérielles qui permettent en effet d'exercer cette créativité pour l'anticipation des possibles. En s'aidant de maquettes, il est possible de se représenter mais aussi de simuler, dans le cas de conception de nouvelles installations, plus concrètement que ne leur permettent les expériences de pensées, les futures situations d'exploitation. Les plans, combinés à une visite de site pour voir la réalité qu'ils décrivent, sont également des supports qui aident à procéder aux choix de découpages des installations, à suivre les canalisations, leurs connexions avec réacteurs et bacs, ainsi qu'instruments prévus pour la régulation des procédés. Mais la dimension organisationnelle et sociale de la pratique des analyses de risque est également au cœur de la qualité de cet exercice d'imagination structurée.

Les groupes de travail qui sont constitués et leur animation sont en effet déterminants. Les types d'expertise mobilisée (par exemple la connaissance des pratiques réelles des opérateurs) et la possibilité d'expression de ces différents points de vue en favorisant l'ouverture sur des scénarios incongrus, nécessitent des moyens en temps et en ressources ainsi que des règles d'interactions au sein du groupe. En ce sens, la créativité est collective et ne repose pas seulement sur un individu mais relève d'une imagination distribuée entre plusieurs expertises qui échangent leurs idées, les débattent, s'interpellent et envisagent ensemble des scénarios plausibles.

DE NOUVEAUX BESOINS ?

Ainsi, au-delà de la description méthodologique usuelle qui est proposée des analyses de risques, les recherches menées à l'Ineris montrent la complexité sous-jacente de cette pratique, qui se révèle à la fois cognitive, matérielle, organisationnelle et sociale. Ces explications ne sont pas sans questionner le futur. Quelles sont en effet les évolutions de méthodes et de pratiques (maintenant envisagées sous tous ces angles) que les nouvelles thématiques telles que la malveillance, la digitalisation, de nouveaux systèmes technologiques ou encore les changements climatiques entraînent [2] ? Comment stimuler la créativité lorsque les systèmes sont nouveaux, les connaissances limitées et les retours d'expériences peu nombreux, les menaces inhabituelles, les expertises peu disponibles ou faiblement constituées, les groupes de travail non clairement définis... ? Ce sont à ces questions que les sciences humaines et sociales souhaitent contribuer à apporter des réponses dans les prochaines années.

ABSTRACT /

Risk analysis based on method such as Hazop (hazard operability study) or Fmea (failure mode of analysis) can be analysed as a historical, cognitive, material, organizational and social practice. First, risk analysis methods are historical because they were developed to tackle specific problems such as chemical processes or planes. Their principles translate the technological developments that engineers faced when anticipating unwanted behaviors of engineered systems. These principles provide the disciplined framework for what we call "structured imagination". Second, the practice of risk analysis is cognitive, relying on a complex mix of deductive, inductive and abductive knowledge for which experience, analogies and stories play a central role. Third, there is a strong material aspect to this practice with diagrams, scale models or simulations to coordinate experts shared understanding of the systems. Finally, organizational dispositions and social context must be favorable to experts' interactions in order to imagine a wide range of scenarios. New threats and technologies (e.g. terrorism, natural events, digitalization) challenge the practice of risk analysis and require adaptations.

Références

- [1] Escande, J.; Proust, C.; Le Coze, J.C. 2016. Limitation of current risk assessment methods to foresee emerging risks: towards a new methodology. *Journal of Loss Prevention in the Process Industry*. doi:10.1016/j.jlp.2016.06.008
- [2] Le Coze, J.C. 2017. An essay: societal safety and the global1,2,3. *Safety Science*. <https://doi.org/10.1016/j.ssci.2017.09.008>
- [3] Le Coze, J.C. 2017 Vive la diversité! High Reliability Organisation (HRO) AND Resilience Engineering (RE). *Safety Science*. doi:10.1016/j.ssci.2016.04.006

CONTRIBUTION DU RAYONNEMENT THERMIQUE AUX EXPLOSIONS DE POUSSIÈRES MÉTALLIQUES: ANALYSE ET EXPÉRIMENTATIONS

Contributeur
Christophe
PROUST

La question du rôle du rayonnement thermique dans la propagation des flammes à travers les nuages de poussières combustibles est ouverte depuis des décennies. Le sujet est d'intérêt car les méthodes de lutte contre les explosions de poussières reposent fondamentalement sur l'hypothèse que le mécanisme de propagation de la flamme est un équilibre entre la puissance thermique transférée par conduction thermique de la zone de combustion vers les réactifs et la puissance thermique libérée par la réaction chimique. Si le transfert de chaleur par rayonnement devient dominant, alors l'efficacité des méthodes de protection classiquement mises en œuvre pourrait être remise en cause. Jusqu'à présent, de nombreux freins ont hypothéqué l'étude du sujet telles l'instrumentation des flammes de poussières, la genèse de conditions expérimentales bien contrôlées et les difficultés théoriques et mathématiques du problème. Dans le projet RADIANT, subventionné par la région Picardie (avant le regroupement au sein de la grande région Hauts-de-France), des développements méthodologiques spécifiques ont été réalisés pour lever ces verrous :

- la mise en œuvre de la méthode des éléments discrets (MED) pour mettre au point un outil d'analyse théorique de la phénoménologie (lois de transfert de rayonnement, effets de la géométrie de la flamme...) sous la forme « d'expériences numériques »;
- la mise au point d'une installation d'essai permettant de produire des nuages de particules calibrés, d'observer les flammes et d'en mesurer les

principales caractéristiques (rayonnement, températures, vitesse, forme, dynamique).

L'Ineris a collaboré étroitement avec l'UTC (Université de technologie de Compiègne) et l'UPJV (Université Picardie Jules Vernes) pour y parvenir.

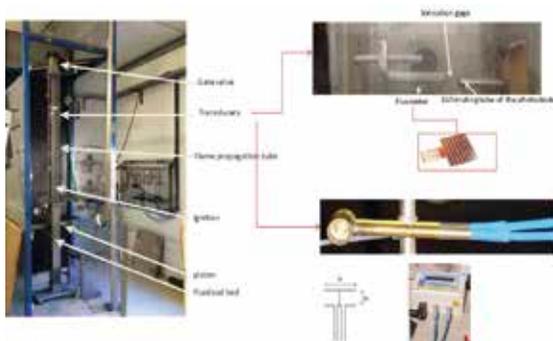
PHÉNOMÉNOLOGIE

L'analyse des phénomènes a permis de constituer le champ d'hypothèses et de collecter les données de combustion nécessaires pour l'établissement de l'outil numérique et le choix des conditions d'essai [1; 2]. Il ressort de ce travail que la prise en compte du rayonnement thermique dans le processus de propagation de la flamme pourrait se traduire par une accélération très brutale de la flamme notamment lorsque la flamme se plisse sur elle-même par exemple sous l'effet des instabilités ou de la turbulence ce qui a pour effet de « forcer » le réchauffage puis l'inflammation des portions du nuage contenues dans les « plis » de la flamme. Cependant, ce résultat reste très qualitatif tant les modèles de transferts radiatifs employés restent schématiques. Ces derniers reposent en effet sur l'hypothèse de Beer-Lambert théoriquement valable uniquement pour des faisceaux lumineux parallèles.

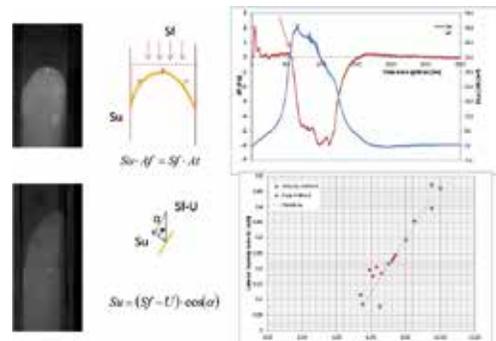
OBSERVATIONS EXPÉRIMENTALES

Pour vérifier les hypothèses de base de l'approche théorique et pour tenter d'observer l'effet du transfert par rayonnement thermique sur l'accélération de la flamme, une installation expérimentale originale a été employée (figure 1). Il s'agit d'un tube vertical

Figure 1 / Tube de propagation de flamme (gauche), instrumentation du front de flamme avec le fluxmètre en couche mince (haut droit) et la sonde Pitot (bas droit).



Méthode du tube (quart gauche haut) et du triangle des vitesses (quart gauche bas), pression dynamique et flux thermique (quart droit haut) et comparaison des résultats des deux méthodes (quart droit bas).



de 10 cm de diamètre, transparent, alimenté par un lit fluidisé de particules. Au-delà de techniques de visualisation rapide, une instrumentation nouvelle a été mise au point. Elle comporte un fluxmètre à couche mince et une méthode, mise au point à cette occasion, de mesure directe de la vitesse de combustion par différence entre la vitesse spatiale de la flamme et de l'écoulement en amont du front (par une sonde de Pitot). Des expériences ont été conduites avec des mélanges méthane-air ensemencés de particules inertes non gazéifiables (SiC et Al₂O₃) afin de déterminer le mode de transfert radiatif entre les particules chauffées par les gaz de combustion et celles, encore froides, situées dans les réactifs puis avec des mélanges air-particules d'aluminium. Il a été découvert [3; 4] d'une part que le mode de transfert radiatif n'obéit pas du tout à l'approximation de Beer-Lambert et d'autre part que non seulement le transfert par rayonnement thermique peut sensiblement augmenter la vitesse de combustion dans les prémélanges gazeux (figure 2) mais peut aussi provoquer une rapide auto-accélération dans les suspensions de particules d'aluminium et d'air (figure 3).

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Ces travaux remettent profondément en cause les approches disponibles non seulement pour prendre en compte l'effet des transferts par rayonnement thermique sur la propagation des flammes mais aussi sur les représentations couramment admises pour décrire la physique du rayonnement thermique. L'objectif est donc de parvenir à mettre en place une nouvelle approche de ces phénomènes. Compte tenu de la complexité du sujet, multiphysique et multi-échelles, l'Ineris développe une méthode de simulation originale couplant deux méthodes numériques :

- la méthode des éléments discrets pour représenter les échanges radiatifs entre les particules et les échanges diffusifs entre les particules et la phase gazeuse;
- la méthode des différences finies pour représenter les transferts diffusifs et les réactions chimiques dans la phase gazeuse.

Références

[1] Proust, C.; Guessasma, M.; Saleh, K.; Fortin, J. (2013), Amplification des effets des explosions sous l'effet du rayonnement thermique, Communication (avec poster) au XIV^e congrès de la SFGP, Lyon, octobre 2013, France

[2] Ben Moussa, R.; Proust, C.; Saleh, K.; Guessasma, M.; Fortin, J. (2017), Physical mechanisms involved into the flame propagation process through aluminum dust-air clouds: a review, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 45, 9-28

[3] Proust, C.; Ben Moussa, R.; Guessasma, M.; Saleh, K.; Fortin, J. (2017), Thermal radiation in dust flame propagation, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 49, 896-904

[4] Proust, C.; Ben Moussa, R.; Guessasma, M.; Saleh, K.; Fortin, J. (2017), Potential accelerating effect of thermal radiation in dust flame propagation : some experimental evidence, Oral communication at the 26th ICDERS, July-August 2017, Boston, USA

ABSTRACT /

In this research program, it was intended to clarify the role of the heat exchanges by thermal radiation inside a dust flame. If this exchange mode were dominant (as compared to the standard heat transfer by thermal conduction), unknown explosion regimes may ensue, questioning the efficiency of the well-known explosion mitigation techniques. According to recent studies, the implication of heat transfer by thermal radiation may lead to severe flame acceleration but the theoretical basis are fragile and such predictions do not seem to be supported by experimental evidence. Aluminum dust is a good candidate to study this problem because of the presence of solid residues and high combustion temperature. Experiments were performed to investigate these points which reveal different flame propagation regimes and, in particular, a severe flame acceleration when the particle loading is large enough. Another finding is that the standard Beer-Lambert law largely employed to represent the transmission of the thermal radiation through the dust cloud is not satisfactory. This work continues on the numerical side, coupling the Discrete Element Method and the Finite Differences to investigate the physics of such flames and propose new models.

Figure 2 / Transferts radiatifs (haut droit) à travers une flamme de méthane ensemencée de particules de SiC (13 microns), flux maximum (haut gauche) et effet sur la vitesse de combustion (bas droit).

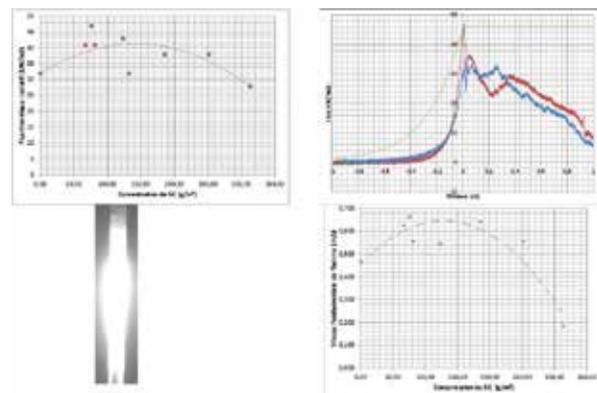
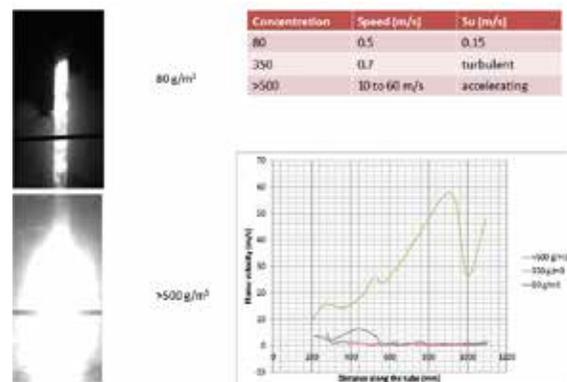


Figure 3 / Régimes de propagation d'une flamme se propageant dans un mélange Al-air (10 microns).





**CARACTÉRISER LES DANGERS
DES SUBSTANCES ET PRODUITS**
ET LEURS IMPACTS SUR L'AIR, L'EAU,
LES SOLS ET LES ORGANISMES VIVANTS



Développement de modèles QSPR pour la prédiction des propriétés de tensioactifs dérivés de sucres	50
Modèle de la gestion de l'énergie sur l'ensemble du cycle de vie de l'épinoche à trois épines	52
Évaluer l'effet d'un contaminant en mésocosmes : des outils d'analyse statistique plus pertinents à l'échelle des communautés	54
Modéliser l'exposition environnementale et les imprégnations des populations à des substances chimiques : l'outil MERLIN-Expo	56
De l'importance de la spéciation de la fraction organique pour l'évaluation des sources de particules dans l'air ambiant	58
Méthode normalisée TRIADE d'évaluation du risque pour les écosystèmes du sol au travers d'un cas appliqué	60
Évaluation de la reproductibilité des approches « read across » entre évaluateurs	62

DÉVELOPPEMENT DE MODÈLES QSPR POUR LA PRÉDICTION DES PROPRIÉTÉS DE TENSIOACTIFS DÉRIVÉS DE SUCRES

Contributeurs

Théophile GAUDIN,

Patricia ROTUREAU,

Guillaume FAYET

La substitution des ressources fossiles par des matières renouvelables, notamment issues de la biomasse, est un enjeu de recherche important. Si la majorité des tensioactifs utilisés dans les détergents et en cosmétique provient aujourd'hui des ressources fossiles, les tensioactifs issus de la bioraffinerie, notamment les tensioactifs dérivés de sucres, constituent de bons candidats pour substituer les tensioactifs pétro-sourcés [1].

Aussi, l'Ineris s'est engagé dans le projet AMPHIPRED (2013-2016), financé par l'ITE PIVERT piloté par l'UTC de Compiègne et en collaboration avec l'université d'Amiens et l'ESCOM. Ce projet vise la prédiction des propriétés amphiphiles de ces tensioactifs. En effet, l'accès à ces propriétés à partir de leur structure moléculaire permet d'évaluer *a priori* les performances potentielles de nouveaux tensioactifs biosourcés dans des formulations industrielles avant même leur synthèse [2].

Dans le cadre des travaux de doctorat de Théophile Gaudin (collaboration UTC-Ineris), la méthode prédictive *Quantitative Structure Property Relationship* (QSPR), qui cherche à relier de manière quantitative une propriété expérimentale à la structure moléculaire d'une substance, a été utilisée. Si différents modèles QSPR existaient déjà pour prédire certaines propriétés des tensioactifs pétro-sourcés [3], aucun modèle validé n'avait été identifié pour les tensioactifs dérivés de sucres. L'objectif de ces travaux était de développer de tels modèles, en s'appuyant sur l'expertise de l'Ineris quant à leur développement et leur validation pour les propriétés physico-chimiques dangereuses des substances chimiques [4].

MÉTHODE

Une base de données (en cours de valorisation avec la SAS PIVERT sous le nom d'AmphInnov) contenant 2626 données issues de la littérature pour 24 propriétés amphiphiles et 659 tensioactifs dérivés de sucres a été collectée. Comme montré en **figure 1**, quatre propriétés constituant de bons indicateurs des performances des tensioactifs dans les formulations ont ensuite été étudiées: la concentration micellaire critique (CMC), la tension de surface à la CMC (γ_{CMC}), l'efficacité (pC_{20}) et le point de Krafft (T_K). Pour chacune d'elles, différents modèles QSPR ont été développés en fonction de la nature des descripteurs utilisés: d'une part, selon qu'ils sont basés sur l'intégralité de la structure du tensioactif ou sur les structures de la tête polaire et de la chaîne alkyle prises séparément (**figure 2**), et d'autre part, selon le niveau de complexité des descripteurs moléculaires, depuis les descripteurs constitutionnels. Ces derniers se calculent à partir de la simple structure semi-développée de la molécule, aux descripteurs issus de calculs de chimie quantique. Afin d'évaluer de manière fiable les performances de ces modèles, chaque modèle a fait l'objet d'une série de validations, incluant en particulier une validation externe robuste de son pouvoir prédictif en ce qui concerne des molécules non utilisées pour l'ajustement du modèle.

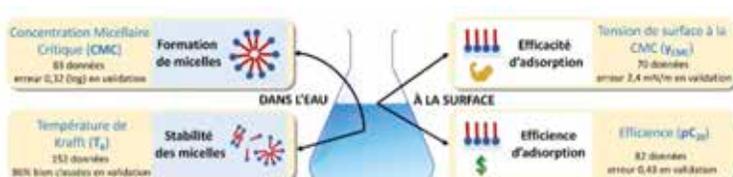
RÉSULTATS

Des modèles QSPR satisfaisants ont été obtenus pour les quatre propriétés étudiées. Pour la CMC, la tension de surface à la CMC et l'efficacité, il s'agit de modèles multilinéaires prédisant une valeur quantitative. Un exemple de modèle simple est le modèle QSPR suivant (Eq. 1), développé pour la prédiction de la CMC à l'aide de descripteurs constitutionnels calculés séparément pour la tête polaire et la chaîne alkyle:

$$\log CMC = -0,027 M_{w,c} - 20n_{rel,S,h} - 63n_{rel,Single,c} + 64,8$$

où $M_{w,c}$ et $n_{rel,Single,c}$ sont la masse molaire et le nombre relatif de liaisons simples de la chaîne alkyle et $n_{rel,S,h}$ est le nombre relatif d'atomes de soufre de la tête polaire. Comme montré en **figure 3**, ce modèle présente un bon pouvoir prédictif avec une erreur standard de 0,36 (log) pour les 27 molécules du jeu de validation.

Figure 1 / Synthèse des résultats obtenus pour la prédiction des propriétés des surfactants dérivés de sucre au cours du projet AMPHIPRED.



Si de tels modèles sont simples à mettre en œuvre, l'emploi de descripteurs quantiques permet un gain en pouvoir prédictif parfois important. Par exemple, pour γ CMC, l'erreur standard en validation du meilleur modèle dédié à γ CMC incluant les descripteurs quantiques est de 2,4 mN/m tandis que, pour le meilleur des modèles sans descripteur quantique, celle-ci est de 2,9 mN/m.

Pour le point de Krafft (T_K), des arbres de décision ont été développés classant la molécule selon que la valeur de T_K est inférieure ou supérieure à la température ambiante. Par exemple, l'arbre de décision en **figure 4** a été obtenu sur la base des mêmes types de descripteurs que ceux employés pour obtenir l'Eq. 1, et dispose aussi d'un bon pouvoir prédictif, avec 78 % des 51 molécules du jeu de validation correctement classées.

Ces travaux ont donné lieu à deux publications [5; 6] et à plusieurs communications (comme celles présentées aux congrès CESIO [7], ISGC [8] et SFGP [9]). De plus, Théophile Gaudin a reçu le prix de thèse Guy Deniérou de l'UTC en avril 2017. Les modèles développés permettent d'aiguiller les synthèses de molécules biosourcées par exemple en fonction d'un cahier des charges de propriétés recherchées comme cela est étudié actuellement dans le projet AMPHIFOAM (2016-2019).

Références

[1] Rosen, M.J.; Kunjappu, J.T.; *Surfactants and Interfacial Phenomena*, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., 2012.

[2] Fayet, G.; Rotureau, P. How to use QSPR type approaches to predict properties in the context of Green Chemistry, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 10 (2016) 738-752.

[3] Creton, B. Prediction of Surfactants' Properties using Multiscale Molecular Modeling Tools: A Review, *Oil & Gas Science and Technology - IFP Energies nouvelles*, 67 (2013) 1-14.

[4] Dearden, J.C.; Rotureau, P.; Fayet, G. QSPR prediction of physico-chemical properties for REACH, *SAR and QSAR in Environmental Research*, 24 (2013) 279-318.

[5] Gaudin, T.; Rotureau, P.; Pezron, I.; Fayet, G. New QSPR Models to Predict the Critical Micelle Concentration of Sugar-Based Surfactants, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55 (2016) 11716-11726.

[6] T. Gaudin, P.; Rotureau, I.; Pezron, G.; Fayet, Conformations of n-alkyl- α/β -d-glucopyranoside surfactants: Impact on molecular properties, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1101 (2017) 20-29.

[7] Gaudin, T.; Lu, H.; Van Hecke, E.; Drelich, A.; Dao, T.T.; Rotureau, P.; Benali, M.; Bonnet, V.; Wadouachi, A.; Pourceau, G.; Fayet, G.; Pezron, I. Data analysis of sugar-based surfactant properties: towards quantitative structure property relationships, *CESIO 2015 - 10th World Surfactant Congress and Business Convention*, 1-3 juin 2015, Istanbul (Turquie).

[8] Gaudin, T.; Fayet, G.; Rotureau, P.; Pezron, I. New QSPR models to predict the amphiphilic properties of sugar-based surfactants, *International Symposium on Green Chemistry*, 16-19 mai 2017, La Rochelle (France).

[9] Gaudin, T.; Rotureau, P.; Pezron, I.; Fayet, G. Modèles QSPR pour la prédiction des propriétés des tensioactifs dérivés de sucre, *16^e Congrès de la Société française de génie des procédés*, 11-13 juillet 2017, Nancy (France).

ABSTRACT /

Substitution of petroleum-based surfactants by biobased alternatives is a promising field of research and applications. Predictive models can help to identify good candidates for such substitution. But, no validated model has been identified for biobased surfactants.

In AMPHIPRED project (2013-2016), based on a large dataset of 2626 experimental values, a series of new predictive quantitative structure-property relationships (QSPR) models were developed for four amphiphilic properties of sugar-based surfactants, an important family of biobased surfactants.

A series of promising QSPR models were obtained for each property, from models with simple constitutional descriptors favouring easy applications, to quantum chemical based ones providing better predictive power. For the critical micelle concentration (CMC), the surface tension at CMC and the adsorption efficiency, multi-linear regressions were developed, to achieve quantitative predictions. For the Krafft temperature (T_K), decision trees enabled qualitative prediction to evidence if T_K is higher or lower than room temperature.

These models open new perspectives towards in silico design and screening of new bio-based surfactants with target properties as studied in AMPHIFOAM project (2016-2019).

Figure 2 / Structure moléculaire d'un tensioactif dérivé de sucre, l'octyl- β -D-glucoside, et des fragments modélisés relatifs à sa tête sucre et à sa chaîne alkyle.

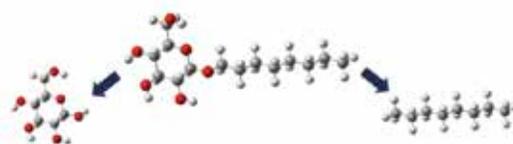


Figure 3 / Concentrations micellaires critiques (en log) expérimentales et calculées par le modèle QSPR simple présenté en Eq. 1.

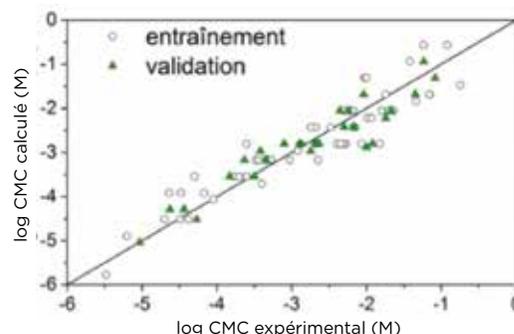
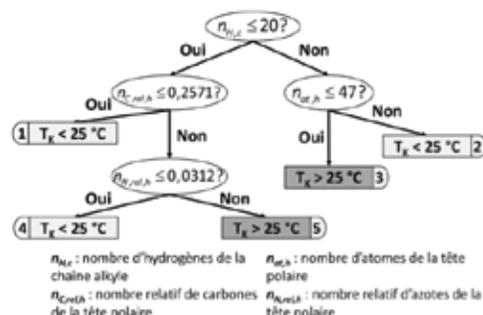


Figure 4 / Arbre de décision classant les tensioactifs dérivés de sucres selon leur température de Krafft supérieure ou inférieure à 25°C.



MODÈLE DE LA GESTION DE L'ÉNERGIE SUR L'ENSEMBLE DU CYCLE DE VIE DE L'ÉPINOCHÉ À TROIS ÉPINES

Contributeur
Rémy
BEAUDOUIN

L'épinoche à trois épines (*Gasterosteus aculeatus*) est un petit poisson téléostéen qui constitue un composant majeur des chaînes alimentaires des écosystèmes aquatiques peu profonds dans l'hémisphère nord. Ce poisson est aussi un des modèles expérimentaux les plus utilisés en écologie, évolution et éthologie aquatique. En particulier, l'épinoche à trois épines est une espèce sentinelle utilisée pour la surveillance des milieux aquatiques [1] et une des espèces de poissons dont la dynamique de population peut être étudiée en mésocosmes [2].

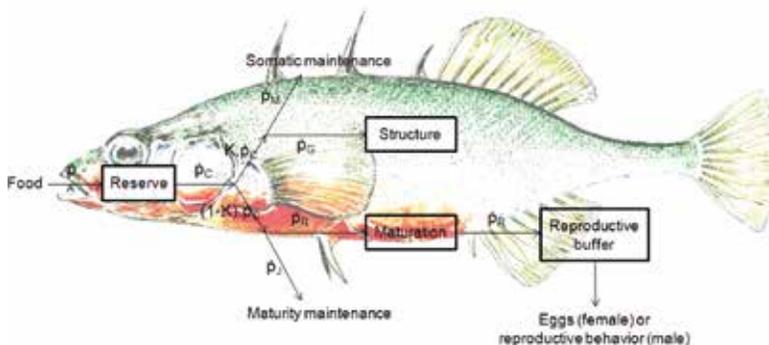
Les modèles mathématiques sont de plus en plus utilisés en évaluation des risques, notamment pour extrapoler les effets mesurés sur des individus lors d'expériences en laboratoire aux conséquences à long terme sur la viabilité des populations [3; 4]. Dans ce contexte, les modèles mécanistes de gestion de l'énergie par les organismes, qui prennent en compte des facteurs environnementaux, offrent une description réaliste du cycle de vie des individus. Ils peuvent également contribuer à réduire les données nécessaires pour développer un modèle de dynamique de population lorsqu'ils relient explicitement l'alimentation, la croissance et la reproduction [3] et identifier les effets des composés toxiques sur les processus physiologiques des organismes [5].

OBJECTIF ET MÉTHODE

L'objectif de l'étude était de développer un modèle basé sur la théorie DEB (*Dynamic Energy Budget*, figure 1) de l'ensemble du cycle de vie de l'épinoche à trois épines pour prédire ses principaux processus physiologiques (croissance, reproduction, puberté) dans différentes conditions environnementales (i. e., température de l'eau et ressources trophiques). Pour cet objectif, l'Ineris a produit expérimentalement des données sur la croissance, le développement des juvéniles, la maturité sexuelle et la reproduction des épinoches [6].

Avant de calibrer le modèle sur ces données, une analyse de sensibilité du modèle a été effectuée (figure 2). Cette analyse a montré que les principaux paramètres influençant la croissance étaient les mêmes pour les femelles et pour les mâles. Par exemple, le paramètre qui représente la température optimale du poisson, est un des paramètres les plus influents, ce qui souligne l'importance de cette variable de l'environnement. En ce qui concerne la reproduction, le paramètre qui détermine la quantité d'énergie ingérée par unité de surface des organismes (*via* la nourriture), a l'influence la plus importante sur le nombre d'œufs produits par les femelles. Ces observations pointent la nécessité d'une mesure la plus certaine possible de ces deux variables lors des expériences utilisées pour développer le modèle, puis, par la suite, pour l'utiliser lors des expériences en mésocosmes.

Figure 1 / Schéma décrivant la théorie « *Dynamic Energy Budgets* ». Les flèches représentent les différents flux d'énergie.



Le modèle a ensuite été calibré à l'aide de statistiques bayésiennes en utilisant le logiciel MCSim. Lors de cette calibration, les trois chaînes de Markov Monte-Carlo se sont stabilisées autour des mêmes distributions *a posteriori*, différentes des distributions *a priori* pour quasiment tous les paramètres. Les données ont donc permis d'informer l'ensemble des paramètres du modèle à l'exception de la taille initiale de l'embryon dans l'œuf. Ainsi, le modèle a permis de mieux caractériser certains processus physiologiques en éliminant les facteurs confondants. Par exemple, il a été déterminé que la taille maximale en conditions optimales des épinoches mâles et femelles était de 56,3 mm et 63,3 mm, respectivement. De même, la taille à la maturité a été estimée proche de 33 mm quel que soit le sexe.

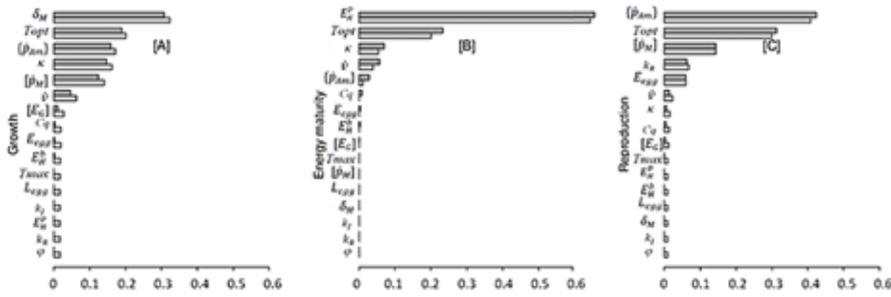


Figure 2 /

Résultats de l'analyse de sensibilité sur trois variables: (A) la croissance, (B) la densité énergétique et (C) la production d'œufs. L'analyse de sensibilité a été réalisée en utilisant la méthode de Sobol sur un plan d'expérience de type Monte-carlo (n = 10,000). Les distributions des paramètres étaient uniformes et les bornes étaient ± 10 % la valeur *a priori* du paramètre. Les variables ont été mesurées à 5 temps différents: 20, 50, 150, 400 et 650 jours après la fécondation des œufs. La longueur des barres est proportionnelle à l'influence du paramètre sur la variable étudiée.

RÉSULTATS

Après calibration, le modèle DEB a démontré de très bonnes qualités de prédiction des différentes données obtenues en laboratoire ou lors des expériences en mésocosmes (figure 3). Globalement, malgré le grand nombre de paramètres et les corrélations relativement élevées entre ces paramètres, le modèle DEB calibré permet de simuler l'ensemble du cycle de vie de l'épinoche à trois épines et de prédire ses principaux processus physiologiques [6].

Le modèle DEB sert maintenant de base pour développer un modèle de dynamique de population prédisant des effets des substances sur la viabilité des populations d'épinoches. Des expériences conduites dans les écosystèmes expérimentaux lotiques de l'Ineris ont permis d'obtenir plusieurs jeux de données complets sur des populations d'épinoches à trois épines exposées à différentes molécules. L'ensemble de ces données offre l'opportunité de développer une série de modèles mathématiques (TK/TD, DEB, IBM) pour intégrer différentes échelles biologiques, différents types d'observations et les relations entre ces variables (figure 4).

Références

[1] Bado-Nilles, A.; Techer, R.; Porcher, J. M.; Geffard, A.; Gagnaire, B.; Betouille, S. and Sanchez, W. 2014. Detection of immunotoxic effects of estrogenic and androgenic endocrine disrupting compounds using splenic immune cells of the female three-spined stickleback, *Gasterosteus aculeatus* (L.). *Environmental Toxicology and Pharmacology* 38:672-683.

[2] de Kermoyan, G.; Joachim, S.; Baudoin, P.; Lonjaret, M.; Tebby, C.; Lesaulnier, F.; Lestremay, F.; Chatellier, C.; Akrou, Z.; Pheron, E.; Porcher, J.-M.; Pery, A. R. R. and Beaudouin, R. 2013. Effects of bisphenol A on different trophic levels in a lotic experimental ecosystem. *Aquatic Toxicology* 144:186-198.

[3] Beaudouin, R.; V. Dias, J. M. Bonzom, and A. Pery. 2012. Individual-based model of *Chironomus riparius* population dynamics over several generations to explore adaptation following exposure to uranium-spiked sediments. *Ecotoxicology* 21:1225-1239.

[4] Beaudouin, R.; Goussen, B.; Piccini, B.; Augustine, S.; Devillers, J.; Brion, F. and Pery, A. R. R. 2015. An Individual-Based Model of Zebrafish Population Dynamics Accounting for Energy Dynamics. *Plos One* 10.

[5] Goussen, B.; Beaudouin, R.; Dutilleul, M.; Buisset-Goussen, A.; Bonzom, J.-M.; and Péry, A. R. R. 2013. DEBtox modelling applied to *Caenorhabditis elegans*: a case study on uranium.

[6] LeIoutre, C.; Péry, A. R. R.; Porcher, J.-M. and Beaudouin, R. 2016. A bioenergetics model of the entire life cycle of the three-spined stickleback, *Gasterosteus aculeatus*. *Ecology of Freshwater Fish*:n/a-n/a.

ABSTRACT /

A whole life-cycle bioenergetic model based on the dynamic energy budget (DEB) theory was developed for the three-spined stickleback (*Gasterosteus aculeatus*). Experiments on growth and reproduction were performed: adult and juvenile growth, size at first reproduction and amount of eggs spawned by females were monitored under different feeding levels and water temperatures. The DEB parameters were estimated using Bayesian statistics based on the data produced during these experiments and on data found in the literature. The model fitted accurately the different datasets used for the calibration process and, in addition, predicted accurately the datasets used to assess its predictability. Our bioenergetic model of the whole life cycle of the three-spined stickleback accounting for environmental variations could contribute in many ways to improved ecological assessment: supporting change of scale from individual to populations, developing new biomarkers of exposure and effect, analysing ecotoxicity tests with biology-based models.

Figure 3 /

Evaluation des capacités prédictives du modèle DEB de l'épinoche à trois épines. Les jeux de données représentés ont été exclus de l'étape de calibration. Les points noirs ou lignes représentent les prédictions (médiane et IC95%) et les cercles représentent les données observées.

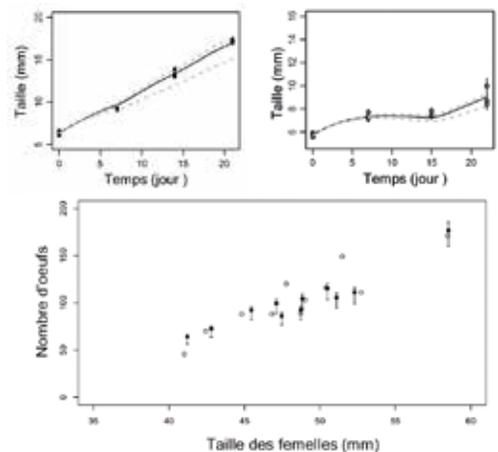
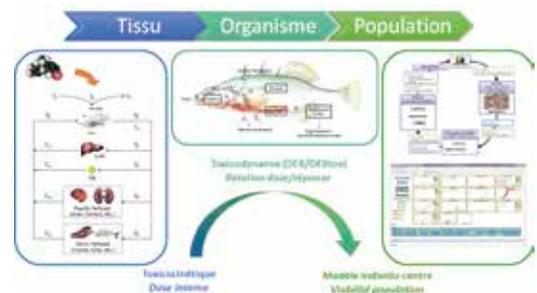


Figure 4 /

Schéma décrivant l'intégration des différents modèles afin de prédire les effets des substances chimiques sur la viabilité des populations.



ÉVALUER L'EFFET D'UN CONTAMINANT EN MÉSOCOSMES: DES OUTILS D'ANALYSE STATISTIQUE PLUS PERTINENTS À L'ÉCHELLE DES COMMUNAUTÉS

Contributeur

Cleo
TEBBY

La France est le pays qui consomme le plus de médicaments en Europe et les stations d'épuration ne permettent pas d'éliminer tous les résidus. Ainsi, une vingtaine de substances a été retrouvée au moins une fois dans des eaux potables à des concentrations variant de quelques nanogrammes par litre pour les eaux souterraines et de surface à quelques centaines de nanogrammes par litre pour les effluents de station de traitement des eaux usées. Les données écotoxicologiques permettant d'évaluer les risques liés aux substances pharmaceutiques sont cependant peu nombreuses. La maîtrise des risques liés aux résidus de médicaments était un engagement du Grenelle de l'environnement, repris par le premier plan national sur les résidus de médicaments dans l'eau. L'un des objectifs de ce plan était d'acquérir des connaissances scientifiques et techniques relatives à la présence, au devenir et aux effets des résidus de médicaments sur l'environnement et la santé humaine, afin d'évaluer le risque pour les écosystèmes et l'homme. Le projet DOREMIPHARM, financé par l'Agence nationale de sécurité du médicament (ANSM), a été à l'origine de la production de données d'écotoxicologie et de l'adaptation d'outils statistiques à des fins d'évaluation des risques pour les écosystèmes aquatiques.

MÉTHODE

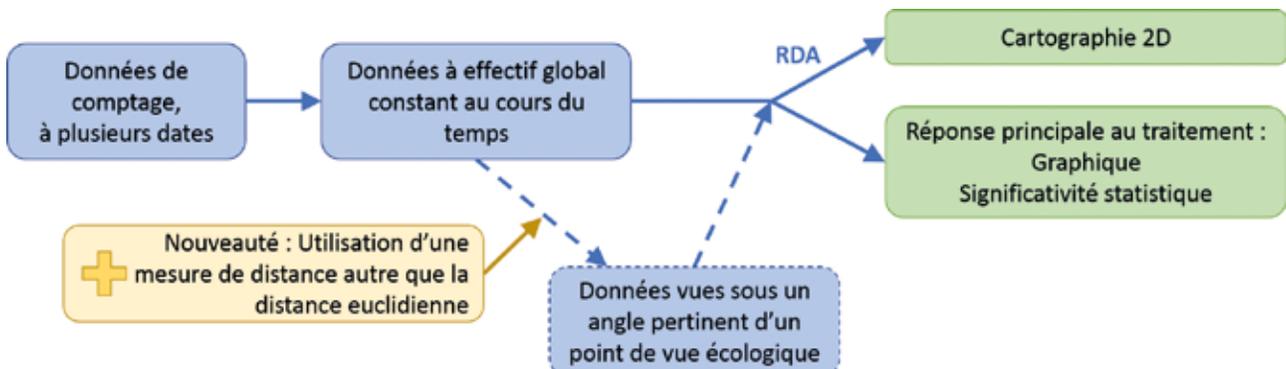
L'Ineris dispose d'installations extérieures appelées mésocosmes, qui offrent la possibilité de reconstituer

et de maintenir des écosystèmes aquatiques de type rivière. Dans le cadre du projet DOREMIPHARM, les effets du diclofénac, un anti-inflammatoire, sur les populations aquatiques ont été étudiés. Les populations de macro-invertébrés ont été suivies par piégeage mensuel dans les douze mésocosmes de l'Ineris de mars à octobre, par identification et dénombrement. Les espèces présentes sont notamment des gastéropodes, des vers annélides, des larves de diptères (mouches), etc. Ces mésocosmes ont été contaminés de façon continue avec du diclofénac, suivant l'un des niveaux de dose suivants : témoins, 0,1, 1 et 10 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Pour chaque niveau de dose, l'Ineris dispose de trois répliques suivies au cours du temps.

Les données d'abondance produites en mésocosme sont généralement analysées avec des techniques statistiques multivariées, dites aussi factorielles. Ces méthodes descriptives résument l'information de façon visuelle et intuitive. Il s'agit d'établir une cartographie des relevés mensuels de l'ensemble des mésocosmes en fonction de la composition des communautés de macro-invertébrés afin d'identifier les différences d'évolution entre les mésocosmes traités et les mésocosmes témoins.

De plus, plutôt que laisser l'analyse identifier les différences les plus marquantes entre les relevés, il est possible de la contraindre à représenter les variations liées au traitement, en faisant abstraction des variations temporelles observées dans l'ensemble des mésocosmes. Ainsi la méthode PRC

Figure 1 /
Méthode PRC.



(Principal Response Curves) [1], un cas particulier de RDA (Redundancy Analysis), a été développée spécifiquement pour l'analyse des données en mésocosme.

Quelle que soit la méthode utilisée, la manière de quantifier les différences entre communautés a un impact très important sur les résultats de l'analyse. Ces différences peuvent être quantifiées de plusieurs manières, suivant que l'on s'intéresse à l'abondance totale ou à l'abondance relative des différentes espèces. La distance euclidienne, utilisée classiquement, met l'accent sur les différences d'abondance totale au détriment de l'abondance relative des espèces de macro-invertébrés. En outre, elle n'est pas recommandée pour analyser des données contenant de nombreuses valeurs nulles, telles que les données de mésocosme.

RÉSULTATS

Il a été montré [2] comment d'autres mesures de dissimilarité, utilisées de façon courante en écologie, peuvent être intégrées à la méthode PRC (figure 1). Il a été mis en évidence quelles caractéristiques des données sont soulignées par les différentes mesures de dissimilarité.

Les résultats des analyses (figure 2) peuvent être utilisés pour déterminer une NOEC (No Adverse Effect Concentration) à l'échelle de la communauté. Les résultats montrent que la NOEC, qui est le rendu final de l'analyse pour l'évaluation des risques, peut dépendre de la mesure de dissimilarité choisie. En effet, l'exemple de la distance de Hellinger a été utilisé, qui se focalise sur des différences de composition des communautés plutôt que sur des différences d'abondance des espèces principales. Dans le cas des données sur le diclofénac, la NOEC de la communauté de macro-invertébrés était plus faible avec cette distance qu'avec une mesure plus classique.

De façon générale, ce travail a permis d'une part de formuler des recommandations pour le choix d'une mesure de dissimilarité en fonction des caractéristiques de chaque jeu de données et des problématiques étudiées et, d'autre part, d'insister sur l'importance de l'analyse descriptive préalable des données dans le cas d'une analyse multivariée.

Références

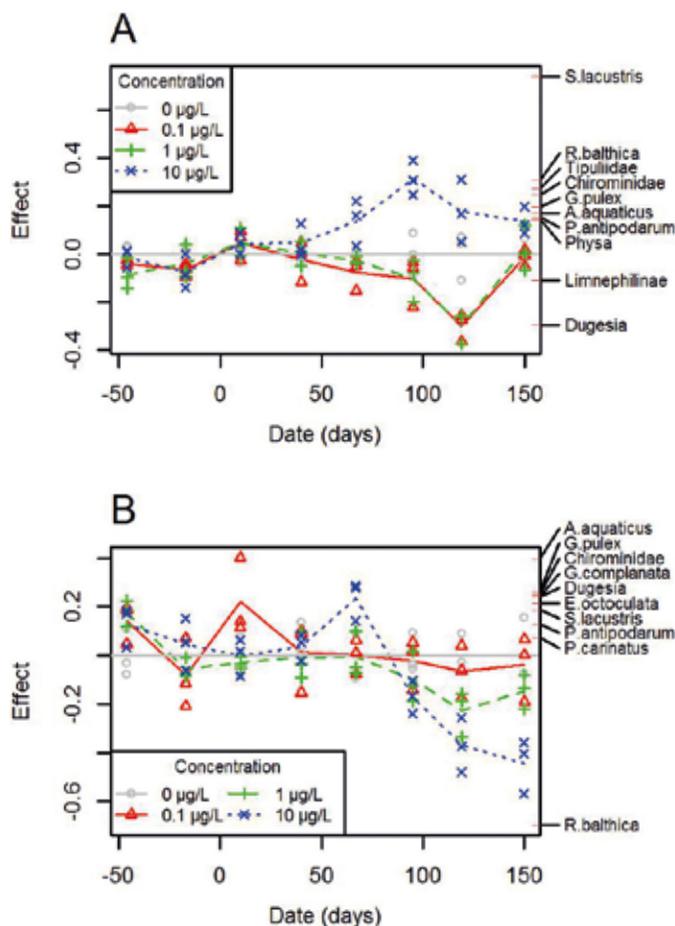
- [1] Van den Brink, P. J. and C. J. F. Ter Braak (1999). Principal response curves: Analysis of time-dependent multivariate responses of biological community to stress. *Environmental Toxicology and Chemistry* 18(2): 138-148.
- [2] Tebby, C., Joachim, S.; Van den Brink, P. J.; Porcher, J.-M. and Beaudouin, R. (2017). Analysis of community-level mesocosm data based on ecologically meaningful dissimilarity measures and data transformation. *Environmental Toxicology and Chemistry* 36(6): 1667-1679.

ABSTRACT /

High medicine consumption in France and inefficient wastewater treatment mean that many pharmaceutical compounds are discharged into surface water. The effect on aquatic ecosystems is largely unknown. Ineris can reproduce river ecosystems in its outdoor facilities, called mesocosms. Ineris studied the effect of Diclofenac, an anti-inflammatory drug, on seasonal changes in the mesocosms.

The data generated are traditionally analysed by multivariate statistics. We modified an existing method which is designed for mesocosm data, the Principal Response Curve (PRC) method, thus allowing for focusing on changes in community structure rather than on changes of total abundance. Better understanding of the underlying methods provides keys to knowing how to adapt the PRC method to various data characteristics. The objective is to increase relevance of the community-level No Observed Effect Concentration (NOEC), the final output used in risk assessment.

Figure 2 / Première courbe de réponse principale (PRC) obtenue avec la distance euclidienne sur des données log-transformées (A) et avec la distance de Hellinger (B). Seules les 10 espèces qui contribuent le plus à cette courbe sont représentées.



MODÉLISER L'EXPOSITION ENVIRONNEMENTALE ET LES IMPRÉGNATIONS DES POPULATIONS À DES SUBSTANCES CHIMIQUES: L'OUTIL MERLIN-EXPO

Contributeur
Céline
BROCHOT

Le projet 4FUN financé dans le cadre du 7^e programme-cadre de l'Union européenne a produit un logiciel nommé MERLIN-Expo permettant de construire des scénarios complexes d'exposition des milieux environnementaux, de la faune sauvage et de l'homme. L'objectif était de fournir aux décideurs et évaluateurs de risque un outil intégré pouvant gérer plusieurs sources et cibles de pollution et caractériser les incertitudes à chaque étape du processus d'exposition [1].

MERLIN-Expo se compose d'une bibliothèque de modèles dédiés aux milieux récepteurs abiotiques (eaux de surface, sols, air extérieur), aux milieux d'intérêt pour l'exposition humaine (cultures, élevage), ainsi qu'à la faune (les invertébrés, les poissons) et aux humains [2]. Ces modèles peuvent être couplés pour créer une grande diversité de scénarios d'exposition (figure 1). Une documentation standardisée de chaque modèle ainsi que des outils de formation sont disponibles en ligne¹.

OBJECTIFS

Les principaux défis auxquels MERLIN-Expo a répondu sont: (a) la modélisation commune du devenir d'une substance dans l'environnement et dans le corps humain par le couplage de modèles multimédia avec la modélisation physiologique toxicocinétique (modèle PBPK); (b) la détermination des concentrations internes efficaces (i. e. dans les tissus cibles) chez l'homme en substances chimiques [3]; (c) l'incorporation d'un

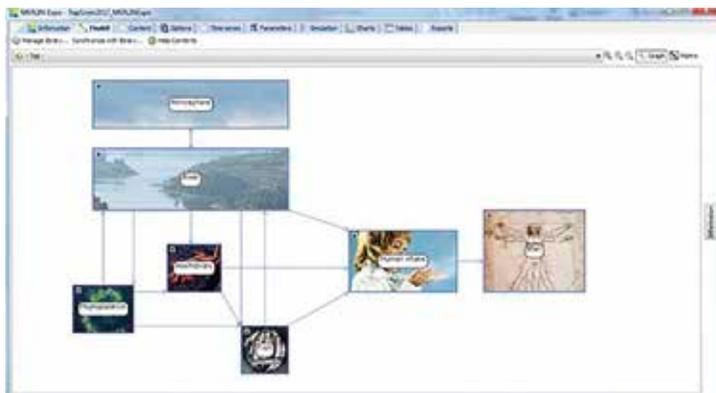
ensemble de fonctionnalités pour l'analyse d'incertitude et de sensibilité, allant du criblage à des approches sophistiquées basées sur la variance.

ÉTUDES DE CAS

Plusieurs études de cas réalistes ont été menées pour tester l'applicabilité de MERLIN-Expo. La première a porté sur l'exposition au plomb et à l'arsenic des enfants en bas âge et des adultes vivant dans une région du Nord de la Belgique ayant abrité de nombreuses industries (fonderies) [4; 5]. Les objectifs étaient d'estimer les expositions interne et externe des populations locales, et de classer les différentes voies d'exposition en fonction de leur contribution à l'exposition interne des populations (figure 2). Des simulations ont été réalisées avec plusieurs scénarios afin d'étudier l'effet de différentes approches de modélisation (e. g. déterministe vs probabiliste, exposition individuelle vs agrégée) et de différents scénarios d'exposition (par exemple, la consommation locale de nourriture ou la prise en compte des activités individuelles). Pour le scénario d'exposition au plomb le plus réaliste, les prédictions du modèle se sont avérées proches des données de biosurveillance (un facteur 2 environ).

Une seconde étude de cas s'est intéressée à l'exposition écologique et humaine aux polluants organiques persistants dans la lagune de Venise [6; 7]. Cette lagune est influencée par plusieurs activités anthropiques qui ont causé dans le passé et continuent de provoquer le relargage de substances chimiques dans les milieux environnementaux. Plusieurs modèles (phytoplancton, invertébrés et poissons) ont été combinés pour créer un réseau alimentaire aquatique simulant la dynamique de la bioaccumulation et la biomagnification (c'est-à-dire les processus par lesquels les teneurs de certaines substances croissent à chaque stade du réseau trophique) des dioxines et des PCB. Les concentrations estimées dans les espèces aquatiques comestibles ont ensuite été utilisées pour évaluer l'apport quotidien chez l'homme par la consommation de fruits de mer locaux. Le modèle PBPK a permis d'explorer l'accumulation de 2,3,7,8-TCDD et PCB126 dans les tissus humains pour plusieurs décennies (figure 3). Une bonne concordance a été observée entre les prédictions des modèles et des niveaux mesurés dans les populations lors d'études de biosurveillance ponctuelles.

Figure 1 / Exemple de modèle d'exposition intégrant les compartiments atmosphère, rivière, phytoplancton, invertébrés, poissons et humains.



Dans la plupart des études de cas, un ratio inférieur à 3 a été observé entre les prédictions du modèle et les données expérimentales mesurées. Une telle concordance est généralement jugée acceptable dans un cadre purement prédictif, c'est-à-dire avec des modèles suffisamment génériques pour être appliqués à un grand nombre de substances et de situations. Les études de cas ont ainsi permis de démontrer la faisabilité d'établir des scénarios d'exposition réalistes complexes satisfaisant les besoins de parties prenantes, la précision des prédictions de la modélisation, et l'intérêt des marges d'incertitude pour améliorer la gouvernance des risques.

CONCLUSION

MERLIN-Expo est un outil adéquat pour évaluer les expositions externe et interne pour les étapes les plus avancées de l'évaluation des risques (approche par palier). En particulier, cet outil est adapté à l'évaluation d'impacts locaux, comme l'ont montré les études de cas. MERLIN-Expo dispose de nombreuses fonctionnalités avancées qui ne sont pas toujours requises par les cadres réglementaires actuels mais qui sont susceptibles de le devenir dans les prochaines années.

¹ <http://merlin-expo.eu/learn/documentation/model-documentation/>

Références

[1] Suci, N.; Tediosi, A.; Ciffroy, P.; Altenpohl, A.; Brochet, C.; Verdonck, F.; Ferrari, F.; Giubilato, E.; Capri, E.; Fait, G., Potential for MERLIN-Expo, an advanced tool for higher tier exposure assessment, within the EU chemical legislative frameworks. *Science of the Total Environment* 2016, 562, 474-479.

[2] Ciffroy, P.; Alfonso, B.; Altenpohl, A.; Banjac, Z.; Bierkens, J.; Brochet, C.; Critto, A.; De Wilde, T.; Fait, G.; Fierens, T.; Garratt, J.; Giubilato, E.; Grange, E.; Johansson, E.; Radomyski, A.; Reschwann, K.; Suci, N.; Tanaka, T.; Tediosi, A.; Van Holderbeke, M.; Verdonck, F., Modelling the exposure to chemicals for risk assessment: a comprehensive library of multimedia and PBPK models for integration, prediction, uncertainty and sensitivity analysis - the MERLIN-Expo tool. *Science of the Total Environment* 2016, 568, 770-784.

[3] Brochet, C.; Quindroit P, Modelling the Fate of Chemicals in Humans Using a Lifetime Physiologically Based Pharmacokinetic (PBPK) Model in MERLIN-Expo. P. Ciffroy et al. (eds.), Modelling the Fate of Chemicals in the Environment and the Human Body, *The Handbook of Environmental Chemistry* 57, 215-257.

[4] Fierens, T.; Van Holderbeke, M.; Standaert, A.; Cornelis, C.; Brochet, C.; Ciffroy, P.; Johansson, E.; Bierkens, J., Multimedia & PBPK modelling with MERLIN-Expo versus biomonitoring for assessing Pb exposure of pre-school children in a residential setting. *Science of the Total Environment* 2016, 568, 785-793.

[5] Van Holderbeke, M.; Fierens, T.; Standaert, A.; Cornelis, C.; Brochet, C.; Ciffroy, P.; Johansson, E.; Bierkens, J., Assessing multimedia/multipathway exposures to inorganic arsenic at population and individual level using MERLIN-Expo. *Science of the Total Environment* 2016, 568, 794-802.

[6] Radomyski, A.; Giubilato, E.; Ciffroy, P.; Critto, A.; Brochet, C.; Marcomini, A., Modelling ecological and human exposure to POPs in Venice lagoon - Part II: Quantitative uncertainty and sensitivity analysis in coupled exposure models. *Science of the Total Environment* 2016, 569, 1635-1649.

[7] Giubilato, E.; Radomyski, A.; Critto, A.; Ciffroy, P.; Brochet, C.; Pizzol, L.; Marcomini, A., Modelling ecological and human exposure to POPs in Venice lagoon. Part I - Application of MERLIN-Expo tool for integrated exposure assessment. *Science of the Total Environment* 2016, 565, 961-976.

ABSTRACT /

The 4FUN project funded under the European Union's 7th Framework Programme produced a software, named MERLIN-Expo, containing a library of models for exposure assessment, coupling environmental multimedia and pharmacokinetic models. The main challenges in exposure modelling that MERLIN-Expo has tackled are: (a) the integration of multimedia models simulating the fate of chemicals in environmental media, and of physiologically based pharmacokinetic models simulating the fate of chemicals in human body. MERLIN-Expo thus allows the determination of internal effective chemical concentrations; (b) the incorporation of a set of functionalities for uncertainty/sensitivity analysis, from screening to variance-based approaches. The availability of such tools for uncertainty and sensitivity analysis aimed to facilitate the incorporation of such issues in future decision making; (c) the integration of human and wildlife biota targets with common fate modelling in the environment. The models can be linked together to create flexible scenarios relevant for both human and wildlife biota exposure. Three case studies based on actual datasets were performed using MERLIN-Expo.

Figure 2 /

Contribution des différentes voies d'exposition (%) à l'exposition à l'arsenic pour 10 individus vivant dans la zone de référence.

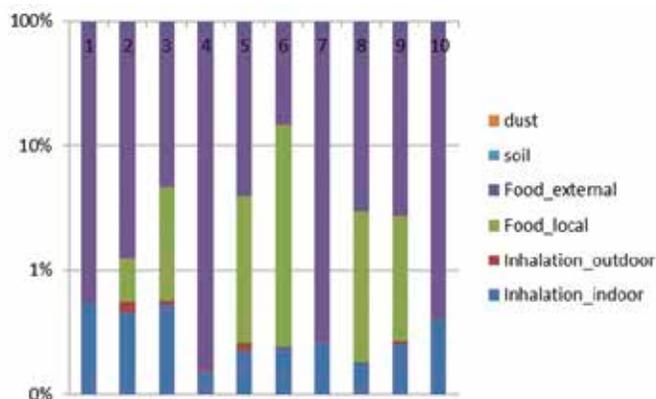
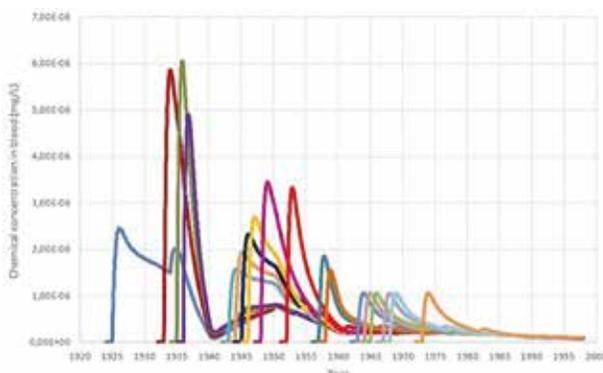


Figure 3 /

Évolution de la concentration sanguine en PCB126 tout au long de la vie d'individus nés entre 1924 et 1972 et grands consommateurs de poissons pêchés dans le lagon de Venise.



DE L'IMPORTANCE DE LA SPÉCIATION DE LA FRACTION ORGANIQUE POUR L'ÉVALUATION DES SOURCES DE PARTICULES DANS L'AIR AMBIANT

Contributeurs

Alexandre
ALBINET,
Olivier
FAVEZ

La pollution due aux particules (aérosols, PM) présentes dans l'air ambiant est une problématique sanitaire primordiale. La connaissance et l'évaluation de leurs sources sont un enjeu majeur en termes de politiques de gestion de la qualité de l'air. Les travaux menés par l'Ineris, cofinancés par le LCSQA, ont permis de montrer qu'à travers une spéciation fine de la fraction organique de l'aérosol (aérosol organique, AO), et par la mesure de composés clés dits « marqueurs », une évaluation approfondie des sources des particules, incluant des sources primaires ou secondaires généralement non résolues, est réalisable.

MÉTHODE

Des études de terrain ont été conduites à Grenoble sur toute l'année 2013 (prélèvements de 24 h, 1 j/3) et sur le site du SIRTA (25 km au sud-ouest de Paris, représentatif de la pollution en Île-de-France) lors d'un épisode de pollution aux particules ($PM_{10} > 50 \mu g \cdot m^{-3}$ sur plusieurs jours consécutifs) en mars 2015 (prélèvements toutes les 4 h). Ces échantillons de la fraction PM_{10} des particules, collectés en collaboration avec Atmo Auvergne Rhône-Alpes et le LSCE, ont ensuite été caractérisés chimiquement de façon très étendue (jusqu'à 200 espèces mesurées) en partenariat avec les laboratoires IGE, EPOC, LCME, LSCE, IMT-Lille Douai et l'université de Florence. L'étude des sources de PM par modèle source-récepteur (*Positive Matrix Factorization* – PMF) à partir de la base de données obtenues a été effectuée sur les deux sites d'étude.

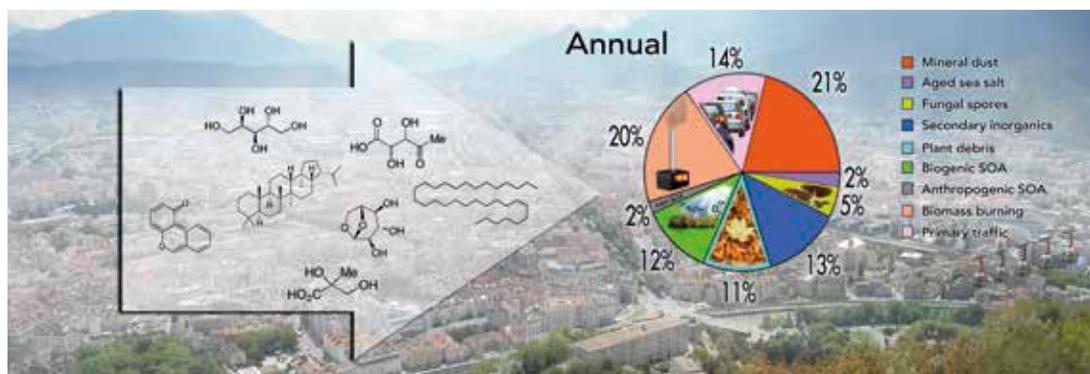
RÉSULTATS

Les résultats obtenus ont permis de distinguer 9 et 11 sources de PM, ou mélange de sources, respectivement à Grenoble et au SIRTA, incluant certaines rarement appréhendées dans la littérature telles que deux types d'aérosols biogéniques primaires (débris de plantes et spores fongiques) et des contributions spécifiques d'aérosols organiques secondaires (AOS) issus de précurseurs d'origines biogénique et anthropique. Ces sources ont été identifiées grâce à des marqueurs organiques clés tels que les polyols, les alcanes à nombre impair de carbones et différents marqueurs d'AOS liés à l'oxydation de l'isoprène, de l' α -pinène, du toluène, des composés phénoliques et des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) (figure 1).

À Grenoble en 2013, les contributions moyennes annuelles majeures aux PM_{10} étaient la combustion de biomasse (chauffage résidentiel), les poussières minérales ($\approx 20\%$ chacune) et les émissions primaires du trafic routier (14 %) (figures 1 et 2). En été, les sources primaires et secondaires biogéniques représentaient au minimum 68 % de la fraction carbonée organique de l'aérosol (OC) alors qu'en hiver, les sources primaires et secondaires anthropiques étaient largement prépondérantes représentant au moins 71 % d'OC. Une contribution extrêmement importante de l'AOS anthropique, liée notamment à l'oxydation des HAP, a été également observée en

Figure 1 /

Illustration des marqueurs moléculaires « clés » utilisés pour l'identification des sources de particules et répartition moyenne annuelle de celles-ci sur le site de fond urbain de Grenoble - Les Frénes en 2013.



hiver au cours d'un épisode de pollution particulaire (18 % des PM₁₀ et environ 42 % d'OC) (figure 2). Les conditions météorologiques spécifiques, avec une stagnation des polluants dans cette vallée alpine sur plus de dix jours, l'implication probable de réactions chimiques de type Fenton, en lien avec de fortes concentrations en métaux de transition tels que le fer et le cuivre, combinées à un cycle d'auto-amplification de la formation d'AOS, peuvent vraisemblablement expliquer les niveaux de concentration très importants d'AOS anthropiques observés lors de cette période.

Au SIRTa, lors de l'épisode de pollution en mars 2015, les résultats ont montré que les aérosols inorganiques secondaires (enrichis en nitrate, en nitrate/sulfate et transportés) et les poussières (22, 37 et 18 %) étaient les sources majeures de PM. La combustion de biomasse, majoritaire lors de la première partie de l'épisode (jusqu'à 60 % des PM), représentait 8 % en moyenne des PM₁₀ (figure 3). La mesure de marqueurs moléculaires spécifiques a permis l'évaluation des contributions individuelles des sources de la matière organique particulaire (15 µg.m⁻³ en moyenne) (figure 4). La part secondaire d'OC (SOC) représentait environ la moitié de la masse totale d'OC et 40 % de ses sources ont pu être clairement identifiées avec une prépondérance d'AOS anthropiques issus de différents processus d'oxydation des HAP (nitro- et oxy-HAP) et plus généralement de la combustion de biomasse avec l'implication de composés phénoliques précurseurs d'AOS.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Les résultats obtenus ont permis de démontrer l'importance de la spéciation chimique de la fraction organique de l'aérosol et que l'utilisation de composés moléculaires spécifiques dans les modèles source-récepteurs sont un outil très puissant afin de discriminer les sources d'AO et de mieux comprendre les origines des PM dans l'air ambiant. Les travaux futurs permettront d'inclure encore plus de marqueurs (e.g. organo-sulfates et organo-nitrates) permettant de discriminer la nature (biogénique vs anthropique) de la matière organique associée aux aérosols inorganiques secondaires et aux poussières.

Références

Srivastava, D.; Tomaz, S.; Favez, O.; Lanzafame, G.-M.; Golly, B.; Besombes J.-L.; Alleman, L. Y.; Jaffrezo, J.-L.; Jacob, V.; Perraudin, E.; Villenave, E.; Albinet, A. Speciation of organic fractions does matter for aerosol source apportionment. Part 1: a one-year campaign in Grenoble (France). *Science of the Total Environment*, submitted.

Srivastava, D.; Favez, O.; Bonnaire, N.; Lucarelli, F.; Perraudin, E.; Gros, V.; Villenave, E.; Albinet, A. Speciation of organic fractions does matter for aerosol source apportionment. Part 2: Intensive campaign in the Paris area (France). *Science of the Total Environment*, in preparation.

ABSTRACT /

PM₁₀ source apportionment was performed by positive matrix factorization (PMF) using specific primary and secondary organic molecular markers on samples collected over a one year period (2013) in Grenoble and at the SIRTa station. This station represents the suburban background air quality conditions of the Paris area (25 km SW from Paris city center) during an intense PM pollution event in March 2015 (PM₁₀ > 50 µg m⁻³ for several days). Results provided a 9- and 11-factor optimum solution, including sources rarely apportioned such as two types of primary biogenic organic aerosols (fungal spores and plant debris), as well as specific biogenic and anthropogenic secondary organic aerosols (SOA). These sources were identified thanks to the use of key organic markers namely polyols, odd number higher alkanes, and several SOA markers related to the oxidation of isoprene, α-pinene, toluene polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and phenolic compounds. Findings of this work demonstrate that the speciation of the organic aerosol fraction and the input of specific molecular markers into source-receptor model are a powerful tool to discriminate OA sources and to get a better understanding of PM origins.

Figure 2 / Évolution temporelle des concentrations et des contributions des 9 sources de particules (PM₁₀) identifiées à Grenoble - Les Frênes en 2013.

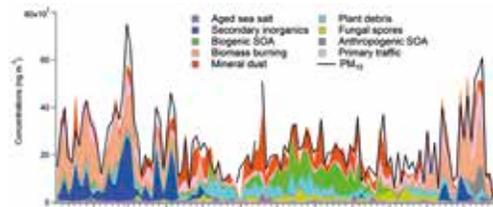


Figure 3 / Contributions moyennes et évolution temporelle des 11 sources de particules (PM₁₀) identifiées sur le site du SIRTa (25 km au sud-ouest de Paris) lors d'un épisode majeur de pollution aux particules en mars 2013.

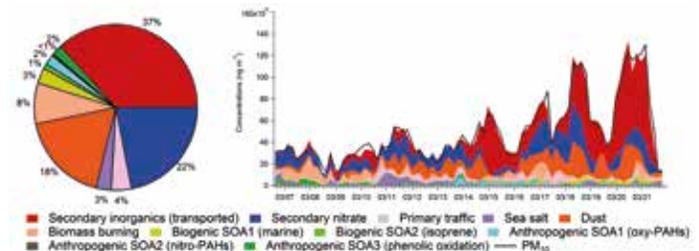
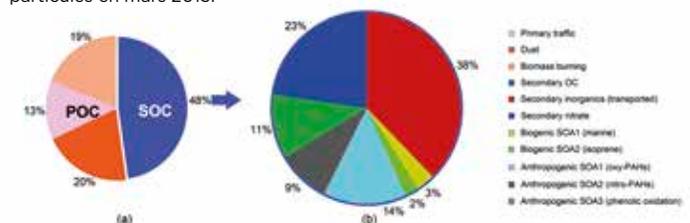


Figure 4 / Contributions individuelles moyennes des sources primaires (POC) et secondaires (SOC) à la masse totale de carbone organique (OC) identifiées au SIRTa (25 km au sud-ouest de Paris) lors d'un épisode majeur de pollution aux particules en mars 2013.



MÉTHODE NORMALISÉE TRIADE D'ÉVALUATION DU RISQUE POUR LES ÉCOSYSTÈMES DU SOL AU TRAVERS D'UN CAS APPLIQUÉ

Contributeurs

Nicolas
PUCHEUX,

Sandrine
ANDRES,

Pascal
PANDARD

La méthode d'évaluation de qualité des sols TRIADE est une méthode internationale normalisée ISO 19204:2017 (ISO 2017) qui met en œuvre différentes disciplines scientifiques pour réaliser une évaluation des risques pour les écosystèmes (ERE) pour le compartiment terrestre. Cette procédure standardisée vise à permettre l'exploitation optimale des données au travers d'un cadre conceptuel mais sans fixer dans le détail les modalités de mise en œuvre.

Dans sa mission d'appui aux pouvoirs publics et aux entreprises, l'Ineris s'assure des conditions d'applicabilité et des contraintes des méthodes d'évaluation nouvellement développées ainsi que de la pertinence de leur mise en œuvre dans un contexte réglementaire. Ainsi, au travers du projet TRIPLE, et en partenariat avec l'Agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie (Ademe), l'Ineris a mis en œuvre la méthode sur un ancien site minier pollué majoritairement par des éléments-traces métalliques. L'objectif était d'évaluer l'applicabilité et la cohérence générale de la méthode ainsi que la pertinence et la complétude des différents éléments qui la composent dans ce cas concret.

LA MÉTHODE TRIADE, TROIS APPROCHES DU RISQUE COMBINÉES SUR TROIS NIVEAUX D'ANALYSE

TRIADE fait référence à trois approches méthodologiques différentes et complémentaires de l'ERE: les approches chimique, écotoxicologique

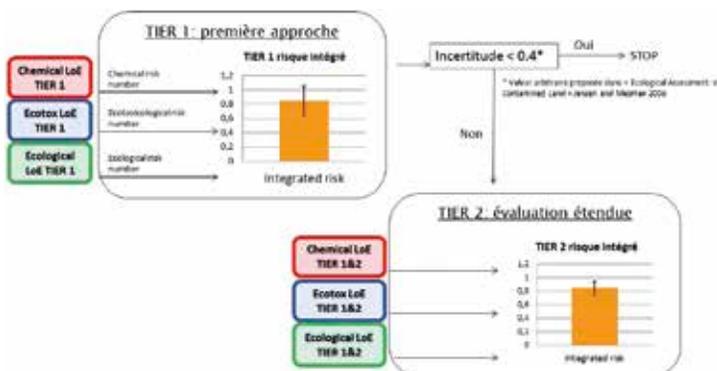
et écologique. L'approche chimique évalue le risque sur la base des substances identifiées sur un site, l'approche écotoxicologique évalue le risque en caractérisant la relation dose/effet de différentes matrices environnementales (sols, eaux superficielles, effluents...) lors d'essais d'écotoxicité de laboratoire et l'approche écologique évalue le risque en étudiant la variation de la biodiversité et de la qualité écologique des milieux. Leur utilisation connexe conduit à une conclusion dont la validité est basée sur le principe du faisceau de preuve (« *weight of evidence* », souvent défini comme l'accumulation d'indices permettant d'arriver à une même conclusion). Le déroulé de la méthode TRIADE, itérative (figure 1), s'articule selon trois niveaux (TIER) auxquels sont associés des outils de complexité croissante pour chacune des approches. Le TIER 1 (première approche de criblage) fait appel à des outils simples et facilement mis en œuvre. Le TIER 2, de complexité supérieure, conduit à une réponse plus fine et précise en s'appuyant sur des outils plus complexes comme les effets sublétaux/chroniques en approche écotoxicologique ou la biodisponibilité des substances en approche chimique. Le TIER 3 fait appel aux outils les plus élaborés de chacune des approches.

LE SITE ATELIER

Pour les besoins du projet, l'Ademe a mis à disposition un ancien site minier dont les activités ont été arrêtées il y a plus d'un siècle. De nombreuses études ont été réalisées, par exemple une cartographie de la concentration métallique, une évaluation de la biodisponibilité des métaux et une mesure de l'état biologique du sol à l'aide de bio-indicateurs. Le besoin de produire des données pour l'approche écotoxicologique a été défini pour pouvoir dérouler la démarche dans son ensemble. En 2017, cinq zones contaminées présentant des différences marquées du point de vue des caractéristiques physicochimiques et de la couverture végétale ont été sélectionnées afin de réaliser des prélèvements de sol (figure 2). Une batterie de bioessais en lien avec les recommandations de la norme TRIADE a été réalisée. Les résultats sont venus compléter le jeu de données qui a permis le bon déroulement des deux premiers TIER.

Figure 1 /

La méthode TRIADE : une méthode itérative.



RÉSULTATS

L'utilisation conjointe des outils du TIER 1 ont donné des résultats similaires pour les trois approches vis-à-vis d'une seule des cinq zones (la zone « Bassin1 » de la **figure 3**). Le calcul du risque intégré indique un risque élevé pour toutes les stations et un faisceau de preuves convaincant (incertitude inférieure au seuil préalablement sélectionné de 0,4¹) pour trois zones. Pour les deux zones restantes, l'incertitude élevée ne permet pas de conclure à ce stade et se traduit par la nécessité de mettre en œuvre les outils, plus fins, du deuxième niveau.

L'utilisation conjointe des outils du TIER 2 permet une analyse plus aboutie de la situation. En effet, il est observé une diminution de l'incertitude pour les zones qui justifiaient l'utilisation du TIER 2 en dessous du seuil fixé (dans cet exercice : 0,4) : les valeurs du risque intégré calculées y sont donc considérées comme valides.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Le projet TRIPLE a permis de tester la méthode normalisée ISO 19204 TRIAD sur un site pollué d'origine minière. Dans l'ensemble, le déroulé de la méthode est cohérent et l'utilisation des outils du TIER 2 diminue les incertitudes de l'évaluation sur les zones pour lesquelles le TIER 1 n'avait pas permis de conclure. Toutefois, il est apparu que la norme est trop peu prescriptive sur certains points et donc sujette à l'interprétation de l'évaluateur. Par exemple, les valeurs seuil qui conditionnent la réalisation d'essais supplémentaires ou l'interprétation de l'indice de risque intégré ne sont pas définies. Un travail de réflexion est donc nécessaire pour proposer une ou des valeurs. Il a également été noté que la prise en compte du risque pour les prédateurs liés à des contaminations avec des substances persistantes et bioaccumulables n'est pas clairement visible.

¹ La norme n'indique pas de valeur pour ce seuil, la valeur de 0,4 correspond à une valeur arbitrairement choisie par Jensen et Mesman (2006) pour illustrer par l'exemple l'interprétation du risque selon la méthode TRIADE.

Références

Chapman, P. M. (1990). "The sediment quality triad approach to determining pollution-induced degradation." *Science of the Total Environment* 97-8: 815-825.

DeVaulfleury, A. and Pauget, B. (2013). Étude de la biodisponibilité des contaminants métalliques pour les escargots sur les anciens sites minier de la vallée de la Vis à Saint-Laurent-le-Minier, université Franche-Comté: 38.

Hayet, A.; Deram, A. and Couffignal, B. (2009). "Évaluation des risques écologiques (ERE) : vers une harmonisation des méthodes et des outils à l'échelle européenne." 11.

ISO (2017). "Soil quality - Procedure for site-specific ecological risk assessment of soil contamination (TRIAD approach)." ISO 19204

Jensen, J. and Mesman, M. (2006). "Ecological Risk Assessment of Contaminated Land." 138.

Villeneuve, C. (2012). Rapport d'étude sur la nématofaune du sol à Saint-Laurent-le-Minier sur d'anciens sites d'activités minières: 19.

ABSTRACT /

The International Standard ISO 19204 "Soil quality - Procedure for site specific ecological risk assessment of soil contamination (Soil quality TRIAD approach)" provides a methodological framework for the application of three combined lines of evidence (chemistry, ecotoxicology and ecology) to conduct a site specific ecological risk assessment. The soil quality TRIAD approach is conceived as a tiered stepwise approach.

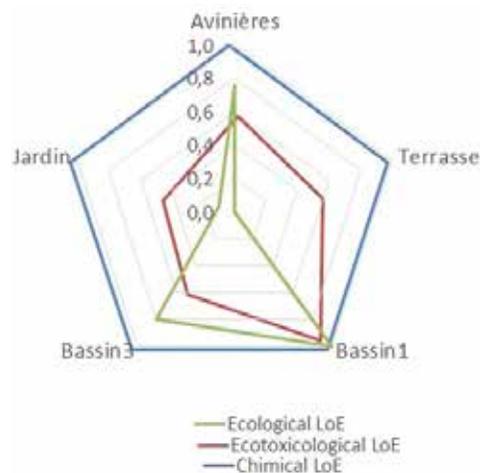
The assessment of this method by ensuring the feasibility and constraints of newly developed evaluation methods and the relevance of their implementation in a regulatory context is part of the mission of Ineris with respect to technical support to public authorities and industry. To achieve this goal, the method was applied on a selected field site.

It was possible to achieve an assessment to the end, but it required the use of expert judgement since the method is not prescriptive enough with regards to certain points that are considered to be critical. Among these points can be quoted the interpretation of the calculated integrated risk score and the uncertainty threshold that triggers the use of more complex tools. Where possible, recommendations were made to improve the use of the method.

Figure 2 /
Prélèvement des sols.



Figure 3 /
TIER 1.



ÉVALUATION DE LA REPRODUCTIBILITÉ DES APPROCHES « READ ACROSS » ENTRE ÉVALUATEURS

Contributeur
Enrico
MOMBELLI

Les prédictions par lecture croisée (*read-across*, en anglais) représentent la méthode alternative à l'expérimentation animale la plus utilisée par les déclarants dans le cadre du règlement REACH [1; 2]. Cette approche prédictive repose sur la même hypothèse qui caractérise la modélisation QSAR : des molécules similaires induisent une toxicité similaire d'un point de vue qualitatif et quantitatif. Ces prédictions peuvent être dérivées à partir de plusieurs approches dont la pertinence relève de l'expertise de la personne qui évalue la toxicité de la substance d'intérêt. Afin de caractériser la variabilité associée aux évaluateurs lors de prédictions par lecture croisée, le projet européen CALEIDOS¹ a organisé un exercice international pour la prédiction d'effets (éco)toxicologiques [3].

ORGANISATION DE L'EXERCICE

Quarante experts ont participé à l'exercice qui a porté sur la prédiction des effets (éco)toxicologiques suivants : mutagénicité (test d'Ames), coefficient de bioconcentration (BCF) et toxicité aiguë chez le poisson. Pour chaque effet, neuf substances ont été évaluées. Un total de 181 questionnaires a été soumis. Les participants ont pu utiliser les bases de données et outils qu'ils souhaitaient. Trois outils informatisés librement disponibles ont été utilisés : la boîte à outils (Q)SAR de l'OCDE², le logiciel ToxRead³, et le logiciel VEGA⁴.

Les valeurs expérimentales étant inconnues pour la plupart des effets et des substances testés, le critère d'évaluation principal de l'exercice était la reproductibilité des résultats, et non leur justesse.

RÉSULTATS

Mutagenèse

Pour cet effet, il s'agissait de prédire si la substance est mutagène ou pas, donc une réponse binaire. Le niveau de concordance (figure 1) parmi les participants était assez élevé pour six des neuf substances évaluées. La concordance des prédictions pour les participants qui ont utilisé ToxRead a été parfaite tandis que les participants ayant eu recours à la boîte à outils de l'OCDE n'ont donné la même réponse que pour une seule molécule.

Coefficient de bioconcentration

Pour cet exercice, il s'agissait de prédire la valeur du coefficient de bioconcentration (BCF). Afin d'être comparées, les prédictions ont été positionnées par rapport au seuil réglementaire qui identifie les substances remplissant le critère de bioaccumulation ($\text{Log BCF} > 3.3$). Les résultats indiquent un bon niveau de concordance (figure 2). Seules deux substances présentaient des prédictions dans les deux catégories.

Toxicité aiguë chez le poisson

Il s'agissait de prédire la concentration létale médiane (CL50) chez le poisson. Cinq classes correspondant à des intervalles de concentrations ont été déterminées (tableau 1). Le manque de concordance était assez marqué pour cet effet. Ceci peut en partie s'expliquer par l'absence d'analogues structuraux à similarité élevée. Les prédictions obtenues grâce à la boîte à outils (Q)SAR de l'OCDE étaient caractérisées par une forte variabilité.

Tableau 1 / Prédications par lecture croisée (« read-across ») pour la toxicité aiguë chez le poisson pour les substances 19 à 27. Les nombres indiquent les participants ayant classé la substance dans chacune des catégories d'effet.

ID Substance chimique	CL50 ≤ 1 [mg/L]	1 mg/L < CL50 ≤ 10 [mg/L]	10 mg/L < CL50 < 100 [mg/L]	CL50 ≥ 100 [mg/L]	Prédiction indéterminée
19	2	0	0	0	0
20	1	1	0	2	1
21	0	2	0	1	2
22	0	1	1	1	1
23	0	0	0	1	3
24	0	1	0	3	1
25	1	1	3	0	0
26	1	1	2	0	0
27	0	1	2	2	0

CONCLUSION

Même si le nombre de participants ne permet pas la formulation de conclusions généralisables à l'ensemble des évaluateurs potentiels, il est cependant possible de mettre en évidence certains facteurs critiques.

Le facteur de bioconcentration (BCF) semblerait être mieux prédit que les autres effets. Cette reproductibilité peut être expliquée par deux facteurs. En effet, les bases de données utilisées par les participants contiennent une majorité de substances caractérisées par un BCF inférieur à 3,3 et cette prépondérance de substances « non-bioconcentrables » rend le consensus sur cette classe de toxicité plus probable. Deuxièmement, la disponibilité d'une description physicochimique mécanistique simple pour la bioconcentration (coefficient de partage entre l'1-octanol et l'eau) augmente la probabilité d'une uniformisation des prédictions.

Les prédictions à forte variabilité pour la mutagenèse pourraient s'expliquer par le fait que les résultats ne peuvent pas être positionnés par rapport à un seuil critique de toxicité. Ce positionnement faciliterait la classification des substances éloignées de ce seuil comme dans le cas du BCF.

Le niveau de divergence le plus élevé a été observé pour la toxicité chez le poisson. Cette évaluation est aussi rendue complexe par l'hétérogénéité des bases de données disponibles en termes d'espèces de poisson et de protocoles expérimentaux.

Cet exercice indique aussi que plus un outil met à disposition d'options, plus la divergence entre les prédictions augmente. Ainsi le schéma décisionnel mis à disposition par l'ECHA devrait aider [4] à améliorer la reproductibilité des prédictions par lecture croisée. Cependant, le grand nombre de renseignements exigé par ce dernier rend l'argumentation d'une prédiction difficile en termes d'informations disponibles (ex. métabolisme).

- 1 <http://www.life-caleidos.eu/>
- 2 <https://www.qsartoolbox.org/>
- 3 <https://www.vegahub.eu/>
- 4 <https://www.vegahub.eu/>

Références

[1] ECHA (2011) The use of alternatives to testing on animals for the REACH Regulation - Second report under Article 117(3) of the REACH Regulation, ECHA-11-R-004.2-EN. European Chemical Agency, Helsinki, Finland,

https://echa.europa.eu/documents/10162/13639/alternatives_test_animals_2011_en.pdf

[2] ECHA (2014) The use of alternatives to testing on animals for the REACH Regulation - Second report under Article 117(3) of the REACH Regulation,

ECHA-14-A-07-EN. European Chemical Agency, Helsinki, Finland, http://echa.europa.eu/documents/10162/13639/alternatives_test_animals_2014_en.pdf

[3] Benfenati, E.; Belli, M.; Borges, T.; Casimiro, J.; Cester, A.; Fernandez, A.; Gini, G.; Honma, H.; Kinzi, M.; Knauf, R.; Manganaro, A.; Mombelli, E.; Petoumeno, M.I.; Paparella, M.; Paris, P.; Raitano, G. (2016) Results of a round-robin exercise on read-across QSAR SAR Environ Res 27:371-384

[4] ECHA (2015) Read-Across Assessment Framework https://echa.europa.eu/documents/10162/13628/raaf_en.pdf

ABSTRACT /

The European LIFE project CALEIDOS succeeded in providing practical information on QSAR models and read-across approaches in the framework of the REACH regulation by conducting validation exercises on chemicals that were submitted to the European Chemicals Agency. This project also organized a round-robin exercise aimed at evaluating the reproducibility of toxicological predictions obtained by means of read-across approaches. Indeed, predictions obtained by read-across represent the most common alternative to animal testing reported in the dossiers submitted by registrants under the REACH regulation.

Three endpoints were analysed during the exercise: mutagenicity, bioconcentration factor and fish acute toxicity. Nine chemicals were associated with each endpoint and the participants completed a questionnaire relating their conclusions.

The final results suggest that the level of reproducibility changes according to the predicted endpoint and the computational tool adopted for obtaining the predictions.

Overall this exercise indicates that there are several areas of uncertainty in read-across assessments and that there is a need to identify reproducible and robust arguments to substantiate read-across predictions.

Figure 1 / Les réponses des participants à l'exercice pour la prédiction de la mutagenèse. Quatre substances ont donné lieu à des prédictions discordantes et cinq à des prédictions indéterminées.

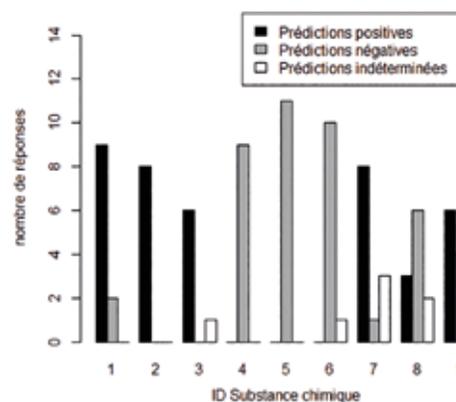
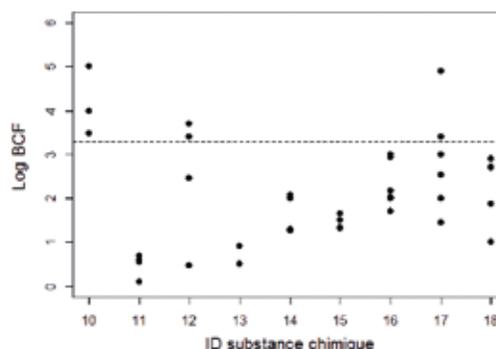


Figure 2 / Concordance prédictive pour le coefficient de bioconcentration (axe des ordonnées) en fonction de la substance chimique analysée (axe des abscisses). La ligne droite indique le seuil réglementaire de 3,3 caractérisant les substances bioaccumulables selon l'annexe XIII du règlement REACH.



L'INERIS PARTENAIRE DE 43 PROGRAMMES EUROPÉENS

EN COURS AU 02 OCTOBRE 2017

Acronymes	Type	Thèmes
ACTRIS-PPP	H2020	Aerosols, Clouds and Trace gases Research Infrastructure-Preparatory Phase Project
AQUITALY	H2020	
ASCENT (2013-2016)	7 PCRD	Advanced solid cycles with efficient novel technologies
BASIS (2013-2016)	RFCS	Blast Actions on Structure in Steel
BIOMETHANE	EMPIR	Metrology for Biomethane
BIORIMA	H2020	Biomaterial risk management
CALIBRATE	H2020	Nano risk governance
CHEOPS	H2020	Achieving low-cost highly efficient perovskite solar cells
DEMOBASE	H2020	DEsign and MOdelling for improved BAAttery Safety and Efficiency
DIADEM	Interreg	Development of an integrated approach for the diagnosis of water quality in the Meuse
EC4SAFENANO	H2020	European Centre for Risk Management and Safe Innovation in Nanomaterials & Nanotechnologies
EPOS / ERICC	H2020	European Plate Observing System
ETC/ACM 2014-2018	EEA	European Topic Centre, Calibration Centre on Air Quality
Euomix	H2020	A tiered strategy for risk assessment of mixtures of multiple chemicals
EuToxRisk21	H2020	An Integrated European 'Flagship' Programme Driving Mechanism-based Toxicity Testing and Risk Assessment for the 21st century
EXPRO	RFCS	Prediction and mitigation of methane explosion effects for improved protection of mine infrastructure and critical equipment
FLEDGED	H2020	Flexible Dimethyl Ether (DME) production from biomass gasification with sorption-enhanced processes
GASDRAIN	RFCS	Development of Improved Methane Drainage Technologies by Stimulating Coal Seams for Major Risk Prevention and Increased Coal Output
GRONE	Interreg	Creation of a cross-border network for the development of knowledge, experimentation and technological and scientific resources in the field of drones
HAZPRED	ERANET	Predictive methods for determining the decomposition properties of hazardous substances: from development to experimental verification
HBM4EU	H2020	Coordinating and advancing human biomonitoring in Europe to provide evidence for chemical policy making
HELIS II	H2020	Advanced European Lithium sulphur cells for automotive applications
HELIX (2013-2016)	7 PCRD	Building the early life exposome
HUGS	H2020	HUMins as Green and Sustainable precursors of eco-friendly building blocks and materials
IMPRESS 2	EMPIR	Enforcement of the Industrial Emissions, Medium Combustion Plant and Eco-design Directives, and the EU's Emissions Trading Scheme
IMPROVER	H2020	Improved risk evaluation and implementation of resilience concepts to Critical Infrastructure

Acronymes	Type	Thèmes
LIFE Ask REACH	LIFE	Enabling REACH consumer information rights on chemicals in articles by IT-tools
MERIDA	RFCS	Management of Environmental Risks During and After mine closure
NanoFase	H2020	Nanomaterial Fate and Speciation in the Environment
NanoGrowSkin	ERANET	Transversal cell therapy approach combining bioengineering skin and growth factor and antibiotic-loaded nanoparticles towards an improved chronic wounds therapy
NanoReg II	H2020	Support for regulation needs in nanotechnologies
NewCLand	Interreg	
OpenRiskNet	H2020	Open e-Infrastructure to Support Data Sharing, Knowledge Integration and in silico Analysis and Modelling in Risk Assessment
PAPILA	H2020	Prediction of air pollution in latina America
PRESLHY-	JTI FCH- H2020	Pre-normative research for the safe use of cryogenic liquid hydrogen
ProGReSS	Interreg	
SLOPES	RFCS	Smarter Lignite Open Pit Engineering Solutions
SOLUTIONS (2013-2016)	7 PCRD	New and improved tools, models, and methods to support decisions in environmental and water policies
STAMS	RFCS	Long-term STability Assessment and Monitoring of flooded Shafts
STEMBANCC	JH2020	Stem cells for biological assays of novel drugs and predictive toxicology
VALSE	Interreg	Nouvelles ressources transfrontalières : vers une validation de scénari de valorisation de sédiments et autres matériaux
VERMEER	LIFE	Integrating VEGA, toxRead, MERLIN-Expo, and ERICA in a platform for risk assessment and substitution of risky substance
ZELCOR	H2020	Zero Waste Ligno-Cellulosic Biorefineries by Integrated Lignin Valorisation

PROGRAMMES DE RECHERCHE SOUTENUS PAR L'AGENCE NATIONALE DE LA RECHERCHE (ANR)

PREVIPOL	Allergie au pollen: vers un système de prévision du risque
PHYTOAGGLO	Intégration des phytotechnologies de gestion et de traitement des sols pollués dans un projet de renouvellement urbain de la communauté d'agglomération creilloise
PHYTOCHEM	Développement de procédés chimiques éco-innovants pour valoriser les biomasses issues de phytotechnologies
PROOFS	Effets de ligands environnementaux du récepteur de la progestérone sur la reproduction du poisson
PREGO	Préfiguration géothermique des ouvrages profonds
ROSTOCK H	Risques et opportunités du stockage géologique d'hydrogène en cavités salines en France et en Europe

AUTRES PROGRAMMES

FINANCEMENTS SUR FONDS PUBLICS

Agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie (Ademe)

AMI HYDROGENE GRHYD	Gestion des réseaux par l'injection d'hydrogène pour décarboner les énergies
BATICOV	Mesures constructives vis-à-vis des pollutions volatiles du sol, de la programmation à l'exploitation des bâtiments – État des lieux, freins et outils
SOURCES	État des lieux sur les connaissances apportées par les études expérimentales des sources de particules fines en France
CARABLACK	Caractérisation des sources de combustion vis-à-vis du <i>black carbon</i> et de la granulométrie des poussières
CARVE	Campagne de mesure de particules à l'émission des foyers domestiques alimentés au bois dans la vallée de l'Arve
SODEMASS	
QAI ARVE	Impact du chauffage au bois sur la qualité de l'air intérieur
QABINE	Qualité de l'air dans l'habitable
NANO-IDENT	Nanoparticules en milieu industriel
NANOWET	Incinération haute température de déchets halogénés/soufrés et nanodéchets - Caractérisation des émissions et évaluation du procédé de lavage des fumées
APOLLO	Analyse économique des impacts de la pollution atmosphérique de l'ozone sur la productivité agricole et sylvicole
POLQA	Politiques d'amélioration de la qualité de l'air grâce aux pratiques agricoles
MEMOTRACES	Compréhension des mécanismes de mobilisations et de transferts de CAP oxygénés dans les eaux souterraines et les sols
TESTS D'ÉCHANTILLONNEURS PASSIFS DE FLUX	
4ÉCOS	Évaluation des émissions des expositions et des risques sanitaires liés à l'activité d'un écosite
CAPQAI	Développement d'outils et de méthodes pour améliorer la caractérisation des transferts de polluants du sol vers l'air intérieur et la prédiction des expositions potentielles dans des environnements intérieurs
PEPS	Impact des produits d'entretien sur la qualité de l'air intérieur: définition d'un protocole d'essai harmonisé pour l'évaluation sanitaire
PHYTOAGGLO	Intégration des phytotechnologies de gestion et de traitement des sols pollués dans un projet de renouvellement urbain de la Communauté d'agglomération creilloise
CARMEN	Caractérisation des HAP et des métaux dans les herbages fauchés en bord de route pour la méthanisation
REGIC	Renforcement par géosynthétique intelligent pour risque cavités

Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation de l'environnement et du travail (Anses)

ERICC	Évaluation économique des risques chimiques complexes
CUMULAIR	Évaluation économique des effets sanitaires cumulés de la pollution de l'air intérieur et extérieur
AIDEZ	Amélioration des essais <i>in vivo</i> pour l'identification des perturbateurs endocriniens à l'aide de poissons zèbres génétiquement modifiés
RFEXPO-ELFE	Exposition aux radiofréquences des enfants de la cohorte ELFE
SENSI-RF	Intolérance environnementale idiopathique avec attribution aux champs électromagnétiques (IEI-CEM): étude des systèmes endocrinien, nerveux sympathique et immunitaire
ASTRO-RF	Étude de l'évolution des tumeurs astrocytaires sous l'effet des champs électromagnétiques radiofréquence de téléphone portable
SKIN RF	Réponse adaptative par exposition aux RF sur les dommages de la peau humaine induite par rayonnement UV solaire

Ministère de la Transition écologique et solidaire

ANIMATION PRIMEQUAL EIAI	Environnements intérieurs et approches innovantes
-------------------------------------	---------------------------------------------------

Conseil régional des Hauts de France

DEMOSTHENE	Démonstrateur de stockage saisonnier d'énergie thermique en carrière souterraine partiellement ennoyée
-------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------

GOVERNANCE SCIENTIFIQUE

L'orientation et l'évaluation scientifique sont assurées par un conseil scientifique et trois commissions scientifiques spécialisées. Ces quatre instances sont composées de personnalités appartenant au milieu académique, à des organismes pairs ainsi qu'au monde industriel.

CONSEIL SCIENTIFIQUE / au 1^{er} janvier 2018

PRÉSIDENTE

Corinne GENDRON

Avocate, MBA, Ph.D.
Professeure titulaire
Département
de stratégie,
responsabilité sociale
et environnementale.
École des sciences
de la gestion.
Université du Québec
à Montréal (Canada)

VICE - PRÉSIDENT

Philippe FREYSSINET

Directeur
de la stratégie,
de la recherche et de
la communication
BRGM

MEMBRE

Michel De LARA

Professeur, chercheur
au CERMICS,
École des Ponts
Paris-Tech

MEMBRE

Isabelle MOMAS

Professeure,
université
Paris-Descartes,
Sorbonne Paris-Cité,
faculté de pharmacie

MEMBRE

Michel SARDIN

Professeur émérite
en génie des procédés,
ENSIC, université
de Lorraine

MEMBRE

Valérie CABUIL

Professeur
à l'université Pierre
et Marie Curie,
réctrice de l'académie
d'Amiens.

COMMISSIONS SCIENTIFIQUES SPÉCIALISÉES / au 31 décembre 2017

RISQUES ACCIDENTELS

Nadine GABAS

Présidente / Qualité Sécurité - Environnement / ENSIACET

Jean-François LECHAUDEL

Direction Sécurité Industrielle / TOTAL SA

Frédérique BATTIN LECLERC

Directrice de recherche / ENSIC

André PAUSS

Professeur / Université de Technologie de Compiègne

Alexis TSOUKIAS

Directeur de recherche / Université Paris Dauphine

Serge WALTER

Professeur / Université de Haute Alsace

Eric CHOJNACKI

IRSN

Laurent JOUBERT

Professeur / Université de Rouen

Thierry MEYER

Maître d'enseignement et de recherche / École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL)

Guy MIGAULT

Corporate Process Manager / SOLVAY

Claude VALOT

DEDALE

Murès ZAREA

Expert sécurité industrielle à la direction recherche & technologique / GDF SUEZ

RISQUES CHRONIQUES

Remy MAXIMILIEN

Président / CEA-DSV

Vincent-Henri PEUCH

Responsable de la division «Chimie atmosphérique» / Centre européen pour les prévisions météorologiques à moyen terme / département de la recherche

Thierry CAQUET

Chef du département scientifique / Inra «Écologie des forêts, prairies et milieux aquatiques» (EFPA)

Christophe MINIER

Directeur adjoint à l'action scientifique et technique / ONEMA

Pierre CELLIER

Directeur de recherche, Unité mixte de recherche Environnement et grandes cultures / INRA

François GENSDARMES

Chef du Laboratoire de physique et de métrologie des aérosols / IRSN

Philippe GISLETTE

Directeur du Centre international de recherche sur l'eau et l'environnement (CIRSEE) / SUEZ Environnement

Denis ZMIROU

Directeur du département Santé-Environnement-Travail / EHESP

Lucie LAMBOLEZ MICHEL

Direction des centres de recherche / Veolia Environnement

George FAVRE

Chargé de programmes R&D / LNE

Jérôme ROSE

Université de Marseille

Armelle BAEZA

Professeur / Université Paris VII - Diderot

Jeanne GARRIC

Directeur de recherche / IRSTEA

Pierre LOIRET

Michelin

Agnès LEFRANC

INVS

Jean-François DOUSSIN

Université Paris-Est Créteil Val de Marne

RISQUES SOL ET SOUS-SOL

Jacques PIRONON

Président / Directeur UMR géoressources N° 7359 / Université de Lorraine Directeur de recherche / CNRS

Jean-Pierre RAJOT

Département géotechnique, environnement, risques naturels et sciences de la terre / Chef du groupe conception et calcul des ouvrages / IFSTTAR

M.Jacques MUDRY

Hydrogéologue

Pascal BERNARD

Physicien - sismologue / Institut de physique du globe de Paris

Robert CHARLIER

Département ArGenCo / Université de Liège

François KALAYDJIAN

Directeur adjoint du Centre de résultat Ressources / IFP

Albin GUYON

Inspection générale des carrières / Mairie de Paris

Damien GOETZ

Directeur adjoint recherche / Mines Paris Tech

Anne-Marie DUVAL

Directrice déléguée de recherche / CEREMA

Véronique MERRIEN

SOUKATCHOFF Professeur / CNAM

Catherine JACQUARD

Directrice technique / FONDASOL

Frédéric PLAS

Directeur de recherche et développement / ANDRA

Hervé CUCHE

SOLVAY

Guilhem DEVEZ

Chef Division géologie-géotechnique / EDF

Invité permanent

Rafik HADADOU

GEODERIS

COMMISSION D'ORIENTATION DE LA RECHERCHE ET DE L'EXPERTISE (CORE)

MANDAT 2015 - 2017

PERSONNALITÉS QUALIFIÉES DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR OU DE LA RECHERCHE

Maurice LEROY

Professeur émérite université de Strasbourg / CNEZ

Brice LAURENT

Chargé de recherches / CSI Mines ParisTech

COLLÈGE INDUSTRIELS

Jean-Charles BOUTONNET

Chef du département toxicologie et environnement / ARKEMA

Henri MOLLERON

(Vice-président), directeur environnement / COLAS

Frédéric PERIE

Responsable développement durable et environnement / TOTAL SA

Sylvaine RONGA-PEZERET

Médecin toxicologue / SEM - EDF

COLLÈGE ASSOCIATIONS

Solène DEMONET

Coordinatrice réseau risques industriels / France Nature Environnement (FNE)

Francis GLEMET

Porte-parole / Coordination nationale médicale santé environnement (CNMSE)

Jean-Yves LEBER

Porte-parole / Écologie sans Frontière (ESF)

Vincent PERROT

Animateur du secteur santé / Consommation, logement, cadre de vie (CLCV)

COLLÈGE SYNDICATS

Gérald HAYOTTE

(Président) / CFDT

COLLÈGE ÉLUS

Michel GUILLOUX

Adjoint au maire / Mairie de Feyzin

René DROUIN

Maire / Mairie de Moyeuve Grande

COLLÈGE ÉTAT

Cédric BOURILLET

Chef du service de la prévention des nuisances et de la qualité de l'environnement / Ministère en charge de l'environnement

Patrice BUESO

Chef du service de la recherche (représenté par Lionel MOULIN, chef de la mission environnement, risques et santé) / Ministère en charge de l'environnement



La CORE approfondit, au regard des attentes sociétales, les enjeux et les questionnements en matière de recherche et d'expertise afin d'enrichir les dossiers et les réflexions stratégiques de l'Institut.

Article 1 de son arrêté de création du 26 avril 2011

41 THÈSES DE DOCTORAT

EN COURS AU 27 OCTOBRE 2017 À L'INERIS

RISQUES CHRONIQUES

Hélène SERRA

Évaluation *in vitro* et *in vivo* des perturbateurs endocriniens chez le poisson zèbre: cas des substances seules et en mélanges complexes (2014/2017)

Vincent LEMAIRE

Le changement climatique: quels sont les processus les plus sensibles pour la composition atmosphérique particulière future en Europe? (2014/2017)

Daniel LEONCO

Développement méthodologique pour l'analyse d'une large gamme de composés dans les milieux aquatiques (2014/2017)

Deepchandra SRIVASTAVA

On-line, Off-line, Secondary Organic Aerosol - Sources, formation and properties of organic aerosol, and their impact on air quality (2014/2017)

Hakim SAMAI

Caractéristiques cellulaires et moléculaires de la réponse inflammatoire chez le poisson exposé à des substances d'origines bactériennes dans un contexte écotoxicologique (2014/2017)

Phonethip PHANTHAVONGSA

Phytostabilisation aidée d'un terrain de dépôt de sédiments et valorisation de la biomasse en bio-énergie: comparaison de deux essais à grande échelle (2014/2017)

Arineh CHOLAKIAN

Évolution de la composition chimique de l'atmosphère au-dessus du bassin méditerranéen: forçages, mécanismes et scénarios (2015/2018)

Audrey GRECH

Développement et application de modèles toxicocinétiques génériques chez le poisson: étude des facteurs de variabilité (2015/2018)

Adrien MARCHAND

Pertinence écologique des biomarqueurs d'immunotoxicité en surveillance environnementale (2015/2018)

Paul QUINDROIT

Reconstruction de doses d'exposition pour des mélanges de substances chimiques ayant des métabolites communs: Application à la famille des pyréthrinoides (2015/2018)

Yunjiang ZHANG

MAOCSA: Multi-site Aerosol Online Characterization and Source Apportionment (2016/2019)

Viviane DAVID

Compréhension et prédiction des effets de substances chimiques sur la dynamique de population de l'épinoche à trois épines en mésocosmes (2016/2019)

Grazia-Maria LANZAFAME

Mesure et modélisation de l'aérosol organique secondaire. Sources et impact sur la qualité de l'air (2016/2019)

Jasmina WALLACE

Effets des champs radiofréquences sur l'activité électrique cérébrale d'éveil. Étude par analyse d'EEG/MEG combinées chez des volontaires sains (2016/2019)

Marc CODACCIONI

Évaluation de l'exposition fœtale aux substances chimiques grâce à la modélisation pharmacocinétique appliquée à la physiologie (PBPK). Applications aux données d'imprégnation des populations (2016/2019)

Audrey CATTEAU

Optimisation d'une approche d'évaluation des impacts environnementaux basée sur la mesure de biomarqueurs chez l'épinoche à trois épines (*Gasterosteus acculeatus*) (2016/2019)

Thi Cuc MAI

Dysfonctionnement de la régulation thermique après exposition chronique chez les rongeurs (2017/2020)

Camille MOUGIN

Impact d'expositions aux champs électromagnétiques du téléphone portable sur les processus cellulaires de maturation et de plasticité cérébrales et identification de biomarqueurs d'effets cérébraux. (2017/2020)

Arnaud GRIGNET

Étude des performances de phytoextraction du Zn et du Cd de l'hyperaccumulateur *Arabidopsis halleri* en co-culture avec le saule (PHYTOEXCO). (2017/2020)

Julie DE OLIVEIRA

Utilisation de poissons zèbres génétiquement modifiés pour l'étude des mécanismes et des effets des perturbateurs endocriniens (2017/2020)

Lei JIANG

Amélioration de la simulation et prévision de la qualité de l'air à haute résolution - Focus sur les zones urbaines et périurbaines pour différentes typologies d'épisodes (2017/2020)

Ségoène SIMEON

Modélisation mathématique systémique de la toxicité envers la reproduction et le développement du poisson zèbre (2017/2020)

Ibtihel BEN DHIAB

Étude qualitative et quantitative de la biodistribution de nanoparticules d'oxydes métalliques après exposition par voie inhalatoire chez le rat (2017/2020)

Corentin REGRAIN

Optimisation des outils d'évaluation de l'exposition spatialisée et intégrée (2017/2020)

Wang GAO

Réseaux bayésiens: méthodologie et application à l'inférence sur la structure des schémas de mode d'action en toxicologie prédictive (2017/2020)

Marie DELLISE

Évaluation multicritère et multiobjectif des performances à l'échelle locale des entreprises en regard des meilleures techniques disponibles (MTD) (2017/2020)

RISQUES DU SOL ET DU SOUS-SOL**Mouhamad HASSOUN**

Limitation par renforcements géosynthétiques des risques liés aux effondrements des cavités souterraines (2015/2018)

Francesca DE SANTIS

Amélioration des outils de prévision du risque sismique dans les exploitations minières profondes (2015/2018)

Jie YANG

Analyses expérimentale et numérique de la problématique multi-physique des fontis au voisinage d'une digue ou ouvrage linéaire (2016/2019)

Dalija NAMJESNIK

Origine de la sismicité observée dans le bassin houiller abandonné de Gardanne et son lien avec l'ennoyage des travaux miniers. (2017/2020)

Ever Dennis COARITA TINTAYA

Modélisation du comportement hydromécanique des argilites : anisotropies structurale et induite, relation endommagement/perméabilité (2017/2020)

Imen ZAIER

Rôle du transport particulière lié à la destruction de gypses poreux dans le développement de cavités de dissolution (2017/2020)

RISQUES ACCIDENTELS**Jean ESCANDE**

Les signaux faibles : dépasser le problème de l'impossible prédictibilité (2012/2018)

Audrey DUCLOS

Développement et mise au point de modèles phénoménologiques et de maîtrise des risques d'explosion pour la filière émergente hydrogène-énergie (2014/2017)

Hong Duc LE

Modélisation d'un jet gazeux chargé en nanoparticules issu d'une fuite sur une canalisation de transport (2014/2017)

Fanny GUENNOC

Positionnement et influence du service sécurité dans les industries à risques (2014/2017)

Houssein ABDO

Développement d'une approche intégrée d'analyse des risques permettant de quantifier le degré de confiance (2015/2018)

Anitha MURALIDHARA

Physico-chemical safety issues pertaining to biosourced furanics valorization with a focus on humins as biomass resource (2016/2019)

Eleonora MENICACCI

Compréhension et prédiction des mécanismes d'incompatibilités chimiques à l'aide de la DFT (2016/2019)

Audrey SANTANDREA

Mieux comprendre les spécificités des particules nanométriques pour mieux prédire les conséquences des explosions de nanopoudres (2017/2020)

OUVERTURE À LA SOCIÉTÉ**Lucile OTTOLINI**

Institutionnalisation de l'ouverture à la société civile au sein des organismes de recherche : vers de nouvelles interactions sciences/sociétés ? (2017/2020)

LES INDICATEURS DE RECHERCHE DU CONTRAT D'OBJECTIFS ET DE PERFORMANCE 2016-2020

Type	Indicateur	2014		2015		2016	
		Cible	Réalisé	Cible	Réalisé	Cible	Réalisé
	Part de l'activité de l'Institut à la recherche	> 20 %	20,30 %	> 20 %	19,60 %	> 20 %	19,30 %
	Taux de succès à l'Europe					25 %	20,00 %
	Nombre de publications dans des revues à comité de lecture référencées ISI	> 85	105	> 85	120	100	105

PUBLICATIONS

RISQUES CHRONIQUES 2016

MICHELOT Nicolas; ENDLICHER Wilfried; CARREGA Pierre; MARTIN Nicolas; FAVEZ Olivier; LANGNER Marcel.

Impact of a Saharan dust outbreak on PM₁₀ ground levels in Southeastern France. *Climatologie*, 2015, 12: p. 65-82

DE HOOGH Kees; GULLIVER John; VAN DONKELAAR Aaron; MARTIN Randall V.; MARSHALL Julian D.; BECHLE Matthew J.; CESARONI Giulia; CIRACH PRADAS Marta; DEDELE Audrius; EEFTEENS Marloes; FORSBERG Bertil; GALASSI Claudia; HEINRICH Joachim; HOFFMANN Barbara; JACQUEMIN Bénédicte; KATSOUYANNI Klea; KOREK Michał; KUNZLI Nino; LINDLEY Sarah J.; LEPEULE Johanna; MELEUX Frédéric; DE NAZELLE Audrey; NIEUWENHUIJSEN Mark; NYSTAD Wenche; RAASCHOU-NIELSEN Ole; PETERS Annette; PEUCH Vincent-Henri; ROUIL Laurence; UDVARDY Orsolya; SLAMA Rémy; STEMPFELET Morgane; STEPHANOU Euripides G.; TSAI Ming Y.; YLI-TUOMI Tarja; WEINMAYR Gudrun; BRUNEKREEF Bert; VIENNEAU Danielle; HOEK Gerard.

Development of West-European PM_{2.5} and NO₂ land use regression models incorporating satellite-derived and chemical transport modelling data. *Environmental Research*, 2016, 151: p. 1-10

RADOMYSKI Artur; GIUBILATO Elisa; CIFFROY Philippe; CRITTO Andrea; BROCHOT Céline; MARCOMINI Antonio.

Modelling ecological and human exposure to POPs in Venice lagoon. Part II: Quantitative uncertainty and sensitivity analysis in coupled exposure models. *Science of the Total Environment*, 2016, 569-570: p. 1635-1649

HINFRAY Nathalie; TEBBY Cléo; GAROCHE Clémentine; PICCINI Benjamin; BOURGINE G.; AIT-AISSA Selim; KAH Olivier; PAKDEL Farzad; BRION François.

Additive effects of levonorgestrel and ethinylestradiol on brain aromatase (cyp19a1b) in zebrafish specific *in vitro* and *in vivo* bioassays. *Toxicology and Applied Pharmacology*, 2016, 307: p. 108-114

DI PAOLO Carolina; OTTERMANNS Richard; KEITER Steffen; AIT-AISSA Selim; BLUHM Kerstin; BRACK Werner; BREITHOLTZ Magnus; BUCHINGER Sebastian; CARERE Mario; CHALON Carole; COUSIN Xavier; DULIO Valeria; ESCHER Beate I.; HAMERS Timo; HILSCHEROVA Klara; JARQUE Sergio; JONAS Adam; MAILLOT-MARECHAL Emmanuelle; MARNEFFE Yves; NGUYEN Mai Thao; PANDARD Pascal; SCHIFFERLI Andrea; SCHULZE Tobias; SEIDENSTICKER Sven; SEILER Thomas B.; TANG Janet; VAN DER OOST Ron; VERMEIRSEN Etienne; ZOUNKOVA Radka; ZWART Nick; HOLLERT Henner.

Bioassay battery interlaboratory investigation of emerging contaminants in spiked water extracts. Towards the implementation of bioanalytical monitoring tools in water quality assessment and monitoring. *Water Research*, 2016, 104: p. 473-484

BAUDIC Alexia; GROS Valérie; SAUVAGE Stéphane; LOCOGE Nadine; SANCHEZ Olivier; SARDA-ESTEVE Roland; KALOGRIDIS Cerise; PETIT Jean-Eudes; BONNAIRE Nicolas; BAISNEE Dominique; FAVEZ Olivier; ALBINET Alexandre; SCIARE, Jean; BONSANG Bernard.

Seasonal variability and source apportionment of volatile organic compounds (VOCs) in the Paris megacity (France). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16: p. 11961-11989

NALIN Federica; GOLLY Benjamin; BESOMBES Jean-Luc; PELLETIER Charles; AUJAY Robin; VERLHAC Stéphane; DERMIGNY Adrien; FIEVET Amandine; KAROSKI Nicolas; DUBOIS Pascal; COLLET Serge; FAVEZ Olivier; ALBINET Alexandre.

Fast oxidation processes from emission to ambient air introduction of aerosol emitted by residential log wood stoves. *Atmospheric Environment*, 2016, 143: p. 15-26

BARTHELEMY Amélie; MOUCHARD Amandine; BOUJI Marc; BLAZY Kelly; PUIGSEGUR Renaud; VILLEGIER Anne-Sophie.

Glial markers and emotional memory in rats following acute cerebral radiofrequency exposures. *Environmental Science and Pollution Research*, 2016, 23 (24): p. 25343-25355

HUGUIER Pierre; MANIER Nicolas; PANDARD Pascal. Evaluation of the extraction efficiency for the *Hypoaspis aculeifer* reproduction test in the context of soil quality assessment. *Ecotoxicology*, 2016, 25 (10): p. 1867-1872

HENNEBERT Pierre; SAMAALI Ismahen; MOLINA Pauline. A proposal for a test method for assessment of hazard property HP12 ("Release of an acute toxic gas") in hazardous waste classification - Experience from 49 waste. *Waste Management*, 2016, 58: p. 25-33

LE GUERNIC Antoine; SANCHEZ Wilfried; PALLUEL Olivier; BADO-NILLES Anne; FLORIANI Magali; TURIÉS Cyril; CHADILI Edith; DELLA-VEDOVA Claire; CAVALIE Isabelle; ADAM-GUILLERMIN Christelle; PORCHER Jean-Marc; GEFFARD Alain; BÉTOULLE Stéphane; GAGNAIRE, Béatrice.

Acclimation capacity of the three-spined stickleback (*Gasterosteus aculeatus*, L.) to a sudden biological stress following a polymetallic exposure. *Ecotoxicology*, 2016, 25 (8): p. 1478-1499

COTE Ila; ANDERSEN Melvin E.; ANKLEY Gerald; BARONE Stanley; BIRNBAUM Linda; BOEKELHEIDE Kim; BOIS Frédéric Y.; BURGOON Lyle D.; CHIU Weihsueh A.; CRAWFORD-BROWN Douglas; CROFTON Kevin; DEVITO Michael; DEVLIN Robert B.; EDWARDS Stephen W.; GUYTON Kathryn Z.; HATTIS Dale B.; JUDSON Richard S.; KNIGHT Derek; KREWSKI Daniel; LAMBERT Jason; MAULL Elizabeth Anne; MENDRICK Donna; PAOLI Gregory M.; PATEL Chirag Jagdish; PERKINS Edward J.; POJE Gerald; PORTIER Christopher J.; RUSYN Ivan; SCHULTE Paul A.; SIMEONOV Anton; SMITH Martyn T.; THAYER Kristina A.; THOMAS Russell S.; THOMAS Reuben; TICE Raymond R.; VANDENBER John; VILLENEUVE Daniel L.; WESSELKAMPER Scott; WHELAN Maurice; WHITTAKER Christine; WHITE Ronald; XIA Menghang; YAUK Carole; ZEISE Lauren; ZHAO Jay; DEWOSKIN Robert S.

The next generation of risk assessment multi-year study-highlights of findings, applications to risk assessment, and future directions. *Environmental Health Perspectives*, 2016, 124 (11): p. 1671-1682

BESSAGNET Bertrand; PIROVANO Guido; MIRCEA Mihaela; CUVELIER Cornelius; AULINGER Armin; CALORI Giuseppe; CIARELLI Giancarlo; MANDERS Astrid; STERN Rainer; TSYRO Svetlana; VIVANCO Marta G.; THUNIS Philippe; PAY Maria-Teresa; COLETTE Augustin; COUVIDAT Florian; MELEUX Frédéric; ROUIL Laurence; UNG Anthony; AKSOYOGLU Sebnem; BALDASANO José Maria; BIESER Johannes; BRIGANTI Gino; CAPPELLETTI Andrea; D'ISIDORO Massimo; FINARDI Sandro; KRANENBURG Richard; SILIBELLO Camillo; CARNEVALE Claudio; AAS Wenche; DUPONT Jean-Charles; FAGERLI Hilde; GONZALEZ Lucia; MENUT Laurent; PREVOT André S.H.; ROBERTS, Pete; WHITE Les. Presentation of the EURODELTA III intercomparison exercise – evaluation of the chemistry transport models' performance

on criteria pollutants and joint analysis with meteorology. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16: p. 12667-12701

MENUT Laurent; SIOUR Guillaume; MAILLER Sylvain; COUVIDAT Florian; BESSAGNET Bertrand. Observations and regional modeling of aerosol optical properties, speciation and size distribution over Northern Africa and western Europe. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16: p. 12961-12982

SHAHPOURY Pourya; LAMMEL Gerhard; ALBINET Alexandre; SOFUOGLU Aysun; DUMANOGLU Yetkin; SOFUOGLU Sait C.; WAGNER Zdenek; ZDIMAL Vladimir. Evaluation of a conceptual model for gas-particle partitioning of polycyclic aromatic hydrocarbons using polyparameter linear free energy relationships. *Environmental Science & Technology*, 2016, 55 (22): p. 12312-12319

SHANDILYA Neeraj; LE BIHAN Olivier; BRESSOT Christophe; MORGENEYER Martin. Experimental protocol to investigate particle aerosolization of a product under abrasion and under environmental weathering. *Journal of Visualized Experiments*, 2016 (115): art. e53496

BESSAGNET Bertrand; MELEUX Frédéric; FAVEZ Olivier; MENUT Laurent; BEAUCHAMP Maxime; COLETTE Augustin; COUVIDAT Florian; ROUIL Laurence. Le rôle de l'agriculture sur les concentrations en particules dans l'atmosphère et l'apport de la modélisation. *Pollution Atmosphérique*, 2016 (229-230)

TRAVERSE Sylvie; CHASTANET Juliette; HULOT Corinne; COLLIGNAN Bernard. Les transferts de pollutions volatiles du sol vers l'air intérieur: diagnostic et modélisation des impacts. Guide méthodologique FLUXOBAT (2013). *Pollution Atmosphérique*, 2016 (231-232)

MERAD Myriam; CHOJNACKI Eric; ROUIL Laurence.

Prise en compte des incertitudes dans la cartographie des risques – quelques recommandations dans le cas de la prévention des pollutions atmosphériques. 20. *Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20)*, 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

MERAD Myriam; GUIONNET Dominique; ROUIL Laurence.

Les nouveaux enjeux des SHS pour la gestion des risques en matière de sûreté, de sécurité et d'environnement-santé. 20. *Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20)*, 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

VIVANCO Marta G.; COUVIDAT Florian; SEIGNEUR Christian; JANG Myoseon; SANTIAGO Manuel; BESSAGNET Bertrand.

Evaluation of some SOA formation schemes for the oxidation of anthropogenic gases against experiments in two outdoor chambers. *International Journal of Environment and Pollution*, 2016, 59 (1): p. 43-55

EVRARD Damien.

Approche intégrée pour une évaluation multicritère des meilleures techniques disponibles. Thèse de doctorat. École des mines de Saint-Etienne, 22/09/2016

HALLEMANS Elise.

Étude de la formation, du vieillissement et de la composition chimique de l'aérosol organique secondaire dans le bassin méditerranéen. Thèse de doctorat. Université de Paris Est, 05/12/2016

TENG Sophie.

Prédiction de l'hépatotoxicité induite par les mélanges de substances utilisées dans les produits cosmétiques à partir de données *in vitro*. Thèse de doctorat. AgroParisTech, 25/03/2016

RELIER Charlène.

Étude de la génotoxicité et du potentiel cancérigène des nanoparticules (TiO₂ et NanoTube de Carbone (NTC)) après une exposition sub-chronique chez les rongeurs. Thèse de doctorat. Université de Technologie de Compiègne, 24/11/2016

COLETTE Augustin; EL AMRAOUI Laaziz; SOLMON Fabien.

The (uncertain) future of air quality. The mediterranean region under climate change. *A Scientific Update*. IRD, 2016, p. 183-188

QUINDROIT Paul; BOIS Frédéric Y.; BROCHOT Céline.

Exposome. Year book Santé et Environnement. *Montrouge: John Libbey Eurotext Ltd.*, 2016, p. 201-204

LORET Thomas; PEYRET Emmanuel; DUBREUIL Mariëlle; AGUERRE-CHARIOL Olivier; BRESSOT Christophe; LE BIHAN Olivier; AMODEO Tanguy; TROUILLER Bénédicte; BRAUN Anne; EGLES Christophe; LACROIX Ghislaine.

Air-liquid interface exposure to aerosols of poorly soluble nanomaterials induces different biological activation levels compared to exposure to suspensions. *Particle and Fibre Toxicology*, 2016, 13: p. art. 58

PERE Hélène; RASCANU Aida; LEGOFF Jérôme; MATTA Mathieu; BOIS Frédéric Y.; LORTHOLARY Olivier; LEROY Valérie; LAUNAY Odile; BELEC Laurent.

Herpes simplex virus type 2 (HSV-2) genital shedding in HSV-2-/HIV-1-co-infected women receiving effective combination antiretroviral therapy. *International Journal of STD & AIDS*, 2016, 27 (3): p. 178-185

2017 /

GRECH Audrey; BROCHOT Céline; DORNE Jean-Lou; QUIGNOT Nadia; BOIS Frédéric Y.; BEAUDOUIN Rémy.
Toxicokinetic models and related tools in environmental risk assessment of chemicals. *Science of the Total Environment*, 2017, 578: p. 1-15

BRACK Werner; DULIO Valeria; AGERSTRAND Marlene; ALLAN Ian; ALTENBURGER Rolf; BRINKMANN Markus; BUNKE Dirk; BURGESS Robert M.; COUSINS Ian; ESCHER Beate I.; HERNANDEZ Felix; HEWITT L.M.; HILSCHEVA Klara; HOLLENDER Juliane; HOLLERT Henner; KASE Robert; KLAUER Bernd; LINDIM Claudia; HERRAEZ David Lopez; MIEGE Cécile; MUNTHE John; O'TOOLE Simon; POSTHUMA Leo; RUDEL Heinz; SCHAFFER Ralf B.; SENGL Manfred; SMEDES Foppe; VAN DE MEENT Dik; VAN DEN BRINK Paul J.; VAN GILS Jos; VAN WEZEL Annemarie; VETHAAK A. Dick; VERMEIRSEN Etienne; VON DER OHE Peter C.; VRANA Branislav.

Towards the review of the European Union Water Framework Directive: Recommendations for more efficient assessment and management of chemical contamination in European surface water resources. *Science of the Total Environment*, 2017, 576: p. 720-737

NEALE Peta A.; MUNZ Nicole A.; AIT-AISSA Selim; ALTENBURGER Rolf; BRION François; BUSCH Wibke; ESCHER Beate I.; HILSCHEVA Klara; KIENLE Cornelia; NOVAK Jiri; SEILER Thomas B.; SHAO Ying; STAMM Christian; HOLLENDER Juliane.
Integrating chemical analysis and bioanalysis to evaluate the contribution of wastewater effluent on the micropollutant burden in small streams. *Science of the Total Environment*, 2017, 576: p. 785-795

BARATA Carlos; CAMPOS Bruno; RIVETTI Claudia; LEBLANC Gerald A.; EYTCHESON Stephanie; MCKNIGHT Stephanie; TOBOR-KAPLON Marysia; DE VRIES BUITENWEG Selinda; CHOI, Suhyon; CHOI Jinhee; SARAPULTSEVA Elena I.; COUTELLE Marie-Agnès; COKE Maira; PANDARD Pascal; CHAUMOT Arnaud; QUEAU Hervé; DELORME Nicolas; GEFFARD Olivier; MARTINEZ-JERONIMO Fernando; WATANABE Haruna; TATARAZAKO, Norihisa; LOPES Isabel; PESTANA Joao L.T.; SOARES Amadeu; PEREIRA Cecilia Manuela; DE SCHAMPHELAERE Karel.

Validation of a two-generational reproduction test in *Daphnia magna*: An interlaboratory exercise. *Science of the Total Environment*, 2017, 579: p. 1073-1083

BOSSA Nathan; CHAURAND Perrine; LEVRARD Clément; BORSCHNECK Daniel; MICHE Hélène; VICENTE Jérôme; GEANTET Christophe; AGUERRE-CHARIOL Olivier; MICHEL F. Marc; ROSE Jérôme.

Environmental exposure to TiO₂ nanomaterials incorporated in building material. *Environmental Pollution*, 2017, 220: p. 1160-1170

SANTOS Raphaël; JOYEUX Aude; BESNARD Aurélien; BLANCHARD Christophe; HALKETT Cédric; BONY Sylvie; SANCHEZ, Wilfried; DEVAUX Alain.

An integrative approach to assess ecological risks of surface water contamination for fish populations. *Environmental Pollution*, 2017, 220: p. 588-596

BRESSOT Christophe; MANIER Nicolas; PAGNOUX Cécile; AGUERRE-CHARIOL Olivier; MORGENEYER Martin.

Environmental release of engineered nanomaterials from commercial tiles under standardized abrasion conditions. *Journal of Hazardous Materials*, 2017, 322: p. 276-283

BELIS, C.; BALDASANO, J.M.; BLOND, N.; BOULAND, C.; BUEKERS, J.; CARNEVALE, C.; CHERUBINI, A.; CLAPPIER, A.; DE SAEGER, E.; DOUROS, J.; FINZI, G.; FRAGKOU, E.; GAMA, C.; GRAFF, A.; GUARISO, G.; JANSSEN, S.; JUDA-REZLER; KARVOSENOJA, N.; MAFFEIS, G.; MARTILLI, A.; MILLS, S.; MIRANDA, A.I.; MOUSSIOPOULOS, N.; NAHORSKI, Z.; PISONI, E.; PONCHE, J.L.; RASOLOHARIMAHEFA, M.; REAL Elsa; REIZER, M.; RELVAS, H.; RONCOLATO, D.; TAINIO, M.; THUNIS, P.; VIAENE, P.; VLACHOKOSTAS, C.; VOLTA, M.; WHITE, L.

Current European AQ planning at regional and local scale. GUARISO, Giorgio; VOLTA, Marialuisa - Air Quality Integrated Assessment. A European Perspective. NC: Springer, 2017, p. 37-66 (*SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology*)

BLOND, N.; CARNEVALE, C.; DOUROS, J.; FINZI, G.; GUARISO, G.; JANSSEN, S.; MAFFEIS, G.; MARTILLI, A.; PISONI, E.; REAL, Elsa; TURRINI, E.; VIAENE, P.; VOLTA, M.

A framework for integrated assessment modelling. GUARISO, Giorgio; VOLTA, Marialuisa - Air Quality Integrated Assessment. A European Perspective. NC: Springer, 2017, p. 9-35 (*SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology*)

CARRE Florence; CAUDEVILLE Julien; BONNARD Roseline; BERT Valérie; BOUCARD Pierre; RAMEL Martine.

Soil contamination and human health: A major challenge for global soil security.

FIELD Damien J.; MORGAN Cristine L.S.; MCBRATNEY Alex B.

Global Soil Security. NC: Springer, 2017, p. 275-295 (*Progress in soil science*)

VIVANCO Marta G.; BESSAGNET Bertrand; CUVELIER C.; THEOBALD M.; TSYRO Svetlana; PIROVANO Guido; AULINGER Armin; BIESER Johannes; CALORI Giuseppe; CIARELLI Giancarlo; MANDERS Astrid; MIRCEA Mihaela; AKSOYOGLU Sebnem; BRIGANTI Gino; CAPPELLETTI Andrea; COLETTE Augustin; COUVIDAT Florian; D'ISIDORO Massimo;

KRANENBURG Richard; MELEUX Frédéric; MENUT Laurent; PAY Maria-Teresa; ROUIL Laurence; SILIBELLO Camillo; THUNIS Philippe; UNG Anthony.

Joint analysis of deposition fluxes and atmospheric concentrations of inorganic nitrogen and sulphur compounds predicted by six chemistry transport models in the frame of the EURODELTAIII project. *Atmospheric Environment*, 2017, 151: p. 152-175

PETIT Jean-Eudes; FAVEZ Olivier; ALBINET Alexandre; CANONACO Francesco.

A user-friendly tool for comprehensive evaluation of the geographical origins of atmospheric pollution: Wind and trajectory analyses. *Environmental Modelling & Software*, 2017, 88: p. 183-187

BERT Valérie; ALLEMON Julienne; SAJET Philippe; DIEU Sébastien; PAPIN Arnaud; COLLET Serge; GAUCHER Rodolphe; CHALOT Michel; MICHIELS Boudewijn; RAVENTOS Cécile.

Torrefaction and pyrolysis of metal-enriched poplars from phytotechnologies: Effect of temperature and biomass chlorine content on metal distribution in end-products and valorization options. *Biomass and Bioenergy*, 2017, 96: p. 1-11

ZHANG Yunjiang; TANG Lili; SUN Yele; FAVEZ Olivier; CANONACO Francesco; ALBINET Alexandre; COUVIDAT Florian; LIU Dantong; JAYNE John; WANG Zhuang; CROTEAU Philip; CANAGARATNA Manjula; ZHOU Hongcang; PREVOT André S.H.; WORSNOP Douglas.

Limited formation of isoprene epoxydiols-derived secondary organic aerosol under NOx-rich environments in Eastern China. *Geophysical Research Letters*, 2017, 44 (4): p. 2035-2043

JUBERG Daland R.; KNUDSEN Thomas B.; SANDER Miriam; BECK Nancy B.; FAUSTMAN Elaine; MENDRICK Donna; FOWLE John R.; HARTUNG Thomas; TICE Raymond R.; LEMAZURIER Emmanuel;

BECKER Richard A.; COMPTON FITZPATRICK Suzanne; DASTON George P.; HARRILL Alison; HINES Ronald N.; KELLER Douglas A.; LIPSCOMB John C.; WATSON David; BAHADORI Tina; CROFTON Kevin. FutureTox III: Bridges for translation. *Toxicological Sciences*, 2017, 155 (1): p. 22-31

KUNZ Petra Y.; SIMON Eszter; CREUSOT Nicolas; JAYASINGHE Sumith; KIENLE Cornelia; MALETZ Sibylle; SCHIFFERLI Andrea; SCHONLAU Christine; AIT-AISSA Selim; DENSLow Nancy D.; HOLLERT Henner; WERNER Inge; VERMEIRSSSEN Etienne.

Effect-based tools for monitoring estrogenic mixtures: Evaluation of five *in vitro* bioassays. *Water Research*, 2017, 110: p. 378-388

BENMERAD Meriem; SLAMA Rémy; BOTTURI Karine; CLAUSTRE Johanna; ROUX Antoine; SAGE Edouard; REYNAUD-GAUBERT Martine; GOMEZ Carine; KESSLER Romain; BRUGIERE Olivier; MORNEX Jean-François; MUSSOT Sacha; DAHAN Marcel; BOUSSAUD Véronique; DANNER-BOUCHER Isabelle; DROMER Claire; KNOOP Christiane; AUFRAY Annick; LEPEULE Johanna; MALHERBE Laure; MELEUX Frédéric; NICOD Laurent; MAGNAN Antoine; PISON Christophe; SIROUX Valérie.

Chronic effects of air pollution on lung function after lung transplantation in the Systems prediction of Chronic Lung Allograft Dysfunction (SysCLAD) study. *European Respiratory Journal*, 2017, 49 (1): art. 1600206

GOMBERT Philippe; BIAUDET Hugues; DE SEZE René; PANDARD Pascal; CARRE Jean.

Toxicity of fluorescent tracers and their degradation byproducts. *International journal of Speleology*, 2017, 46 (1): p. 23-31

LE FOL Vincent; AIT-AISSA Selim; SONAVANE Manoj; PORCHER Jean-Marc; BALAGUER Patrick; CRAVEDI Jean-Pierre; ZALKO Daniel; BRION François.

In vitro and *in vivo* estrogenic activity of BPA, BPF and BPS

in zebrafish-specific assays. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2017, 142: p. 150-156

CIADAMIDARO, Lisa; GIRARD CLOS Olivier; BERT Valérie; ZAPPELINI Cyril; YUNG Loïc; FOULON Julie; PAPIN Arnaud; ROY Sébastien; BLAUDEZ Damien; CHALOT Michel.

Poplar biomass production at phytomanagement sites is significantly enhanced by mycorrhizal inoculation. *Environmental and Experimental Botany*, 2017, 139: p. 48-56

GARTISER Stefan; HEISTERKAMP Ines; SCHOKNECHT Ute; BURKHARDT Michael; RATTE Monika; ILVONEN Outi; BRAUER Frank; BRUCKMANN Jan; DABRUNZ André; EGELER Philipp; EISL Andrea-Maria; FEILER Ute; FRITZ Ines; KONIG Sabina; LEBERTZ Herbert; PANDARD Pascal; POTSCHEKE Gabriele; SCHEERBAUM Dirk; SCHREIBER Frank; SOLDAN Premysl; WEISS Roland; WELTENS Reinhilde.

Results from a round robin test for the ecotoxicological evaluation of construction products using two leaching tests and an aquatic test battery. *Chemosphere*, 2017, 175: p. 138-146

PETIT Jean-Eudes; AMODEO Tanguy; MELEUX Frédéric; BESSAGNET Bertrand; MENUT Laurent; GRENIER Didier; PELLAN Yann; OCKLER Alexandre; ROCQ Benoit; GROS Valérie; SCIARE Jean; FAVEZ Olivier.

Characterising an intense PM pollution episode in March 2015 in France from multi-site approach and near real time data: Climatology, variabilities, geographical origins and model evaluation. *Atmospheric Environment*, 2017, 155: p. 68-84

LACRESSONNIERE Gwendoline; WATSON Laura; GAUSS Michael; ENGARDT Magnuz; ANDERSSON Camilla; BEEKMANN Matthias; COLETTE Augustin; FORET Gilles; JOSSE Béatrice; MARECAL Virginie; NYIRI Agnès; SIOUR, Guillaume; SOBOLOWSKI Stefan; VAUTARD Robert.

Particulate matter air pollution in Europe in a +2°C warming world. *Atmospheric Environment*, 2017, 154: p. 129-140

SCHULZE Tobias; AHEL Marijan; AHLHEIM Jorg; AIT-AISSA, Selim; BRION François; DI PAOLO Carolina; FROMENT Jean; HIDASI Anita; HOLLENDER Juliane; HOLLERT, Henner; HU Meng; KLOSS Anett; KOPRIVICA, Sanja; KRAUSS, Martin; MUZ Melis; OSWALD Peter; PETRE Margit; SCHOLLEE Jennifer; SEILER, Thomas B.; SHAO Ying; SLOBODNIK Jaroslav; SONAVANE Manoj; SUTER Marc J.F.; TOLLEFSEN Knut Erik; TOUSOVA Zuzana; WALZ Karl-Heinz; BRACK Werner.

Assessment of a novel device for onsite integrative large-volume solid phase extraction of water samples to enable a comprehensive chemical and effect-based analysis. *Science of the Total Environment*, 2017, 581-582: p. 350-358

BOTTERO Jean-Yves; ROSE Jérôme; DE GARIDEL C.; MASION A.; DEUTSCH T.; BROCHARD G.; CARRIERE M.; GONTARD N.; WORTHAM H.; RABILLOUT T.; SALLES B.; DUBOSSON M.; CATHALA B.; BOUTRY D.; ERESKOVSKY A.; AUPLAT C.; CHARLET L.; HEULIN T.; FREJAFON Emeric; LANONE Sophie.
SERENADE: safer and ecodesign research and education applied to nanomaterial development, the new generation of materials safer by design. *Environmental Science Nano*, 2017, 4: p. 526-538

LE FOL Vincent; BRION François; HILLENWECK Anne; PERDU Elisabeth; BRUEL Sandrine; AIT-AISSA Selim; CRAVEDI Jean-Pierre; ZALKO Daniel.
Comparison of the *in vivo* biotransformation of two emerging estrogenic contaminants, BP2 and BPS, in Zebrafish embryos and adults. *International Journal of Molecular Sciences*, 2017, 18 (4): p. art. 704

CAUDEVILLE Julien; IOANNIDOU Despoina; BOULVERT Emmanuelle; BONNARD Roseline.

Cumulative risk assessment in the Lorraine region: a framework to characterize environmental health inequalities. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2017, 14 (3): p. art. 291

RAJA Pavan M.V.; LACROIX Ghislaine; SERGENT Jacques-Aurélien; BOIS Frédéric Y.; BARRON Andrew R.; MOMBELLI Enrico; ELGRABLI Dan.

Nanotoxicology: role of physical and chemical characterization and related *in vitro*, *in vivo*, and *in silico* methods.

MANSFIELD Elisabeth; KAISER Debra L.; FUJITA Daisuke; VAN DE VOORDE Marcel.

Metrology and standardization of nanotechnology: protocols and industrial innovations. *Weinheim: Wiley*, 2017, p. 363-379

ASAD Mohammad; MENANA Zahra; ZIEGLER-DEVIN Isabelle; BERT Valérie; CHALOT Michel; HERZIG Rolf; MENCH Michel; BROSSE Nicolas.

Pretreatment of trace element-enriched biomasses grown on phytomanaged soils for bioethanol production. *Industrial Crops and Products*, 2017, 107: p. 63-72

QUINTELAS-SABARIS Celestino; MARCHAND Lilian; KIDD Petra; FRIEHL-HANL Wolfgang; PUSCHENREITER Markus; KUMPIENE Jurate; MULLER Ingo; NEU Silke; JANSSEN Jolien; VANGRONSVELD Jaco; DIMITRIOU Ioannis; SIEBIELEC Grzegorz; GALAZKA Rafal; BERT Valérie; HERZIG Rolf; CUNDY Andrew; OUSTRIERE Nadège; KOLBAS Aliaksandr; GALLAND William; MENCH Michel.

Assessing phytotoxicity of trace element-contaminated soils phytomanaged with gentle remediation options at ten European field trials. *Science of the Total Environment*, 2017, 599-600: p. 1388-1398

KNIST Sebastian; GOERGEN Klaus; BUONOMO Erasmo; CHRISTENSEN, Ole Bossing; COLETTE Augustin; CARDOSO Rita Margarida; FEALY Rowan; FERNANDEZ Jesus; GARCIA-DIEZ Markel; JACOB Daniela; KARTSIOS Stergios; KATRAGKOU Eleni; KEULER Klaus; MAYER Stephanie; VAN MEIJGAARD Erik; NIKULIN Grigory; SOARES Pedro; SOBOLOWSKI Stefan; SZEPSZO Gabriella; TEICHMANN Claas; VAUTARD Robert; WARRACH-SAGI Kirsten; WULFMEYER Volker; SIMMER Clemens.

Land-atmosphere coupling in EURO-CORDEX evaluation experiments. *Journal of Geophysical Research - Atmospheres*, 2017, 122: p. 79-103

DATTA Sagnik; GAYRAUD Ghislaine; LECLERC Eric; BOIS Frédéric Y. Graph_sampler: a simple tool for fully Bayesian analyses of DAG-models. *Computational Statistics*, 2017, 32: p. 691-716

TEBBY Cléo; JOACHIM Sandrine; VAN DEN BRINK Paul J.; PORCHER Jean-Marc; BEAUDOUIN Rémy. Analysis of community-level mesocosm data based on ecologically meaningful dissimilarity measures and data transformation. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2017, 36 (6): p. 1667-1679

MORGAN Cristine L.S.; MCBRATNEY Alex B.; FIELD Damien J.; KOCH Andrea; BOUMA Johan; CARRE Florence. Synthesis: Goals to Achieve Soil Security. FIELD, Damien J.; MORGAN, Cristine L.S.; MCBRATNEY, Alex B. - Global Soil Security. NC: Springer, 2017, p. 457-462 (*Progress in soil science*)

TOMAZ Sophie; JAFFREZO Jean-Luc; FAVEZ Olivier; PERRAUDIN Emilie; VILLENAVE Eric; ALBINET Alexandre. Sources and atmospheric chemistry of oxy- and nitro-PAHs in the ambient air of Grenoble (France). *Atmospheric Environment*, 2017, 161: p. 144-154

DRINOVEC Luka; GREGORIC Asta; ZOTTER Peter; WOLF Robert; BRUNS Emily Anne; PREVOT André S.H.; PETIT Jean-Eudes; FAVEZ Olivier; SCIARE Jean; ARNOLD Ian J.; CHAKRABARTY Rajan K.; MOOSMULLER Hans; FILEP Agnes; MOCNIK Grisa.

The filter-loading effect by ambient aerosols in filter absorption photometers depends on the coating of the sampled particles. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2017, 10: p. 1043-1059

TOUSOVA Zuzana; OSWALD Peter; SLOBODNIK Jaroslav; BLAHA Ludek; MUZ Melis; HU Meng; BRACK Werner; KRAUSS Martin; DI PAOLO Carolina; TARCAI Zolt; SEILER Thomas B.; HOLLERT Henner; KOPRIVICA Sanja; AHEL Marijan; SCHOLLEE Jennifer; HOLLENDER Juliane; SUTER Marc J.F.; HIDASI Anita; SCHIRMER Kristin; SONAVANE Manoj; AIT-AISSA Selim; CREUSOT Nicolas; BRION François; FROMENT Jean; ALMEIDA Ana catarina; THOMAS Kevin; TOLLEFSEN Knut Erik; TUFI Sara; OUYANG Xiyu; LEONARDS Pim; LAMOREE Marja; OSORIO TORRENS Victoria; KOLKMAN Annemieke; SCHRIKS Merijn; SPIRHZANZLOVA Petra; TINDALL Andrew J.; SCHULZE Tobias.

European demonstration program on the effect-based and chemical identification and monitoring of organic pollutants in European surface waters. *Science of the Total Environment*, 2017, 601-602: p. 1849-1868

PERY Alexandre; DEVILLERS James; BEAUDOUIN Rémy. Modélisation mécanistique au niveau individuel.

PERY Alexandre; GARRIC Jeanne. Les effets écotoxicologiques: De la molécule à la population. NC: ISTE éditions, 2017, p. 121-148

BEAUDOUIN Rémy; COULAUD Romain; DEVILLERS James; DUR Gaël; PELOSI Céline; PERY Alexandre; SOUSSI Yasmine. Le changement d'échelle de l'individu à la population.

PERY Alexandre; GARRIC Jeanne. Les effets écotoxicologiques: De la molécule à la population. NC: ISTE éditions, 2017, p. 149-212

BERT Valérie; DOUAY Francis; FAURE Olivier.

Les phytotechnologies appliquées aux sites et sols pollués: Nouveaux résultats de recherche et démonstration. Angers: ADEME, 2017

RELIER Charlène; DUBREUIL Marielle; LOZANO GARCIA Omar; CORDELLI Eugenia; MEJIA Jorge; ELEUTERI Patrizia; ROBIDEL Franck; LORET Thomas; PACCHIEROTTI Francesca; LUCAS Stéphane; LACROIX Ghislaine; TROUILLER Bénédicte.

Study of TiO₂ P25 Nanoparticles Genotoxicity on Lung, Blood, and Liver Cells in Lung Overload and Non-Overload Conditions After Repeated Respiratory Exposure in Rats. *Toxicological Sciences*, 2017, 152 (2): p. 527-537

ARRHENIUS Karine; YAGHOoby Haleh; ROSELL Lars; BUKER Olivier; CULLETON Lucy; BARTLETT Sam; MURUGAN Arul; BREWER Paul; LI Jianrong; VAN DER VEEN Adriaan M.H.; KROM Iris; LESTREMAU François; BERANEK Jan.

Suitability of vessels and adsorbents for the short-term storage of biogas/biomethane for the determination of impurities - Siloxanes, sulfur compounds, halogenated hydrocarbons, BTEX. *Biomass and Bioenergy*, 2017, 105: p. 127-135

MAILLER Sylvain; MENUT Laurent; KHVOROSTYANOV Dmitry; VALARI Myrto; COUVIDAT Florian; SIOUR Guillaume; TURQUETY Solène; BRIANT Régis; TUCCELLA Paolo; BESSAGNET Bertrand; COLETTE Augustin; LETINOIS Laurent; MARKAKIS Konstantinos; MELEUX Frédéric.

CHIMERE-2017: from urban to hemispheric chemistry-transport modeling. *Geoscientific Model Development*, 2017, 10: p. 2397-2423

DANIELE Gaëlle; FIEU Maëva; JOACHIM Sandrine; BADO-NILLES Anne; BEAUDOUIN Rémy; BAUDOIN Patrick; JAMES CASAS Alice;

ANDRES Sandrine; BONNARD Marc; BONNARD Isabelle; GEFFARD Alain; VULLIET Emmanuelle.

Determination of carbamazepine and 12 degradation products in various compartments of an outdoor aquatic mesocosm by reliable analytical methods based on liquid chromatography-tandem mass spectrometry. *Environmental Science and Pollution Research*, 2017, 24 (20): p. 16893-16904

NEALE Peta A.; ALTENBURGER Rolf; AIT-AISSA Selim; BRION François; BUSCH Wibke; DE ARAGAO UMBUZEIRO Gisela; HOLLERT Henner; MORALES Daniel A.; NOVAK Jiri; SCHLICHTING Rita; SEILER Thomas B.; SERRA Hélène; SHAO Ying; TINDALL Andrew J.; TOLLEFSEN Knut Erik; WILLIAMS Timothy D.; ESCHER Beate I.
Development of a bioanalytical test battery for water quality monitoring: Fingerprinting identified micropollutants and their contribution to effects in surface water. *Water Research*, 2017, 123: p. 734-750

MENUT Laurent; MAILLER Sylvain; BESSAGNET Bertrand; SIOUR Guillaume; COLETTE Augustin; COUVIDAT Florian; MELEUX Frédéric.
An alternative way to evaluate chemistry-transport model variability. *Geoscientific Model Development*, 2017, 10: p. 1199-1208

ANDRIANOME Soafara; HUGUEVILLE Laurent; DE SEZE René; SELMAOUI Brahim.
Increasing levels of saliva alpha amylase in electrohypersensitive (EHS) patients. *International Journal of Radiation Biology*, 2017, 93 (8): p. 841-848

ANDRIANOME Soafara; GOBERT Jonathan; HUGUEVILLE Laurent; STEPHAN-BLANCHARD Erwan; TELLIEZ Frédéric; SELMAOUI Brahim.
An assessment of the autonomic nervous system in the electrohypersensitive population: a heart rate variability and skin conductance study. *Journal of Applied Physiology*, 2017: p. Accepté

JOACHIM Sandrine; ROUSSEL Hélène; BONZOM Jean-Marc; THYBAUD Eric; MEBANE Christopher A.; VAN DEN BRINK Paul J.; GAUTHIER Laury.

A long-term copper exposure in a freshwater ecosystem using lotic mesocosms: Invertebrate community responses. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2017: p. Accepté

BERT Valérie; NEU Silke; ZDANEVITCH Isabelle; FRIESL-HANL Wolfgang; COLLET Serge; GAUCHER Rodolphe; PUSCHENREITER Markus; MULLER Ingo; KUMPIENE Jurate.
How to manage plant biomass originated from phytotechnologies? Gathering perceptions from end-users. *International Journal of Phytoremediation*, 2017: p. Accepté

MUNOZ Gabriel; LABADIE Pierre; BOTTA Fabrizio; LESTREMAU François; LOPEZ Benjamin; GENESTE Emmanuel; PARDON Patrick; DEVIER Marie-Hélène; BUDZINSKI Hélène.

Occurrence survey and spatial distribution of perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl surfactants in groundwater, surface water, and sediments from tropical environments. *Science of the Total Environment*, 2017, 607-608: p. 243-252

LE BIHAN Olivier; OUNOUGHENE Ghania; MEUNIER Laurent; DEBRAY Bruno; AGUERRE-CHARIOL Olivier.
Incineration of a Commercial Coating with Nano CeO₂. *Journal of Physics - Conference Series*, 2017, 838: p. art 012023

OUNOUGHENE Ghania; LE BIHAN Olivier; DEBRAY Bruno; CHIVAS-JOLY Carine; LONGUET Claire; JOUBERT A.; LOPEZ-CUESTA José-Marie; LE COQ Laurence.
Thermal disposal of waste containing nanomaterials: first investigations on a methodology for risk management. *Journal of Physics - Conference Series*, 2017, 838: p. art 012024

LAKE Iain R.; JONES Natalia R.; AGNEW Maureen; GOODESS Clare M.; GIORGI Filippo; HAMAOU-LAGUEL Lynda; SEMENOV Mikhail A.; SOLOMON Fabien; STORKEY Jonathan; VAUTARD Robert; EPSTEIN Michelle M.

Climate change and future pollen allergy in Europe. *Environmental Health Perspectives*, 2017, 125 (3): p. 385-391

MICHOU Vincent; SCIARE Jean; SAUVAGE Stéphane; DUSANTER Sébastien; LEONARDIS Thierry; GROS Valérie; KALOGRIDIS Cerise; ZANNONI Nora; FERON Anais; PETIT Jean-Eudes; CRENN Vincent; BAISNEE Dominique; SARDA-ESTEVE Roland; BONNAIRE Nicolas; MARCHAND Nicolas; DEWITT H. Langley; PEY Jorge; COLOMB Aurélie; GHEUSI François; SZIDAT Sonke; STAVROULAS Iasonas; BORBON Agnès; LOCOGE Nadine.

Organic carbon at a remote site of the western Mediterranean Basin: sources and chemistry during the ChArMEx SOP2 field experiment. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2017, 17: p. 8837-8865

ANDRIANOME Soafara.
Intolérance environnementale idiopathique avec attribution aux champs électromagnétiques (IEI-CEM): Étude des systèmes nerveux sympathique, endocrinien et immunitaire. Thèse de doctorat (Physiologie humaine). Université d'Amiens, 12/01/2017, 257 p.

BOUDHIB Mohamed.
Analyse d'aérosols par méthodes LIBS sans étalonnage et LIBS couplée à une cellule radio-fréquence utilisée comme piège à particules. Thèse de doctorat (Physique des plasmas et optique). Université d'Orléans, 31/03/2017

BOULANGE Marine.
Mobilisation et transfert des composés aromatiques polycycliques (HAP et CAP polaires) dans les sols historiquement contaminés par des goudrons de houille. Expérimentations au laboratoire et *in situ*. Thèse de doctorat (Géosciences). Université de Lorraine, 19/05/2017

OLIVEIRA Diogo.

Identification of the main sources and geographical origins of PM₁₀ in the northern part of France. Thèse de doctorat (Optique et Lasers, Physico-Chimie, Atmosphère). École nationale supérieure des Mines de Douai, 27/01/2017

LORET Thomas.

Capacité de modèles *in vitro* de complexité différente à prédire les réponses toxiques pulmonaires observées *in vivo* après exposition aiguë à des nanoparticules de TiO₂ et de CeO₂. Thèse de doctorat. Université de Technologie de Compiègne, 20/03/2017, 224 p.

BEAUCHAMP Maxime; DE FOUQUET Chantal; MALHERBE Laure.

Dealing with non-stationarity through explanatory variables in kriging-based air quality maps. *Spatial Statistics*, 2017, 22: p. 18-46

MARCHAND Adrien; PORCHER Jean-Marc; TURIÉS Cyril; CHADILI Edith; PALLUEL Olivier; BAUDOIN Patrick; BETOULLE Stéphane; BADO-NILLES, Anne.

Evaluation of chlorpyrifos effects, alone and combined with lipopolysaccharide stress, on DNA integrity and immune responses of the three-spined stickleback, *Gasterosteus aculeatus*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2017, 145: p. 333-339

BROCHOT Céline; QUINDROIT Paul.

Modelling the fate of chemicals in humans using a lifetime physiologically based pharmacokinetic (PBPK) model in MERLIN-expo.

CIFFROY, Philippe; TEDIOSI, Alice; CAPRI, Ettore.

Modelling the Fate of Chemicals in the Environment and the Human Body. Cham: Springer, 2018, p. 215-257 (*The Handbook of Environmental Chemistry*, 57)

DE WILDE Tineke; VERDONCK Frederik; TEDIOSI Alice; TANAKA Taku; BONNARD Roseline; BANJAC Zoran; ISIGONIS Panagiotis; GIUBILATO Elisa; CRITTO Andrea; ZABEO Alex; SUCIU, Nicoleta; GARRATT James; CIFFROY Philippe.

SWOT analysis of the MERLIN-Expo tool and its relevance in legislative frameworks.

CIFFROY, Philippe; TEDIOSI, Alice; CAPRI, Ettore.

Modelling the Fate of Chemicals in the Environment and the Human Body. Cham: Springer, 2018, p. 23-57 (*The Handbook of Environmental Chemistry*, 57)

RISQUES ACCIDENTELS 2016**GUO Xiaolu; YAN Xingqing; YU Jianlang; ZHANG, Yong Chun; CHEN Shaoyun; MAHGEREFTEH, Haroun; MARTYNOV Sergey; COLLARD Alexander; PROUST Christophe.**

Under-expanded jets and dispersion in supercritical CO₂ releases from a large-scale pipeline. *Applied Energy*, 2016, 183: p. 1279-1291

FAYET Guillaume; ROTUREAU Patricia.

How to use QSPR-type approaches to predict properties in the context of Green Chemistry. *Biofuels Bioproducts & Biorefining*, 2016, 10 (6): p. 738-752

CAGNINA Stefania; ROTUREAU Patricia; SINGH Shanti; TURCOTTE Richard; FAYET Guillaume; ADAMO Carlo.

Theoretical and experimental study of the reaction between ammonium nitrate and sodium salts. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, 55 (47): p. 12183-12190

GAUDIN Théophile; ROTUREAU Patricia; PEZRON Isabelle; FAYET Guillaume.

New QSPR models to predict the critical micelle concentration of sugar-based surfactants. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, 55 (45): p. 11716-11726

MEBARKI Ahmed; JEREZ Sandra; PROD'HOMME Gaëtan; REIMERINGER Mathieu.

Natural hazards, vulnerability and structural resilience: tsunamis and industrial tanks. *Geomatics Natural Hazards and Risk*, 2016, 7 (S1): p. 5-17

MAZRI Chabane.

Safety Performance Indicators System (SPIS): A methodological framework for safety indicators conception. 13. International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM 13), 02/10/2016 - 07/10/2016, Séoul, République de Corée

MAZRI Chabane; FLORIN Marie Valentine.

Introduction au Guide de gouvernance des risques émergents IRGC-Ineris. 20. Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20), 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

MAZRI Chabane.

Pilotage dynamique de la sécurité par les indicateurs. Introduction au guide Ineris. 20. Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20), 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

LE-COZE Jean Christophe; MOULIN Ludovic; PERINET Romuald; HERCHIN Nicolas.

Exploration comparée de 4 trajectoires d'ingénierie FOH dans le secteur de l'énergie - premiers enseignements. 20. Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20), 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

ESCANDE Jean; PROUST Christophe; LE COZE Jean-Christophe.

Mieux comprendre les fondements des analyses des risques pour les améliorer: la place du « déclin ». 20. Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20), 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

BOUDALAA Mohamed; DEBRAY Bruno.

ATEX et installations industrielles: éléments de retour d'expérience issus d'une vingtaine d'années d'enquêtes après accidents. 20. Congrès de maîtrise des risques et sûreté de fonctionnement (Lambda-Mu 20), 11/10/2016 - 13/10/2016, Saint-Malo, FRANCE

ABADA Sara.

Compréhension et modélisation de l'emballage thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles. Thèse de doctorat. 14/12/2016

GAUDIN Théophile.

Développement de modèles QSPR pour la prédiction et la compréhension des propriétés amphiphiles des tensioactifs dérivés de sucre. Thèse de doctorat. Université de Technologie de Compiègne, 30/11/2016

RAHMAN Shihab;**TRUCHOT Benjamin.**

A tridimensional numerical study of the FLUMILOG warehouse fire experiment. *Proceedings of the 14th International Interflam Conference*. 2016, p. 601-606

AUFAUVRE Lionel.

European directive 2013/29/EU and person with specialist knowledge. 42. International Pyrotechnics Society Seminar, 10/07/2016 - 15/07/2016, Grand Junction, États-Unis

TRUCHOT Benjamin; LEROY**Guillaume; MARLAIR Guy.**

CFD and engineering method coupling for evaluating the fire relative to battery transportation. STURM, Peter J.; MINARIK, Sabine - *Proceedings of the 8th International Conference on Tunnel Safety and Ventilation*. 2016, p. 132-140

TRUCHOT Benjamin;**FOUILLEN Fabien; COLLET Serge.**

An experimental evaluation of the toxic gas emission in case of vehicle fires. LONNERMARK, Anders; INGASON, Haukur - *Proceedings of the 7th International Symposium on Tunnel Safety and Security*. 2016, p. 419-429

CHAUMETTE Sylvain.

Installations classées pour la protection de l'environnement (ICPE) - Établissements Seveso. Techniques de l'Ingénieur. Paris: *Editions Techniques de l'Ingénieur*, 2016, p. G4250v2

2017 /

BEN MOUSSA Rim; PROUST

Christophe; GUESSASMA Mohamed; SALEH Khashayar. Physical mechanisms involved into the flame propagation process through aluminum dust-air clouds: A review. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2017, 45: p. 9-28

JANES Agnès; LESAGE Jérôme;**WEINBERGER Benno;****CARSON Douglas.**

Experimental determination of minimum ignition current (MIC) ratio of hydrogen/methane (H₂NG) blends up to 20 vol.% of hydrogen. *Process Safety and Environmental Protection*, 2017, 107: p. 299-308

GAUDIN Théophile; ROTUREAU**Patricia; PEZRON Isabelle;****FAYET Guillaume.**

Conformations of n-alkyl- α/β -D-glucopyranoside surfactants: Impact on molecular properties. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2017, 1101: p. 20-29

LE COZE Jean-Christophe.

Globalization and high-risk systems. *Policy and Practice in Health and Safety*, 2017, 15 (1)

JOHN Astrid C. ; KUPPER Miriam;**MANDERS-GROOT Astrid M.M. ;****DEBRAY Bruno; LACOME Jean-Marc;****KUHLBUSCH Thomas A.J.**

Emissions and possible environmental implication of engineered nanomaterials (ENMs) in the atmosphere. *Atmosphere*, 2017, 8 (5): p. art. 84

ABDO Houssein; FLAUS**Jean-Marie; MASSE François.**

Fuzzy semi-quantitative approach for probability evaluation using Bow-Tie analysis.

CEPIN, Marko; BRIS, Radim.

Safety and Reliability - Theory and Applications. *Proceedings of ESREL 2017*. CRC Press, 2017, p. 2597-2605

ABDO Houssein; KAOUK M. ;**FLAUS, Jean-Marie; MASSE François.**

Towards a better industrial risk analysis: A new approach that combines cyber security within safety.

CEPIN, Marko; BRIS, Radim.

Safety and Reliability - Theory and Applications. *Proceedings of ESREL 2017*. CRC Press, 2017, p. 1215-1222

VALLEE Agnès; DEBRAY Bruno;**DE DIANOUS Valérie; BOLVIN, Christophe.**

The methodologies used in France for demonstrating risk control of a major accident: A heritage of the ARAMIS project?

BERNATIK, Ales; HUANG, Chongfu;**SALVI, Olivier.** Risk Analysis and

Management - Trends, Challenges and Emerging Issues. *Proceedings of the 6th International Conference on Risk Analysis and Crisis Response (RACR 2017)*. CRC Press, 2017, p. 293-300

ZHENG Wentian; MAHGEREFTEH**Haroun; JAMOIS, Didier; HEBRARD****Jérôme; PROUST Christophe.**

Modeling of depressurization-induced superheating for compressed liquefied gases. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2017, 56 (18): p. 5432-5442

PRANA Vinca; ROTUREAU Patricia;**ANDRE David; FAYET Guillaume;****ADAMO, Carlo.**

Development of simple QSPR models for the prediction of the heat of decomposition of organic peroxides. *Molecular Informatics*, 2017: p. Accepté

MAZRI Chabane. (Re)

Defining Emerging Risks. *Risk Analysis*, 2017: p. Accepté

FORESTIER Coralie.

Influence de l'électrolyte sur la sécurité des batteries li-ion: rôle des additifs et du sel de lithium. Thèse de doctorat. Université d'Amiens, 11/01/2017

DENAT Tom.

Creation of a Biodiversity Severity Index to evaluate the risks of accidental pollutions in the industry: A multi-criteria sorting approach. Thèse de doctorat (Informatique). Université de Paris 9, 05/07/2017

ESHETU Gebrekidan G.; JEONG Sangsik; PANDARD Pascal; LECOQ Amandine; MARLAIR Guy; PASSERINI Stefano.

Comprehensive insights into the thermal stability, biodegradability, and combustion chemistry of pyrrolidinium-based ionic liquids. *ChemSusChem*, 2017, 10 (15): p. 3146–3159

HALM Damien; FOUILLEN Fabien; LAINE Eric; GUEGUEN Mikael; BERTHEAU Denis; VAN EEKELÉN Tom.

Composite pressure vessels for hydrogen storage in fire conditions: Fire tests and burst simulation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42 (31): p. 20056–20070

PROUST Christophe; BEN MOUSSA Rim; GUESSASMA Mohamed; SALEH Khashayar; FORTIN Jérôme.

Augmentation du risque d'explosion de poussières sous l'effet du rayonnement thermique. 16. Congrès de la Société française de génie des procédés (SFGP 2017), 11/07/2017 - 13/07/2017, Nancy, France

DUCLOS Audrey; PROUST Christophe; DAUBECH Jérôme; VERBECKE Franck.

Ingénierie de la sécurité appliquée à des applications hydrogène-énergie. 16. Congrès de la Société française de génie des procédés (SFGP 2017), 11/07/2017 - 13/07/2017, Nancy, France

LACOME Jean-Marc; VIGNES Alexis; DEBRAY Bruno; TRUCHOT Benjamin; FEDE Pascal; CLIMENT Eric; LE Hong Duc.

Modelling of nanoparticle jet from leakage of conveying pipe - breakage of nanoparticle aggregate. 16. Congrès de la Société française de génie des procédés (SFGP 2017), 11/07/2017 - 13/07/2017, Nancy, France

GREGOIRE Yann; LEPRETTE Emmanuel; PROUST, Christophe.

Safety systems engineering in chemical engineering. 16. Congrès de la Société française de génie des procédés (SFGP 2017), 11/07/2017 - 13/07/2017, Nancy, France

PROUST Christophe; BEN MOUSSA Rim; GUESSASMA Mohamed; KHASHAYAR Saleh; FORTIN Jérôme.

Potential accelerating effect of thermal radiation in dust flame propagation: some experimental evidence. 26. International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), 30/07/2017 - 04/08/2017, Boston, États-Unis

GREGOIRE Yann; PROUST Christophe; LEPRETTE Emmanuel; JAMOIS Didier.

Monitoring of a dust explosion in a 10 m³ vessel. 26. International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), 30/07/2017 - 04/08/2017, Boston, États-Unis

HEUDIER Laure; LECOQ, Guillaume; GREGOIRE Yann; PROUST Christophe.

Investigation on the diffraction of a medium scale gaseous deflagration pressure wave behind a protective wall. 26. International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), 30/07/2017 - 04/08/2017, Boston, États-Unis

RISQUES DU SOL ET DU SOUS-SOL 2016

AHMED Samar S.; AL HEIB Marwan; GUNZBURGER Yann; RENAUD, Vincent; PIGUET, Jack-Pierre.

Numerical modelling of the goaf: methodology and application.

MITRI, Hani; SHNORHOKIAN, Shahe; KUMRAL, Mustafa; SASMITO, Agus; SAINOKI, Atsushi. *Proceedings of the 3rd International Symposium on Mine Safety Science and Engineering (ISMS 2016)*. Montreal: McGill University, 2016, p. 640-646

SOULEY Mountaka; ARMAND Gilles; KAZMIERCZAK Jean-Bernard.

Hydro-elasto-viscoplastic modeling of a drift at the Meuse/Haute-Marne Underground Research Laboratory (URL). *Computers and Geotechnics*, 2016: p. Accepté

LAFRANCE Noémie.

Étude des effets de l'eau sur les phénomènes de rupture et de déformation affectant les carrières souterraines de craie. Thèse de doctorat. Université de Lorraine, 30/03/2016

ALBORESHA Rafid.

Evaluation of the impact of a cavity upon an earth dike (analytical and numerical approaches): Application to the Val d'Orléans area (France). Thèse de doctorat. Université de Lorraine, 26/04/2016

2017 /

BOURDEAU Céline; LENTI Luca; MARTINO Salvatore; OZEL Oguz; YALCINKAYA Esref; BIGARRE Pascal; COCCIA Stella.

Comprehensive analysis of the local seismic response in the complex Büyükçekmece landslide area (Turkey) by engineering-geological and numerical modelling. *Engineering Geology*, 2017, 218: p. 90-106

BASMAJI Bakri; DECK Olivier; AL HEIB, Marwan.

Analytical model to predict building deflections induced by ground movements. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 2017: p. Accepted

GAL Frédéric; PROUST Eric; BENTIVEGNA Gaëtan; LECONTE Steve; DE LARY DE LATOUR Louis; LOSCHETTER Annick; POKRYSZKA, Zbigniew; COLLIGNAN Bernard.

What may be the Consequences of a CO₂ Leakage? Insights from Soil Gas Measurements in an Urban Area - Clermont-Ferrand, French Massif Central. 13. International Conference on Greenhouse Gas Technologies (GHGT-13), 14/11/2016 - 18/11/2016, Lausanne, Suisse + Energy Procedia, 2017, 114: p. 3006-3019

AHMED Samar S.; AL HEIB Marwan; GUNZBURGER Yann; RENAUD Vincent.

3D numerical simulation of the goaf due to large-scale longwall mining.

SHEHATA, Hany; RASHED, Youssef. Numerical Analysis of Nonlinear Coupled Problems. *Proceedings of the 1st GeoMEast International Congress and Exhibition Egypt 2017 on Sustainable Civil Infrastructures*. NC: Springer, 2017, p. 121-131

Institut national de l'environnement industriel et des risques
Parc technologique Alata - BP2 - 60550 Verneuil-en-Halatte
Tél. : +33 (0)3 44 55 66 77
E-mail : ineris@ineris.fr - Internet : www.ineris.fr



*maîtriser le risque |
pour un développement durable*