



# RAPPORT SCIENTIFIQUE

2015-2016

**INERIS**

*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 l'Environnement de l'Énergie et de la Mer.

**RAPPORT  
SCIENTIFIQUE**  
2015-2016

# ACTUALITÉS SCIENTIFIQUES EN BREF...

## SÉGOLÈNE ROYAL INAUGURE la halle de caractérisation de la combustion à grande échelle



La ministre de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer, chargée des relations internationales sur le climat, s'est rendue à l'INERIS vendredi 19 février 2016 pour visiter les installations expérimentales de l'Institut et inaugurer la nouvelle plateforme dédiée à l'analyse du comportement au feu de produits présentant un fort potentiel thermique toxique.

## BINÔME : l'INERIS à nouveau sur les planches

Binôme, c'est la rencontre originale du théâtre contemporain et de la science.

Pour la 3<sup>e</sup> année consécutive, l'Institut a participé au projet orchestré par la compagnie Les Sens des mots, avec à l'honneur le risque sismique, en lien avec les exploitations souterraines de type mine ou carrière. La rencontre d'Isabelle CONTRUCCI, ingénieure de recherches en auscultation des sols, avec l'auteure de théâtre Lucie DEPAUW a donné naissance à la pièce *Effondrement(s)*. Elle a été présentée en juillet au Festival d'Avignon 2016.

[+ http://www.lessensdesmots.eu/](http://www.lessensdesmots.eu/)



## INERIS RÉFÉRENCES 2016 : tout savoir sur le stockage souterrain de l'énergie



Le quatrième numéro de la collection INERIS Références, *Le Stockage souterrain dans le contexte de la transition énergétique*, est paru. Réalisé en lien avec sa Commission

d'orientation de la recherche et de l'expertise, le dossier dresse un état des lieux des stockages souterrains en France et à l'étranger. Il présente les différents types de stockage d'énergie et un panorama des outils et méthodes disponibles pour évaluer les risques et surveiller les stockages. L'Institut livre également une analyse préliminaire des coûts des différentes filières de stockage et identifie les principales pistes de recherche et développement.

## CORABIO : 1<sup>er</sup> congrès international dédié aux problématiques de corrosion en bioraffinerie

Raréfaction des ressources fossiles, augmentation des besoins énergétiques, notre société tend au développement d'une économie bio-sourcée. C'est tout l'enjeu du projet de recherche ECORABIO, coordonné par l'INERIS, qui a rendu ses premiers résultats. Il visait à évaluer les problématiques de corrosion des éléments métalliques mis en œuvre dans les procédés de bioraffinerie et à identifier les besoins clés en recherche dans ce domaine.

L'Institut a contribué à la caractérisation des environnements corrosifs et à l'évaluation d'un essai réglementaire. Les résultats ont été valorisés au cours du congrès CORABIO les 10 et 11 mars 2016, premier congrès international dédié à l'examen des problématiques de corrosion en bioraffinerie à l'initiative de l'Institut.

## SEPT ÉTABLISSEMENTS PUBLICS S'ENGAGENT en faveur de l'ouverture de leurs travaux à la société

L'Anses, le BRGM, l'Ifsttar, l'INERIS, l'IRSN, l'rstea et Santé publique France ont signé le 9 décembre une charte de l'ouverture à la société. Ces sept établissements publics remplissent tous, au-delà de leur diversité, une mission d'intérêt général commune : évaluer les risques dans les domaines de la santé et de l'environnement et les moyens de les réduire, dans une perspective d'aide à la décision. Par la signature de cette charte, ils affirment ou réaffirment leur volonté commune de dialogue avec les acteurs de la société civile dans le cadre de leurs activités d'expertise et/ou de recherche. Ils s'engagent à poursuivre l'ouverture et la transparence de leurs processus de recherche, d'expertise et/ou d'évaluation des risques, améliorer le partage des connaissances scientifiques



disponibles et des incertitudes qui les entourent, mieux prendre en compte la contribution des acteurs de la société dans les processus de recherche et/ou d'évaluation des risques. La charte vise à construire, avec les acteurs de la société, une compréhension partagée des enjeux complexes des situations à risques et des alternatives permettant d'y faire face. Elle contribue à renforcer la qualité des travaux que ces établissements apportent aux décideurs publics, ainsi que la confiance de la société à l'égard des processus de décision.

<https://www.anses.fr/fr/system/files/ANSES-Ft-CharteOuverture.pdf>

## SÉCURITÉ DES SOLS : l'INERIS organise la 2<sup>e</sup> conférence internationale mondiale

À l'occasion de la Journée mondiale des sols, l'Ineris, l'Inra et l'Association Française pour l'Étude du Sol (AFES) ont organisé la 2<sup>nde</sup> Conférence internationale sur la sécurité mondiale des sols, les 5 et 6 décembre 2016 à Paris. La conférence visait à démontrer que le sol constitue un enjeu crucial pour répondre aux objectifs de développement durable. En particulier, le propos de cette deuxième édition était de montrer qu'au-delà du monde de la recherche, la sécurité des sols est l'affaire de tous. C'est ainsi que 150 acteurs d'horizons divers – citoyens, politiques, utilisateurs et gestionnaires des sols – sont venus échanger sur cette question et partager une vision commune.

## L'INSTITUT, MEMBRE FONDATEUR de la Fondation pour la Recherche sur la Biodiversité (FRB)

L'INERIS intègre, via son Contrat d'objectifs et de performance, les questions liées à la préservation de la biodiversité dans l'ensemble de ses travaux scientifiques. Il nourrit la synergie entre écotoxicologie et écologie, à la fois dans le but d'améliorer la prise en compte des impacts des pollutions et pour construire des approches de maîtrise des risques pour la biodiversité. L'engagement au sein de la FRB traduit la volonté de l'Institut de partager ses connaissances avec la communauté de recherche sur la biodiversité animée par la FRB. L'entrée comme membre fondateur a été approuvée à l'unanimité par le conseil d'administration.

## FÊTE DE LA SCIENCE 2016

Du 8 au 16 octobre 2016, l'INERIS a participé à la Fête de la Science. L'Institut s'est associé avec d'autres établissements de recherche et L'Esprit Sorcier pour créer Science en direct, avec le soutien du Ministère de l'Éducation nationale, de l'Enseignement supérieur et de la Recherche. Cet événement festif et pédagogique s'est déroulé les 8 et 9 octobre 2016 à la Cité des sciences et de l'industrie. Animées par Fred Courant, le présentateur du magazine « C'est pas sorcier », ces 2 journées d'animations ont rassemblé de nombreux chercheurs, des expériences en direct, des débats...

## 06

### ACCOMPAGNER LA TRANSITION ÉNERGÉTIQUE ANTICIPER LES RISQUES ÉMERGENTS

- Sécurité des batteries Accompagner le déploiement des batteries Li-ion stationnaires
- Fin de vie des nanomatériaux par incinération : cas des nanocomposites
- **FOCUS** Compréhension et modélisation de l'emballage thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles
- Les tests in vitro à l'interface air-liquide permettent-ils de mieux prédire la toxicité pulmonaire des nanoparticules ?
- **FOCUS** Le projet européen EDA-EMERGE
- Analyse des coûts et des bénéfices sociaux pour la mobilité hydrogène en Europe
- Évaluer l'explosivité des nanomatériaux : une démarche essentielle pour la maîtrise des risques
- Champs électromagnétiques et hypersensibilité : à la recherche de marqueurs biologiques
- Une nouvelle approche de détermination de la composition stœchiométrique de nanopoudres

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

- L'ingénierie FOH : un cadre de référence pour les acteurs de la sécurité
- Guide BATIRSÛR : accompagner les entreprises dans la prévention des risques technologiques en zone PPRT
- **FOCUS** Fold : localiser les fuites de gaz sur les canalisations enterrées grâce à la fibre optique
- Insertion de l'incertitude pour l'analyse des risques du stockage de CO<sub>2</sub>
- **FOCUS** Un nouveau laboratoire « gaz-eau-roche »
- Évaluation des dommages liés aux mouvements de terrain sur les structures en maçonnerie
  - Surveillance globale et fusion de données
- industrielles et environnementales pour la sécurité et la transparence des mines du futur
- **FOCUS** Sismicité post-minière dans l'ancien bassin houiller de Gardanne (Provence)
- Impact de l'agriculture sur la qualité de l'air
- **FOCUS** Identification des sources des particules dans l'environnement : réactivité et traceurs
- Spatialisation des inégalités environnementales dans une démarche de caractérisation de l'exposome
- Étude de l'efficacité et de la pérennité de la phytostabilisation aidée couplée à une valorisation biomasse en bois-énergie

## 46

### 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 du point d'éclair de mélanges binaires organiques
- Profilage de la toxicité de nouvelles substances par méthodes alternatives
- Modélisation intégrée de la perturbation endocrinienne à différents niveaux d'organisation biologique chez le poisson zèbre
- Modélisation toxicocinétique de la perméthrine pour lier l'exposition aux biomarqueurs mesurés lors des campagnes de biosurveillance humaine

## 56

**« J'ATTENDS DE L'INERIS QU'IL PERMETTE D'ACCÉLÉRER L'ACTION MINISTÉRIELLE GRÂCE À UNE EXPERTISE ACTUALISÉE, PRÉCISE ET TRANSPARENTE FONDÉE SUR UNE RECHERCHE DU MEILLEUR NIVEAU. »**

Extrait des propos introductifs de Ségolène Royal,  
ministre de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer,  
lors de la signature du Contrat d'objectifs et de performance 2016-2020.

Expert public national de référence pour évaluer, prévenir et maîtriser les risques industriels et environnementaux, l'INERIS développe chaque jour ses connaissances pour nourrir la qualité de son expertise. La recherche constitue depuis sa création un pilier de son activité pour accompagner la société dans ses mutations et ses innovations. Cette recherche, principalement appliquée, permet d'identifier les sujets émergents qui constituent ou constitueront les priorités actuelles ou à venir de la prévention des risques.

L'INERIS a signé son Contrat d'objectifs et de performance 2016-2020 avec le ministère de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer. Ce document, stratégique pour l'Institut, est construit sur la base de thèmes structurants. Ils articulent de manière complémentaire des objectifs de recherche et d'appui aux politiques publiques : accompagner la transition énergétique et l'économie circulaire, anticiper les risques émergents et intégrer les risques liés au changement climatique, comprendre et maîtriser les risques à l'échelle d'un site industriel et d'un territoire, caractériser les dangers des substances et produits et leurs impacts sur l'air, l'eau, les sols et les organismes vivants.

C'est aussi autour de ces thèmes que le présent rapport scientifique a été élaboré. La première partie du document rassemble les thèmes des deux premiers blocs du COP : transition énergétique et risques émergents. Un large éventail de sujets, la diversité des compétences et des démarches mises en œuvre par l'Institut sont ici présentés : sécurité des batteries, qualité de l'air, nanotechnologies et nanomatériaux, toxicité des substances... Avec les femmes et les hommes qui le composent, l'Institut poursuit sa mission pour accompagner les innovations technologiques en s'assurant de leur caractère propre et sûr. Il conforte ainsi son rôle d'expert au service des pouvoirs publics et des entreprises.

Raymond Cointe, *directeur général*,  
Mehdi Ghoreychi, *directeur scientifique*.



**ACCOMPAGNER**  
**LA TRANSITION ÉNERGÉTIQUE,**  
ANTICIPER LES RISQUES ÉMERGENTS



*Sécurité des batteries. Accompagner le déploiement des batteries Li-ion stationnaires*

*Fin de vie des nanomatériaux par incinération : cas des nanocomposites*

**FOCUS** *Compréhension et modélisation de l'emballage thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles*

*Les tests in vitro à l'interface air-liquide permettent-ils de mieux prédire la toxicité pulmonaire des nanoparticules ?*

**FOCUS** *Le projet européen EDA-EMERGE*

*Analyse des coûts et des bénéfices sociaux pour la mobilité hydrogène en Europe*

*Évaluer l'explosivité des nanomatériaux : une démarche essentielle pour la maîtrise des risques*

*Champs électromagnétiques et hypersensibilité : à la recherche de marqueurs biologiques*

*Une nouvelle approche de détermination de la composition stœchiométrique de nanopoudres*

# SÉCURITÉ DES BATTERIES

## Accompagner le déploiement des batteries Li-ion stationnaires

Dans un contexte de développement des sources d'énergies renouvelables, des solutions techniques doivent être mises en place pour faire face à leur production irrégulière et intermittente. Parmi les systèmes de stockage d'énergie électrique, le stockage électrochimique par l'utilisation de batteries rechargeables de technologie lithium-ion (Li-ion) est l'une des solutions envisagées par les professionnels de la filière en raison de sa densité d'énergie élevée. Le projet européen STABALID (Stationary Battery Li-ion Safe Deployment), qui s'est déroulé du

1<sup>er</sup> octobre 2012 au 31 mars 2015, avait pour objectif de proposer, à travers une évaluation des risques reconnue et une validation robuste, des méthodologies et procédures d'essais de sécurité sur des batteries Li-ion stationnaires.

### Description, objectifs et approche du projet

Le projet STABALID, regroupant 6 partenaires, visait à soutenir le déploiement des batteries Li-ion stationnaires de plus de 1 MWh par le développement, la validation expérimentale et

la diffusion d'un standard international d'essais de sécurité pour ces batteries.

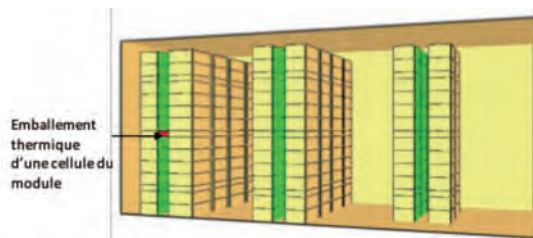
L'approche retenue a été de définir des procédures d'essais de sécurité sur la base de scénarios accidentels identifiés lors d'une analyse préliminaire des risques (Work Package WP1). Les procédures d'essais ont été validées expérimentalement (WP2) et proposées au sein de comités de normalisation (IEC 62619 notamment) dans le cadre du WP3. L'évaluation du contexte réglementaire et normatif des batteries stationnaires en Europe a été réalisée dans le cadre du WP4.

### FIGURES

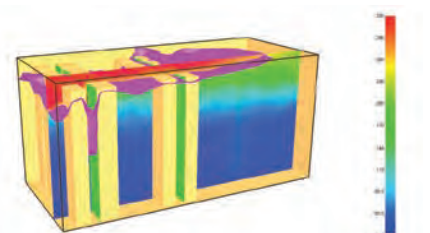
**Tab1** : Types d'essais retenus dans le cadre du projet STABALID, scénarios associés et phases de cycle de vie concernées

Type d'essai	Exemple de scénario simulé	Principales phases du cycle de vie concernées
Propagation d'un emballement thermique	Défaillance d'une cellule	Utilisation
Surcharge	Défaillance du BMS ou du circuit de charge	Utilisation
Décharge profonde	Recharge/cyclage électrique après un stockage prolongé sans utilisation, Erreur de manipulation, Défaillance du BMS	Stockage, maintenance, Installation, utilisation
Cyclage sans refroidissement à haute température	Défaillance du système de régulation en température	Utilisation
Court-circuit externe	Défaut d'assemblage, Erreur de manipulation	Maintenance, installation, désinstallation
Déformation	Déformation suite à un choc, Chute au cours de la maintenance	Transport (accident), maintenance, Installation, désinstallation
Immersion	Inondation	Utilisation, stockage
Protection en T° du BMS	Exposition du module à une basse T° ou une haute T° en cas de défaillance du système de régulation en T°	Utilisation, stockage, transport
Protection en courant du BMS	Pic de courant élevé provenant de l'application	Utilisation
Protection en tension du BMS	Dépassement de la tension maximale (surcharge) ou minimale (sur-décharge) admissible	Utilisation

**Fig1a**  
Géométrie numérique utilisée dans le code FDS



**Fig1b**  
Modélisation de la température (en °C) au sein du container batterie 90 s après le départ de feu de la première cellule



## Principaux résultats

### Analyse préliminaire des risques et identification des essais associés

La démarche adoptée pour l'analyse préliminaire des risques a reposé sur : 1/l'identification des risques internes (liés au système batterie) et des risques externes (provenant de l'environnement) à toutes les étapes du cycle de vie de la batterie ; 2/l'évaluation qualitative des risques identifiés (probabilité, gravité de l'évènement) ; 3/l'identification des mesures de maîtrise des risques existantes ; 4/la réévaluation des risques en considérant la mise en application des mesures de maîtrise des risques. À partir de cette analyse, les scénarios accidentels les plus redoutés ont été définis ainsi que les essais associés (Tab1). Les procédures d'essais finalisées et validées expérimentalement par l'INERIS (plateforme d'essai Steeve Sécurité) et le Technischer Überwachungsverein Köln (TÜV) ont ensuite été proposées au sein du comité IEC pour le standard IEC 62619.

### Modélisation numérique

Dans les standards de tests de sécurité, les essais doivent être réalisés sur une unité représentative du système complet (un module par exemple). L'extrapolation des effets à plus grande échelle n'est pas abordée. Les travaux du projet STABALID ont montré qu'il était possible de réaliser des modélisations numériques pour évaluer les conséquences accidentelles (effets thermiques et toxiques) à grande échelle, en s'appuyant sur des données expérimentales obtenues à plus petite échelle. Une modélisation numérique d'un container de batteries a été réalisée avec le logiciel FDS (Fire Dynamic Simulator). Un départ de feu d'une cellule sur un module (en rouge sur la Fig1) a été modélisé. À partir des données expérimentales (puissance dégagée par le feu d'une cellule, température d'emballage thermique...) et avec les paramètres d'entrée considérés, il a été montré que le feu pouvait se propager à quelques cellules de modules voisins, mais que dans le scénario considéré et les hypothèses retenues, les effets restaient confinés dans le container.

### Contexte normatif et réglementaire

Les normes pour l'évaluation de la sécurité des systèmes de stockage stationnaire peuvent être classées selon leur approche. Les standards de tests de sécurité/abusifs et/ou tests de performance consistent à décrire des procédures d'essais que doivent subir les systèmes électrochimiques ; ils sont généralement spécifiques à



## TRANSLATION

The development of the Smart Energy Networks is a key priority to facilitate the transition to a more sustainable energy supply in Europe. Li-ion battery is a very promising technology for improving the penetration of renewable energy sources in the energy mix and enabling a better management of energy in the European grid. The overall objective of the STABALID project was to facilitate the deployment of safe stationary batteries with energy content over 1 MWh. To this end, the consortium developed relevant, robust and reproducible safety testing procedures for stationary batteries that were experimentally validated and proposed to IEC committee. Numerical modelling aiming to assess the accidental consequences (fire, thermal effects and toxic threats) at large scale was also performed for a defined scenario. Regulatory and normative frameworks regarding stationary batteries were assessed and some recommendations were addressed.

**Acknowledgment:** This project has received funding from the European Union's Seventh Framework Program for research, technological development and demonstration under grant agreement no 308896.

une technologie de batterie et/ou à une application donnée. D'autres standards ont une portée plus générale : ils visent à évaluer la sécurité de l'ensemble du système et non pas uniquement le système de stockage tel que la batterie. Ces standards en cours de développement (UL 9540, IEC TS 62937) ne sont pas exclusivement basés sur une approche de tests de sécurité ; ils incluent également des recommandations en termes de construction, d'instructions et de marquage. D'un point de vue réglementaire, les batteries stationnaires sont notamment concernées par la Directive Batterie 2006/66/EC dont les exigences reposent essentiellement sur les procédures de collecte et le retraitement des déchets, la Directive Seveso 2012/18/EU même si la spécificité des systèmes de stockage stationnaire n'est pas prise en compte, et la Directive "Occupation health and safety" 89/391/EEC concernant la sécurité et la santé des travailleurs.

## Conclusion

L'approche retenue a permis de définir des procédures d'essais robustes, reproductibles et représentatives de scénarios accidentels que peuvent rencontrer des batteries Li-ion utilisées pour des applications stationnaires. Pour évaluer les conséquences accidentelles à grande échelle, des modélisations numériques ont été réalisées pour un scénario donné en s'appuyant sur des données expérimentales obtenues à plus petite échelle. Ces travaux montrent la possibilité d'étendre ce type d'étude en considérant d'autres scénarios accidentels potentiels. D'un

point de vue réglementaire, la spécificité des systèmes de stockage stationnaires (substances dangereuses fractionnées) n'est pas prise en compte dans la Directive Seveso 2012/18/EU. Il n'a pas été recommandé de modifier la Directive mais de proposer la rédaction d'un guide technique décrivant la méthodologie d'évaluation de la sécurité des batteries utilisées pour les applications stationnaires. D'un point de vue normatif, les travaux engagés dans le cadre du TC 120 (IEC TS 62937, Guide 104) et au sein d'UL (UL9540) donnent des principes sur lesquels les réglementations peuvent s'appuyer. L'INERIS continue d'accompagner le déploiement des batteries stationnaires, en participant notamment activement aux travaux du TC120 sur les aspects sécurité.



## RÉFÉRENCES

- [1] <http://stabalid.eu-vri.eu/>
- [2] F.J.Soaes, L.Carvalho, I.C.Costa, J.P.Iria, J.-M.Bodet, G.Jacinto, A.Lecocq, J. Roessner, B.Caillard, O.Salvi, "The STABALID project: Risk analysis of stationary Li-ion batteries for power system applications". Reliability Engineering and System Safety 140 (2015) 142-175.
- [3] IEC 62619: Secondary cells and batteries containing alkaline or other non-acid electrolytes - Safety requirements for large format secondary lithium cells and batteries for use in industrial applications.

# FIN DE VIE DES NANOMATÉRIAUX PAR INCINÉRATION: cas des nanocomposites

## RÉFÉRENCES

Ounoughene G., Le Bihan O., Chivas-Joly C., Motzkus C., Longuet C., Debray B., Joubert A., Le Coq L., Lopez-Cuesta J., "Behavior and fate of Halloysite nanotubes (HNTs) when incinerating PA6/HNTs nanocomposite", *Environmental Science and Technology* 03/2015; 49(9):5450-5457.

Ounoughene G., Longuet C., Chivas-Joly C., Le Bihan O., Motzkus C., Debray B., Joubert A., Lopez-Cuesta J-M., Le Coq L., "Study of the incineration of a nanosilica filled polydimethylsiloxane using two experimental setups", *Journal: European Polymer Journal*, submitted August 2016.

Le développement des applications industrielles relatives aux nanotechnologies entraîne un accroissement du nombre et de la variété de déchets contenant des nanomatériaux, déchets qui sont générés par l'industrie, les consommateurs et les laboratoires de R&D. Des familles de matériaux incorporant des nano-objets se développent alors que les travaux sur l'évaluation de l'adéquation des filières de fin de vie (recyclage et élimination) vis-à-vis du risque potentiel lié aux nanomatériaux n'ont été entrepris que récemment.

## Objectifs et méthode

Les nanocomposites, dont la fin de vie est susceptible d'être prise en charge par l'incinération, font l'objet de travaux menés à l'Institut. L'objectif est de connaître le devenir des nano-objets lors de l'incinération des nanocomposites, en étudiant tout particulièrement leur comportement dans la chambre de combustion. À terme, il s'agit d'exploiter les résultats de recherche, pour en retirer des recommandations opérationnelles. Ces travaux s'inscrivent dans la continuité du programme de recherche NanoFlueGas (2011-2014), qui a notamment permis de développer un pilote d'incinération désormais opérationnel dans la plateforme S-nano de l'INERIS. Les essais d'incinération ont été réalisés à l'échelle laboratoire dans un four tubulaire et un cône calorimètre

spécialement modifiés dans le but de contrôler les paramètres clés de l'incinération.

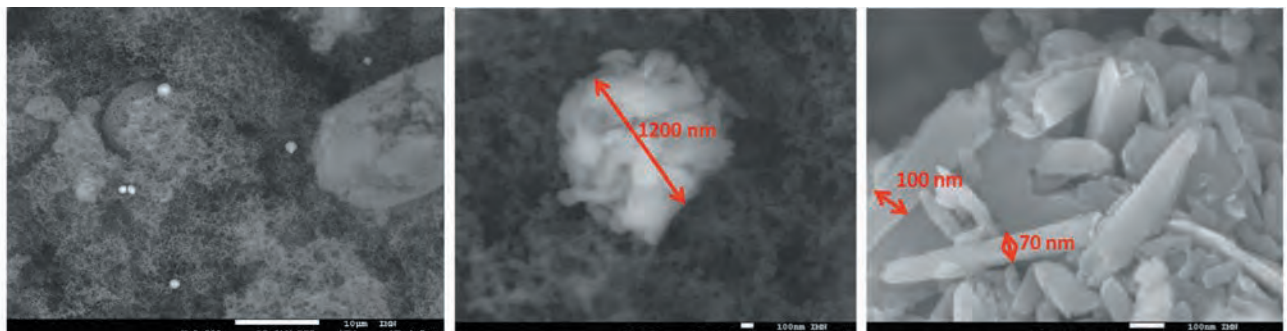
## Résultats

Les résultats obtenus sur différents nanocomposites montrent que la nanostructure d'un nano-objet incorporé dans une matrice polymère peut, lors de l'incinération, soit être détruite, soit évoluer, soit rester inchangée. Le nano-objet se répartit entre le résidu et l'aérosol de combustion.

À titre d'exemple, la combustion d'un thermoplastique PA6 contenant des nanotubes d'halloysite (HNTs - nano-argiles), à hauteur de 5% de sa masse, mène à la production d'un aérosol et d'un résidu contenant tous deux de l'halloysite, nanostructurée sous une forme individuelle ou agrégée (**Fig1**), avec une structure minérale modifiée. Il s'agit à ce stade d'une analyse qualitative.

L'influence du nano-objet et de son taux d'incorporation sur la nature des émissions et sur les mécanismes de décomposition et d'émission ainsi que l'influence du taux d'oxygénation et de la température ont été mises en évidence. Les suivis temporels des concentrations en gaz de combustion ( $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$  et  $\text{NO}_x$ ), des concentrations en nombre des particules ainsi que l'analyse des résidus de combustion ont permis de comprendre les mécanismes mis

## FIGURES



**Fig1** Images par MEB (microscopie électronique à balayage) de l'aérosol de combustion : suies et nano-argiles agrégés émis lors de l'incinération de PA6 contenant 5% de nanotubes d'halloysite

en jeu durant la décomposition thermique des nanocomposites (Fig2). L'étude de la dégradation thermique et de la réaction au feu a aidé à conforter les interprétations.

Tous ces résultats constituent des données d'entrée préliminaires à destination des toxicologues et des chercheurs étudiant l'efficacité des systèmes de filtration vis-à-vis des fumées générées par certains nanocomposites. La liste n'étant pas exhaustive, il serait pertinent de tester d'autres nanocomposites. Cependant, d'ores et déjà, des caractéristiques communes de comportements des nano-objets incorporés dans des matrices polymères lors de l'incinération de nanocomposites ont été identifiées.

La présentation d'un outil d'aide à la décision prenant la forme d'un arbre décisionnel conclut cette étude (Fig3). Ce schéma décisionnel permet de faciliter l'utilisation des résultats de l'étude à un niveau opérationnel. Il est destiné aux exploitants d'unité d'élimination de déchets contenant des nanomatériaux et aux décideurs publics pour les aider à mener au mieux l'élimination de nanomatériaux par incinération (ou par d'autres procédés thermiques d'élimination), dans le respect de l'environnement et en veillant à la sécurité des opérateurs.

## TRANSLATION

Nanocomposites have been widely studied and produced since the end of the nineties. These trendy materials containing nanomaterials are expected to end up in incineration waste plants due to the lack of specific recovery procedures. The aim of this work is to investigate the behavior and the fate of the nano-objects from nanocomposites during their incineration and to give insights on potential environmental risk related to the incineration of waste containing nanomaterials. Incineration tests have been performed at lab-scale using specific pilots respecting regulatory incineration requirements. The influence of the nano-objects presence on the combustion mechanisms (aerosol release and decomposition) is investigated. The combustion residues and the combustion aerosol (collected downstream the incinerator) have been characterized using various techniques devoted to the analysis of aerosols. Furthermore, it has been studied the influence of different parameters (temperature of combustion, oxygen concentration, loading of nano-objects, type of nano-objects) on the nature of emissions. Finally, a decision tree has been proposed to decision-makers and incineration plant managers.

## Partenaires

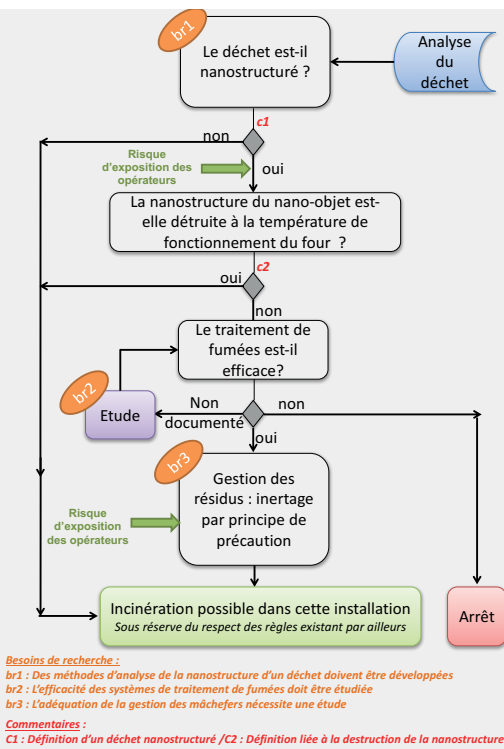
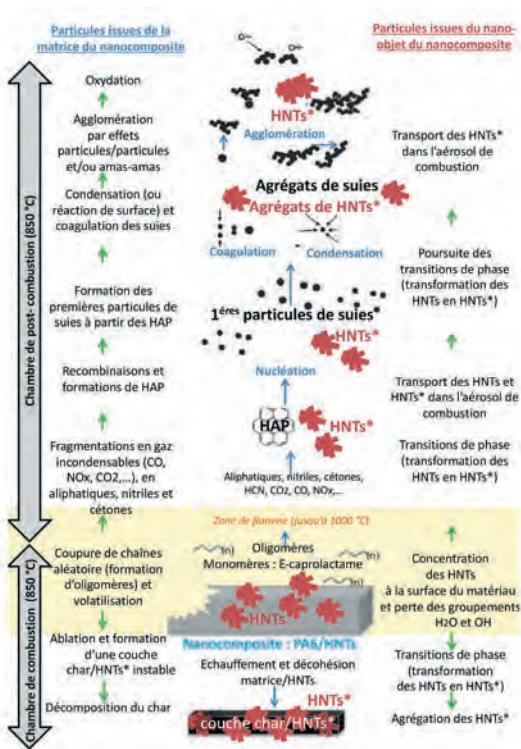
Cette étude correspond au travail de thèse de doctorat de Ghania Ounoughene, cofinancée par l'ADEME, le LNE et l'INERIS. Cette recherche a été soutenue par un consortium constitué des financeurs et des laboratoires C2MA et GEPEA des Écoles des mines d'Alès et de Nantes. Le projet a également bénéficié des compétences industrielles de Trédi-Gruppe SéchÉ Environnement.

## Remerciements

L'INERIS remercie les partenaires (LNE, des École des mines de Nantes, École des mines d'Alès, SéchÉ Environnement), en particulier les représentants des organismes dans l'encadrement du doctorat de Ghania Ounoughene (L. Le Coq, J. M. Lopez, C. Chivas, C. Longuet).

## FIGURES

**Fig2**  
Formation de l'aérosol de combustion en conditions « incinération » - cas du nanocomposite PA6/HNTs



# COMPRÉHENSION ET MODÉLISATION de l'emballlement thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles

Si les batteries de technologie Li-ion s'affichent aujourd'hui comme la meilleure solution pour répondre aux exigences des applications stationnaires et mobiles, les enjeux de sécurité restent significatifs. Ils sont conditionnés par de nombreux paramètres allant du choix des matériaux d'électrodes et d'électrolytes jusqu'à la configuration du pack batterie. Dans ce contexte, le développement de modèles prédictifs du comportement électrothermique des systèmes de stockage électrochimiques de l'énergie, de l'échelle de la cellule jusqu'au pack, constitue une préoccupation majeure au regard du risque d'emballlement thermique propre à ces technologies.

La thèse de doctorat menée par Sara Abada, coencadrée par IFPEN et l'INERIS sous la direction du laboratoire LISE (UMPC) vise à mieux comprendre et à modéliser l'emballlement thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles

par le développement de modèles prédictifs multi-échelles en trois dimensions couplant différents sous-modèles. L'état de l'art des modèles existants [1] montre que de tels travaux de modélisation d'emballlement thermique prenant en compte l'influence du vieillissement n'avaient pas été réalisés jusqu'à présent.

Deux chimies Li-ion ont été étudiées : celle du LiFePO<sub>4</sub> (LFP)/C (graphite) réputée la moins réactive et LiNi<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>Co<sub>1/3</sub>O<sub>2</sub>(NMC)/C (graphite), ainsi que deux géométries de cellules (cylindrique et pouch - Fig1). Un vieillissement calendaire (à 60 °C) visant à atteindre deux niveaux de vieillissement (10 % et 30 % de perte de capacité par rapport à la capacité initiale) a été réalisé sur les différents types de technologies. La campagne expérimentale menée conjointement par IFPEN (vieillessement des cellules) et l'INERIS (essais abusifs d'emballlement thermique

réalisés dans le BTC- Fig1) a permis l'étude de l'impact du vieillissement sur les risques liés à l'emballlement et de calibrer et valider le modèle à l'échelle de la cellule (Fig2). Les essais de stabilité thermique ont notamment montré que la première réaction exothermique se produisait à une température plus élevée (T1 sur Fig3) pour les cellules vieilles (chimie LFP), mais que l'emballlement thermique en tant que tel se produisait à une température plus faible (T3) sur ce type de cellules.

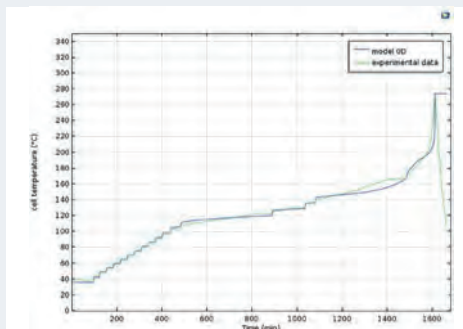
## RÉFÉRENCE

[1] S. Abada, G. Marlair, A. Lecocq, M. Petit, V. Sauvart-Moynot, F. Huet. « Safety focused modeling of lithium-ion batteries: A review ». Journal of Power Sources 306 (2016) 178-192

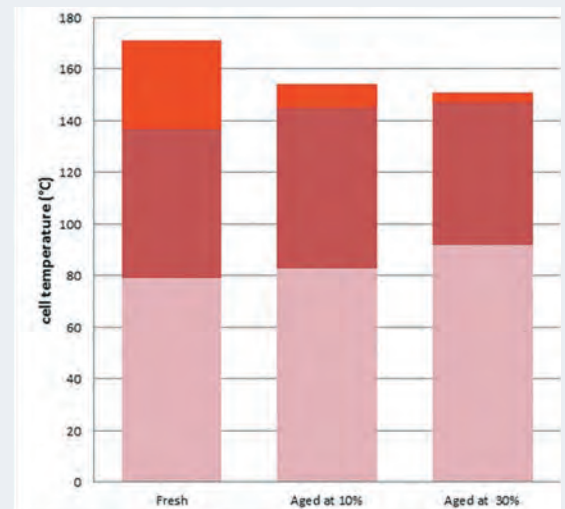
## FIGURES



**Fig1**  
Battery testing calorimeter (BTC) et exemple de deux types de cellules testées dans le BTC



**Fig2** Exemple de courbes expérimentale et modélisée de l'emballlement thermique d'une cellule LFP/C



**Fig3** : Influence du vieillissement sur l'emballlement thermique des cellules LFP/C

Stade3 "Accelerating TR"  
Stade2 "Self heating"  
Stade1 "Safe"

# LES TESTS IN VITRO À L'INTERFACE AIR-LIQUIDE permettent-ils de mieux prédire la toxicité pulmonaire des nanoparticules ?



## TRANSLATION

L'utilisation croissante de nanoparticules (NPs) dans les produits manufacturés entraîne une augmentation potentielle de l'exposition. L'homme peut être exposé par voie respiratoire, d'autant plus que les NPs se remettent facilement en suspension dans l'air du fait de leur petite taille. Cela suscite des interrogations quant à un potentiel impact sanitaire, pour les travailleurs comme pour le grand public. Les potentiels dangers des NPs pour l'homme après inhalation peuvent être évalués par des études de toxicologie chez l'animal. C'est le modèle actuellement le plus fiable pour prédire de potentiels effets indésirables chez l'homme, du fait d'un niveau de complexité similaire par rapport à l'humain. Néanmoins, considérant le nombre important de NPs existantes et du fait d'une grande diversité physico-chimique entre celles-ci, il paraît nécessaire de trouver des modèles fiables qui pourraient être utilisés comme alternative au modèle animal.

### Développer des modèles alternatifs

Les études *in vitro* sur cellules pulmonaires représentent une alternative pertinente pour

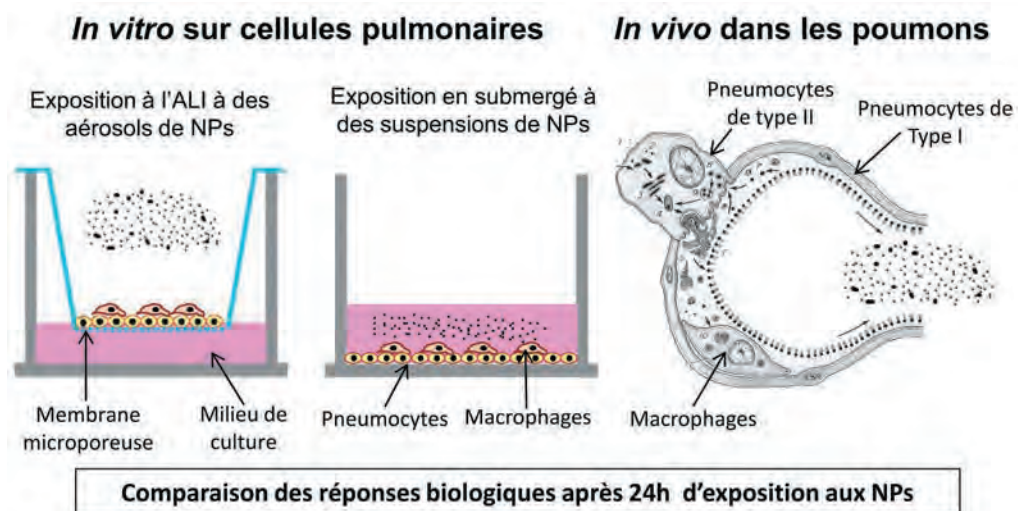
Nanoparticles (NPs) are potentially toxic for humans, especially after inhalation. The animal model is a relevant tool to predict potential adverse effects in human, because of a similar level of complexity existing between the two models. Nevertheless, considering the high number of NPs used and their physicochemical diversity, it seems difficult to rely only on animal experimentation. In this context, it is necessary to find reliable models which can be used as alternative to the *in vivo*. The aim of this study was to assess the ability of several *in vitro* methods, including more realistic methods allowing exposure of lung cells at the air-liquid interface to aerosols of NPs, to predict the pulmonary adverse effects observed *in vivo*. For this purpose, *in vitro* and *in vivo* experiments were performed. It was observed that using more realistic *in vitro* methods can predict more closely the biological responses observed *in vivo* after acute exposure to NPs. This shows the relevance of developing and using more realistic *in vitro* methods and suggests perspectives regarding the implementation of standardized methodologies which could be used for *in vitro* based regulation.

évaluer la toxicité pulmonaire des NPs après exposition aiguë. En revanche, la capacité de ces modèles à prédire les effets biologiques observés *in vivo* chez l'animal a été très peu étudiée. Cela représente un frein dans la mise en place de réglementations basées sur l'utilisation de modèles alternatifs ; c'est l'un des objectifs du projet européen NANoREG dont l'INERIS est partenaire.

Par ailleurs, *in vitro*, les effets toxiques sont le plus souvent évalués en utilisant des modèles constitués d'un seul type cellulaire, qui sont exposés quelques heures à des NPs mises en suspension dans le milieu de culture. Ces conditions d'exposition ne sont pas représentatives des interactions qui ont lieu dans les poumons entre les NPs et les cellules et peuvent ainsi donner des réponses biologiques différentes



## FIGURES



**Fig1** Conditions expérimentales utilisées pour effectuer les comparaisons vivo-vitro



RÉFÉRENCES

[1] Dekali, S. (2013). *Développement de modèles in vitro de la barrière alvéolo-capillaire pour l'étude de la toxicité et du passage des nanoparticules* (Thèse de doctorat, Paris 5).

[2] Loret, T et al. (2016). *Air-liquid interface exposure to aerosols of poorly soluble nanomaterials induces different biological activation levels compared to exposure to suspensions*. Particle and Fibre Toxicology, in press.

de celles observées *in vivo*. En revanche, d'important progrès ont été faits récemment pour simuler à l'échelle *in vitro* les interactions qui ont lieu *in vivo* dans les poumons. Des modèles cellulaires plus complexes [1] et des méthodes d'exposition plus physiologiques ont été développés. Notamment, les systèmes d'exposition à l'interface-air liquide (ALI) permettent de déposer sur des cellules pulmonaires des NPs présentes dans un aérosol, similairement à ce qui se passe *in vivo* au niveau des alvéoles. Ces nouvelles méthodologies pourraient permettre de prédire de manière plus fiable les réponses biologiques observées *in vivo*.

Pour évaluer cela, des expérimentations *in vitro* et *in vivo* (Fig1) ont été menées. *In vitro*, plusieurs modèles cellulaires, plus ou moins complexes, ont été exposés à l'ALI à des aérosols et en submergé à des suspensions de NPs peu solubles (TiO<sub>2</sub> et CeO<sub>2</sub>) [2]. Des expérimentations *in vivo* sur rongeurs ont été réalisées en parallèle, en utilisant des NPs identiques et des conditions d'exposition et des marqueurs d'effets biologiques similaires. Après 24 h d'exposition, la toxicité a été évaluée à l'aide de plusieurs tests et les résultats de toxicité obtenus *in vitro* ont été comparés à ceux obtenus *in vivo*. Pour cela, les doses de NPs entrant en contact avec les matrices biologiques ont été évaluées et des référentiels

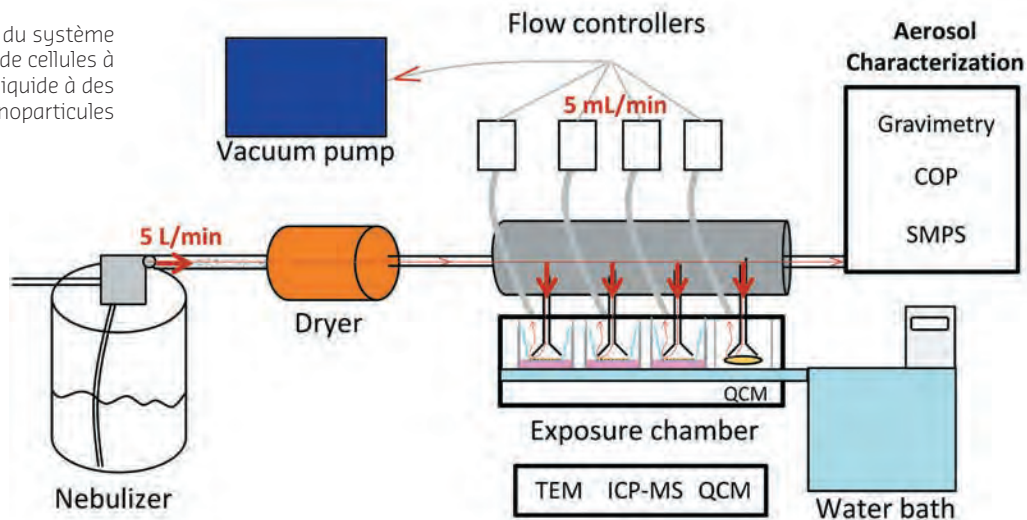
de doses similaires *in vivo* et *in vitro* ont été sélectionnés.

## Résultats

Il a été observé que l'utilisation de modèles cellulaires *in vitro* plus représentatifs de l'organisation cellulaire au niveau des poumons et des méthodes d'exposition *in vitro* plus réalistes permet de générer des réponses biologiques à 24 h à des doses plus réalistes et plus proches de celles induisant des effets *in vivo* au niveau pulmonaire. La méthodologie d'exposition à l'ALI s'est donc révélée plus pertinente pour approcher la toxicité absolue des NPs testées dans l'étude. Néanmoins, il a été constaté que la méthode *in vitro* en submergé, qui est la plus simple à mettre en œuvre, pouvait être utilisée pour établir un classement relatif des NPs en fonction de leur toxicité. En effet, les NPs utilisées dans l'étude ont pu être classées de manière similaire *in vivo* et *in vitro*, quelle que soit la méthode d'exposition utilisée. En conclusion, les résultats montrent la pertinence de développer et d'utiliser des méthodes *in vitro* permettant de mimer au mieux ce qui se passe *in vivo*. Cela suggère des perspectives quant à la mise en place de réglementations basées sur l'utilisation de modèles *in vitro*, et plus particulièrement dans le but d'évaluer la potentielle toxicité des NPs.

FIGURES

**Fig2** Schéma du système d'exposition de cellules à l'interface air-liquide à des aérosols de nanoparticules





# LE PROJET EUROPÉEN EDA-EMERGE

Réseau de formation initiale (Initial training Network) financé par l'action Marie Curie du 7<sup>e</sup> programme cadre de l'union européenne, le projet EDA-EMERGE<sup>1</sup> a pris fin en 2015.

L'objectif était de former une génération de jeunes scientifiques (13 doctorants et 1 post-doctorant) aux nouvelles approches multidisciplinaires combinant des analyses physico-chimiques et des mesures bioanalytiques basées sur les effets biologiques [1]. L'EDA (Effect-Directed Analysis) est une stratégie qui combine ces outils pour identifier les substances responsables des effets biologiques au sein de matrices environnementales complexes [2]. EDA-EMERGE a contribué au développement de méthodes innovantes de

bioanalyse, de fractionnement d'échantillon et d'identification structurale des substances chimiques. Leur application à différentes études de cas menées à l'échelle européenne a permis d'éprouver les méthodologies développées.

## Bioessais *in vivo* et *in vitro*

Dans ce projet, l'INERIS a contribué en particulier au volet bioessais, au travers des études de terrain, mais aussi via l'organisation de cours spécialisés sur les bioessais et la bioanalyse des perturbateurs endocriniens et la formation d'un doctorant. Cette thèse visait à combiner des bioessais *in vitro* et *in vivo* chez le poisson zèbre et à les utiliser au sein de la démarche EDA pour

la détection et l'identification de perturbateurs endocriniens [3]. Ce travail a notamment permis de démontrer la pertinence écotoxicologique des bioessais développés au regard de bioessais plus conventionnels [4].

Le consortium EDA-EMERGE constitue aujourd'hui un réseau de partenaires européens autour de l'EDA. En lien avec le réseau NORMAN, il a été un des éléments fondateurs du projet européen FP7-SOLUTIONS (2013-2018) dont l'objectif est d'apporter des solutions adaptées et opérationnelles pour répondre aux enjeux actuels de surveillance de la qualité chimique des milieux aquatiques en Europe.

1. EDA-EMERGE: « Novel tools in Effect-Directed Analysis for identifying & monitoring EMERGING toxicants on a European scale », <http://www.eda-emerge.eu/>



## RÉFÉRENCES

- [1] Brack W., Govender S., Schulze T., Krauss M., Hu M., Muz M., Hollender J., Schirmer K., Schollee J., Hidasi A., Slobodnik J., Rabova Z., Aït-Aïssa S., Sonavane M., Carere M., Lamoree M., Leonards P., Tufi S., Ouyang X., Schriks M., Thomas K., de Almeida A., Froment J., Hammers-Wirtz M., Ahel M., Koprivica S., Höllert H., Seiler T.-B., Di Paolo C., Tindall A., Spirhanzlova P. (2013) *EDA-EMERGE: an FP7 initial training network to equip the next generation of young scientists with the skills to address the complexity of environmental contamination with emerging pollutants*. Discussion paper. Environmental Sciences Europe, 25: 18.
- [2] Brack W., Aït-Aïssa S., Burgess R., Creusot N., Di Paolo C., Escher B.I., Hewitt M., Hilscherova K., Hollender J., Höllert H., Jonker W., Kool J., Lamoree M., Muschket M., Neumann S., Rostkowskik P., Ruttkies C., Schollee J., Schymanski E.L., Schulze T., Seiler T.B., Tindall A.J., De Aragão Umbuzeiro G., Vrana B., Krauss M. (2016) *Effect-directed analysis supporting monitoring of aquatic environments - An in-depth overview*. Science of the Total Environment, 544: 1073-1118.
- [3] Sonavane M. (2015) *Intérêt d'une approche combinant bioessais in vitro et in vivo chez le poisson zèbre pour l'identification de perturbateurs endocriniens dans l'environnement aquatique*. Thèse de doctorat, INERIS/AgroParisTech, soutenue le 15 décembre 2015.
- [4] Sonavane M., Creusot N., Maillot-Marechal E., Péry A., Brion F., Aït-Aïssa S. (2016) *Zebrafish-based reporter gene assays reveal different estrogenic activities in river waters compared to a conventional human-derived assay*. Science of the Total Environment, 550:934-939.

# ANALYSE DES COÛTS ET DES BÉNÉFICES SOCIAUX

## pour la mobilité hydrogène en Europe

### RÉFÉRENCES

Cantuarias-Villessuzanne, C.; Weinberger, B.; Roses, L.; Vignes, A.; Brignon, J-M., 2016. *Social cost-benefit analysis of hydrogen mobility in Europe. International Journal of Hydrogen Energy*. 1-8. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.213>

Pasaoglu G, Fiorello D, Martino A, Scarcella G, Alemanno A, Zubaryeva A, et al. *Driving and parking patterns of European car drivers: a mobility survey*. Technical report, Luwembourg, 2012. URL [https://setis.ec.europa.eu/sites/default/files/reports/Driving\\_and\\_parking\\_patterns\\_of\\_European\\_car\\_drivers-a\\_mobility\\_survey.pdf](https://setis.ec.europa.eu/sites/default/files/reports/Driving_and_parking_patterns_of_European_car_drivers-a_mobility_survey.pdf)

Le déploiement des technologies à l'hydrogène dans le mix énergétique et la mobilité hydrogène (e.g. utilisation de véhicules à pile à combustible [VPC]) pourraient permettre de réduire considérablement les émissions à effet de serre au niveau européen. Toutefois, le déploiement de cette filière ne pourra se faire sans un soutien spécifique permettant de satisfaire à la fois les exigences du marché et celles liées au développement des technologies à l'hydrogène, mais permettant également de respecter les contraintes liées au réchauffement climatique et l'épuisement des ressources naturelles.

### Cinq technologies, trois scénarios

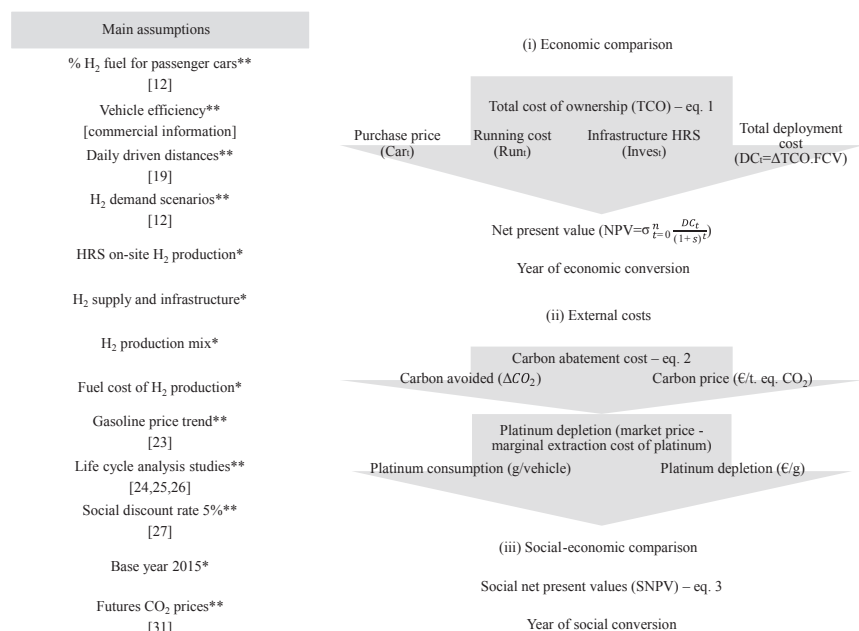
L'analyse coûts-bénéfices (ACB) est une méthodologie permettant d'évaluer l'apport sociétal des innovations (voir **Fig1**). L'INERIS a mené

une étude ACB pour déterminer la période au-delà de laquelle le remplacement des véhicules conventionnels à essence (ICEV) par des VPC pourrait devenir rentable sur le plan socio-économique, compte tenu des coûts (et bénéfices financiers) du déploiement, mais aussi des bénéfices environnementaux (positifs comme négatifs). Dans cette étude, nous avons considéré une combinaison de cinq technologies de production d'hydrogène (voir **Fig2**): le reformage du gaz naturel avec, et sans capture et stockage du CO<sub>2</sub>, l'électrolyse, les procédés de production du biogaz et le reformage de gaz naturel sur site de distribution. Trois scénarios de déploiement de VPC en Europe ont été évalués selon la distance moyenne de conduite journalière: 80 km/jour dans le cas d'un scénario « optimiste »; 60 km/jour dans celui d'un scénario « modéré »; et 40 km/jour dans celui d'un scénario « conservateur ».

### TRANSLATION

The deployment of hydrogen technologies in the energy mix and the use of hydrogen fuel cell vehicles (FCV) are expected to significantly reduce European greenhouse emissions. A social cost-benefit analysis is presented to estimate the period of socio-economic conversion, period for which the replacement of gasoline internal combustion engine vehicles by FCV becomes socio-economically profitable. In this study, we considered a hydrogen production mix of five technologies: natural gas reforming processes with or without carbon capture and storage, electrolysis, biogas processes and decentralized production.

### FIGURES



Notes: \*estimates; \*\*data compiled, see references.

Source: authors.

**Fig1** Démarche de recherche d'analyse des coûts et bénéfices sociaux des FCV et ICEV / Social cost-benefit analysis framework FCV vs ICEV.

Deux externalités ont été estimées : l'externalité positive d'abattement des émissions de CO<sub>2</sub> liée au déploiement de VPC et l'externalité négative liée à l'utilisation de platine, une ressource minière non renouvelable, dans la fabrication de piles à combustible.

Pour évaluer les émissions de carbone, nous utilisons des études d'analyse de cycle de vie des cinq technologies de production d'hydrogène et les émissions de l'ICEV. Le prix du carbone estimé à la fin de la période est actualisé à 2015, au taux social d'actualisation de 5 %. Pour le scénario « modéré », la valeur actuelle nette (VAN) du coût de déploiement est 382 millions d'euros en 2015. Le coût d'abattement des émissions de carbone en utilisant des VPC est estimé à environ 18 € par tonne de CO<sub>2</sub> eq. en 2015, ce qui est très nettement en dessous des coûts externes généralement admis pour le CO<sub>2</sub>. Les résultats montrent que le marché du carbone sous des hypothèses retenues de prix du CO<sub>2</sub> pourrait financer, via une revente de permis négociables par exemple, environ 10 % du coût du déploiement de ce scénario de mobilité à l'hydrogène à l'horizon 2055. L'épuisement des minerais est évalué au travers de la dépréciation naturelle du platine. Chaque VPC contient aujourd'hui environ de 30 à 40

grammes de platine. Nous supposons une réduction progressive de l'utilisation du platine par VPC jusqu'à 10-15 g en 2050. Aujourd'hui l'ICEV consomme 5,6 g de platine par véhicule et nous supposons que cette quantité reste stable au cours de la période analysée. La monétarisation de cette externalité négative montre qu'elle est ne compense pas les effets positifs en termes de réduction de CO<sub>2</sub>, mais elle est tout de même significative pour le bilan coût/bénéfices de la technologie (voir **Fig3**).

## Résultats et perspectives

L'analyse coûts-bénéfices sociaux de VPC face au ICEV fournit deux principaux résultats :

- Sans tenir compte des externalités et conformément les hypothèses adoptées, la différence de coût annuel des deux technologies s'annule et devient positive à partir des années 2050. Au delà, le scénario de mobilité hydrogène dans l'Union européenne étudié pourrait devenir rentable (il commence à générer des profits). Intégrer les coûts externes nets (CO<sub>2</sub> et platine) dans l'analyse montre que le début de la rentabilité économique (en termes de génération de profits annuels) se produit en

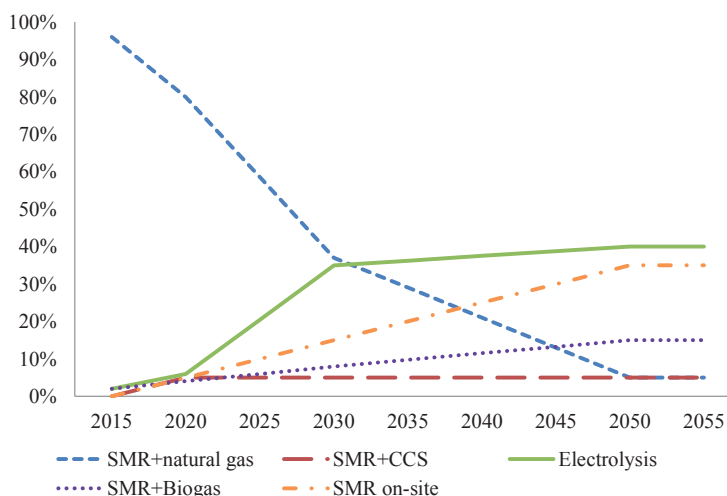
réalité avec 10 ans d'avance. Il est ainsi clair que les effets environnementaux rapprochent fortement l'horizon temporel de rentabilité socio-économique du projet.

- Quelle que soit la variante du scénario étudié (en termes de prix de CO<sub>2</sub> entre 30 € à 50 €/t eq. en 2020 et 140 € à 170 €/t eq. en 2050, et entre déploiement conservateur et optimise), l'investissement peut être socialement rentable en termes de valeur sociale totale nette sur la période 2015-2050.

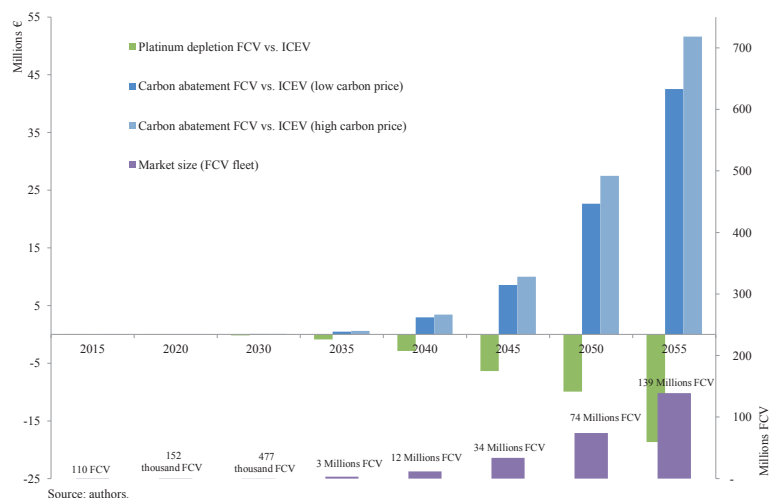
L'ACB sociale comprend des hypothèses qui nécessiteront une plus grande attention dans des études ultérieures. Nos résultats sont très sensibles à la distribution de la production d'hydrogène et à ses projections à 2050. Une analyse étendue d'autres configurations de production d'hydrogène permettrait d'améliorer la robustesse du modèle. Il serait également important de tenir compte d'autres externalités positives telles que la qualité de l'air et les bénéfices de réduction de bruit ; ainsi que de l'acceptabilité sociale des risques liés à la production, la distribution et au stockage d'hydrogène.

Remerciements à Leonardo Roses (HyGear B.V., Pays-Bas).

**Fig2** Scénario de production d'hydrogène en Europe/Hydrogen production mix 2015-2055 in EU-28.



**Fig3** Monétarisation des externalités dans le scénario modéré (millions € 2015)/External costs in the moderate scenario (millions € 2015)



# ÉVALUER L'EXPLOSIVITÉ DES NANOMATÉRIAUX :

## une démarche essentielle pour la maîtrise des risques

### TRANSLATION



Accidental events such as the spontaneous release of nanoparticles, ignition and explosion of a nano-dispersed dust cloud, have potential consequences that can only be predicted through a better understanding of the fundamental safety parameters: agglomeration behavior, flammability and explosivity. It is therefore needed to generate new data in order to better characterize these safety parameters and be able to predict accidental consequences related to the production and use of nanomaterials. In this context, research work performed within WP14 – Accidental Risks – in the European FP7 project MARINA enabled to better understand fundamental mechanisms and accidental risks related to the production and use of nanomaterials. INERIS investigated more specifically the following questions:

- Do the current standard approaches lead to underestimate/overestimate explosion severity of nanopowders?
- Which explosion behavior is to be expected for nano-dust explosions compared to micro-powders?
- What is the influence of agglomeration and passivation on safety parameters?

The knowledge gained through MARINA project is currently under discussions in the CEN TC 352/WG3/PG3 working group led by INERIS dedicated to the development of a guideline for testing flammability and explosivity of nanopowders.

Les événements accidentels redoutés, tels que la libération spontanée de nanoparticules, l'inflammation/explosion d'un nuage nanodispersé ont des conséquences potentielles qui ne peuvent être prévues que par une meilleure connaissance des paramètres fondamentaux de sécurité : agglomération, inflammabilité, explosivité. L'acquisition de ces nouvelles connaissances est une nécessité à la fois pour mieux caractériser les nanomatériaux et pour être capable de prédire les conséquences de scénarios accidentels. L'évaluation de l'explosivité de nanomatériaux pulvérulents constitue une base pour l'évaluation des risques et le dimensionnement des barrières de sécurité actives ou passives.

Dans ce contexte, l'INERIS participe au projet européen FP7 MARINA ([www.marina-fp7.eu](http://www.marina-fp7.eu)). Ce projet, composé d'acteurs industriels majeurs dans le domaine des nanotechnologies, d'instituts de recherche et académiques, a débuté en novembre 2011 et s'est achevé en octobre 2015. Comportant plus de 45 partenaires européens, sans compter la participation de la Russie, de la Chine et des États-Unis, le projet MARINA, pierre angulaire du Nanosafety Cluster européen (<http://www.nanosafetycluster.eu/>), a permis de développer des méthodes de référence en vue d'harmoniser les approches au niveau européen dans les domaines de la toxicologie, de l'écotoxicologie, de l'évaluation des risques accidentels, de la caractérisation des nanomatériaux, de l'étude des performances des systèmes de surveillance de l'exposition aux nanoparticules et enfin de l'évaluation des systèmes et stratégies de réduction des risques liés aux nanoparticules. Au travers de ses actions, le projet MARINA a appuyé significativement une démarche responsable dans le domaine des nanosciences et des nanotechnologies.

## Travaux

L'INERIS a coordonné plus spécifiquement le WP14 « Accidents Risks ». L'objectif était d'acquérir une meilleure connaissance des phénomènes dangereux accidentels relatifs à l'utilisation et à la production de nanomatériaux et de pouvoir émettre des recommandations quant aux méthodes de caractérisation des dangers physico-chimiques (pyrophoricité, inflammabilité) et des risques d'explosion des nanomatériaux, tout en accompagnant le développement de la plateforme expérimentale S-NANO de l'Institut (**Fig1**).

Dans le cadre de ce projet, l'INERIS s'est penché plus spécifiquement sur les questions opérationnelles suivantes :

- Est-ce que les protocoles actuels sont adaptés pour évaluer l'explosivité des nanopoudres ? Est-ce que les approches standards mènent à sous-évaluer ou bien à surévaluer la sévérité d'explosion des nanopoudres ?
- Quel comportement spécifique peut-on attendre pour les explosions de nanopoudres ? Est-ce que la violence d'explosion des nanopoudres est plus élevée que celle des micropoudres ?
- Quelle est l'influence de l'agglomération, de la passivation et de la préinflammation de certaines nanopoudres sur la mesure des paramètres de sécurité ? Si influence, comment la prendre en compte dans les protocoles d'essai ?
- Comment extrapoler les résultats d'explosivité de l'échelle laboratoire à grande échelle ? Y a-t-il un comportement « nano » spécifique ?

## Résultats

Les travaux mettent en évidence que l'augmentation de la surface spécifique entraîne une augmentation de la sensibilité à l'inflammation

mais tend à diminuer la sévérité d'explosion, du moins dans le cas de certains nanomatériaux métalliques. Les données expérimentales rassemblées au travers des collaborations, des mesures directes et des recherches bibliographiques montrent que la sévérité d'explosion des nanopoudres n'est pas toujours supérieure à celle des micropoudres et tend même à décroître avec la diminution de la taille, ce qui constitue une nouveauté comparativement à des poudres de taille micrométrique (Fig2).

Les tendances observées ont été attribuées à plusieurs facteurs tels que l'agglomération, des problématiques de stockage des poudres entraînant une perte de réactivité ou encore des modifications dans les mécanismes de propagation de flamme comparativement à des poudres classiques.

L'influence de ces différents facteurs sur l'explosivité des nanomatériaux a alors été étudiée via des outils expérimentaux originaux (e.g. rhéologie [1], [2]) ou des outils de modélisation.

Le travail effectué a permis d'identifier des problématiques opérationnelles et scientifiques

## RÉFÉRENCES

- [1] HENRY F., BOUILLARD J., MARCHAL Ph., VIGNES A., DUFAUD O., PERRIN L., *Exploring a new method to study the agglomeration of powders: application to nanopowders*, Powder Technology, 250, 13-20 (2013)
- [2] BOUILLARD J., HENRY, F., MARCHAL Ph., *Rheology of powders and nanopowders through the use of a Couette four-bladed vane rheometer: flowability, cohesion energy, agglomerates and energy*, Journal of Nanoparticle Research, Springer Verlag, 2014
- [3] J. BOUILLARD, A. VIGNES, G. KYLAFIS, A. TOMLIN, A. SLEIGH., *Explosivity of Nanopowders in Accidental Risk Management, MARINA and NanoValid INTERNATIONAL CONFERENCE, New Tools and Knowledge developed to overcome Uncertainties in Regulatory Risk Assessment of Engineered Nanomaterials*, OCDE, Paris, 29-30 septembre 2015
- [4] PORCHER J., VIGNES A., DEBRAY B., JANES A., CARSON D. *Protocols for determining the explosivity and Flammability of Powders Containing Nano-objects (for transport, handling and storage)*,

à étudier au niveau de la plateforme S-NANO et a également montré la nécessité d'étudier plus avant l'influence de la dispersion/agglomération sur l'explosivité, et notamment l'influence des propriétés de surface des nanoparticules sur les paramètres de sécurité (inflammabilité, explosivité) [3].

Les connaissances et l'expertise acquises dans le projet MARINA ont été transférées au niveau des comités de normalisation européens (CEN TC 352 « Nanotechnologies ») via le groupe de travail « inflammabilité et explosivité des nanomatériaux » mené par l'INERIS, qui développe un guide technique spécifique [4].

## FIGURES



**Fig1** Vue du laboratoire d'inflammabilité et d'explosivité de la plateforme S-NANO, plateforme dédiée à l'évaluation des risques des nanomatériaux tout au long de leur cycle de vie

**Fig2** Résumé des principales observations relatives à l'explosivité des poussières (micrométrique à nanométrique) dans le cas de nanopoudres métalliques

Comportement de la poudre	
Évolution de la taille primaire des particules	
Évolution de la sévérité d'explosion	
Gouvernée par...	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div>Réactivité de surface</div> <div>Réactivité de surface et énergie d'agglomération</div> </div>

# CHAMPS ÉLECTROMAGNÉTIQUES ET HYPERSENSIBILITÉ : à la recherche de marqueurs biologiques

## RÉFÉRENCE

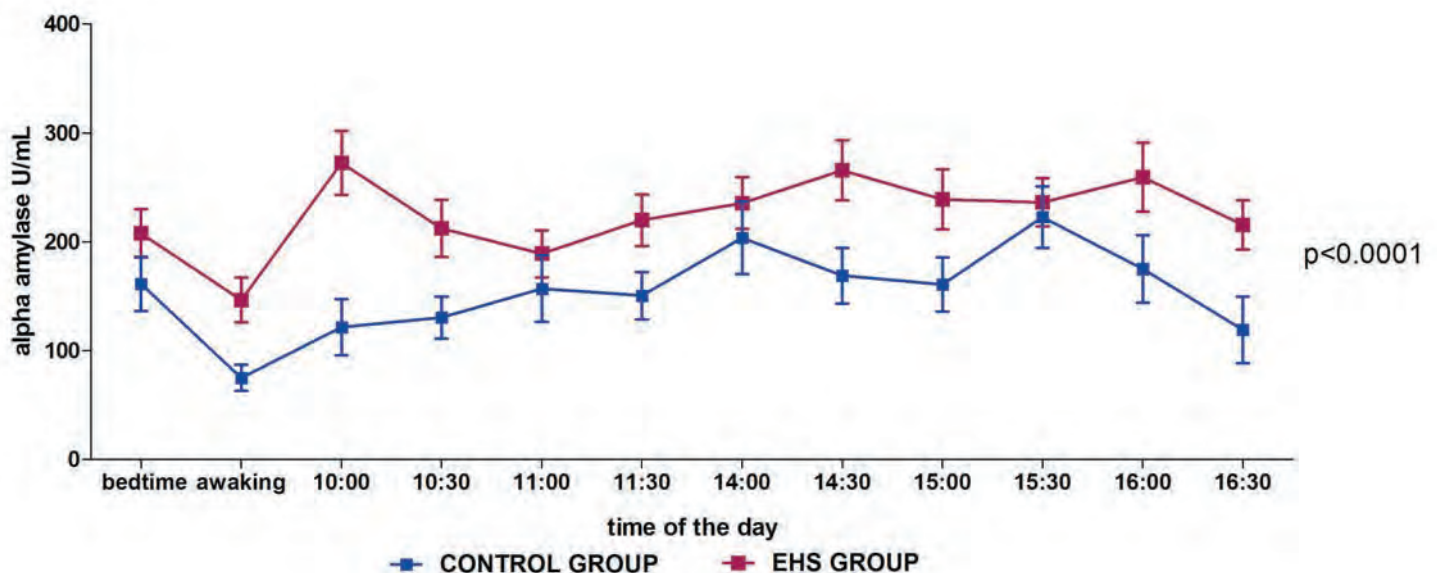
Sandström M.<sup>1</sup>, Lyskov E.,  
Hörnsten R., Hansson  
Mild K., Wiklund U., Rask P.,  
Klucharev V., Stenberg B.,  
Bjerle P. Holter *ECG monitoring  
in patients with perceived  
electrical hypersensitivity.*  
Int J Psychophysiol. 2003  
Sep;49(3):227-35

L'utilisation croissante des nouvelles technologies dans le domaine de la télécommunication (hautes fréquences) ou des appareils domestiques (en basses fréquences) est à l'origine d'une augmentation de l'exposition de l'homme aux champs électromagnétiques (CEM). Les effets de ce type d'exposition sur la santé humaine suscitent des questions et font l'objet de plusieurs études en laboratoire. Outre cette inquiétude sur l'effet sanitaire, certains individus souffrent de symptômes atypiques qu'ils attribuent aux effets de l'exposition aux

CEM. Ce syndrome est communément appelé l'électrohypersensibilité (EHS) ou l'intolérance environnementale idiopathique (IEI) attribuée aux CEM. Scientifiquement, aucune relation causale entre exposition aux CEM et apparition des symptômes n'a été démontrée jusqu'à ce jour. Cependant, quelles que soient leurs origines, ces symptômes sont réels et posent un problème de diagnostic objectif des EHS. Très peu d'études ont été menées dans ce domaine, et le niveau de connaissance scientifique actuel est encore relativement faible.

## FIGURES

**Fig1** : Concentrations salivaires d'alpha amylase chez le groupe contrôle (noir) versus le groupe IEI-CEM (gris)



## Objectifs et méthode

Le programme de recherche s'est orienté vers l'étude de certaines fonctions physiologiques à savoir : le système cardio-vasculaire, les systèmes endocrinien et immunitaire ainsi que l'étude du sommeil et le système nerveux autonome. Ceci afin de rechercher des marqueurs et indices objectifs de ce syndrome. Dans une première approche, un autoquestionnaire a été présenté à des personnes rapportant une IEI-CEM. Parmi les cinquante-deux personnes ayant répondu au questionnaire, trente individus autodéclarant une électrosensibilité ont été comparés à vingt-cinq témoins non électrosensibles. La première partie du programme consistait en une étude comparative des deux groupes sans exposition intentionnelle aux champs électromagnétiques lors d'un protocole composé d'une session expérimentale unique. La seconde partie consistait en une étude en double aveugle contrôlée, avec exposition à quatre signaux électromagnétiques. Dans cette partie de l'étude, les participants étaient leur propre témoin. Les résultats de la première phase montrent une majorité d'indices et de marqueurs non perturbés chez les IEI-CEM. Le sommeil est subjectivement perturbé et l'activité de l'alpha amylase salivaire est significativement plus élevée que chez les témoins. De même, on note une augmentation du nombre de réponses électrodermales aux stimuli sonores chez les électrosensibles. Afin de déceler le lien des CEM avec les symptômes, la seconde partie du programme apporterait des éclaircissements. Cette partie (en cours) compléterait les données actuelles.

Ce programme de recherche met en évidence la nécessité de participation des patients électrosensibles aux études cliniques. D'autres approches objectives du système nerveux autonome et du sommeil seraient un atout pour compléter ce programme.

## Résultats

Le résultat de l'étude concernant les marqueurs sélectionnés indique un taux significativement plus élevé de l'alpha amylase salivaire chez les personnes IEI-CEM. Certaines études suggèrent un déséquilibre avec une tendance à une hyperactivation du système sympathique chez les IEI-CEM. Par ailleurs, selon

les conditions expérimentales de la Phase 1 (absence d'exposition aux champs électromagnétiques), l'activité électrodermale et la variabilité du rythme cardiaque ne montrent pas de différence avec le groupe contrôle, ce qui peut suggérer que l'AA est plus sensible. De même, l'étude réalisée sur la variabilité du rythme cardiaque n'indique pas de perturbation, cependant les études ayant détecté des effets ont été réalisées sur le rythme circadien de HRV [Sandström *et al.*, 2003], il serait donc intéressant d'étudier ces paramètres sur du long terme afin d'explorer les dynamiques des systèmes nerveux autonome sympathique et parasympathique.

En complément, malgré des effets non significatifs au niveau des paramètres de la réponse électrodermale aux stimulations sonores, la fraction de réponses est plus importante chez les IEI-CEM. Cette différence peut être due à un nombre élevé de réponses électrodermales spontanées chez les IEI-CEM.

## Conclusions et perspectives

Les résultats observés peuvent être interprétés de plusieurs manières et doivent être confirmés par une étude incluant un plus grand nombre de participants. Un calcul du nombre de participants nécessaires afin de distinguer des effets serait l'exploration du sommeil ainsi que des mécanismes induisant les troubles peuvent être objectivement étudiés par polysomnographie qui combine l'activité électrique du cerveau, les mouvements des yeux, le tonus musculaire sur une durée de 8 heures. Egalement, d'autres approches exploratoires comme l'actigraphie, incluant les mouvements, la fragmentation, etc. peuvent être réalisées en complément.

Une éventuelle perturbation du système nerveux autonome s'exprimant par l'élévation des taux d'alpha amylase peut également être explorée grâce à la quantification plasmatique de catécholamines et corrélée à une mesure continue de l'ECG et à la pression artérielle permettant ainsi d'explorer les rythmes circadiens de ces systèmes.

Enfin, l'analyse du rôle des CEM dans la genèse des symptômes (issue de la phase 2) serait un atout pour pouvoir élaborer de futures études.



## TRANSLATION

The effects of electromagnetic field (EMF) exposure on human health raise a number of questions and became a subject of several laboratory studies. In addition to this concern about the health effects, some individuals suffer from atypical symptoms that they attribute to the effects of exposure to EMF.

This syndrome is commonly known as the electrohypersensitivity (EHS) or idiopathic environmental intolerance (IEI) attributed to EMF. The aim of our study is to look for biological markers and objective evidence leading to this syndrome. Thirty EHS individuals were compared to twenty-five non-sensitive matched controls. The result of the selected markers indicated a significantly higher rate of salivary alpha amylase (AA) in IEI-EMF people. Electrodermal activity and heart rate variability showed no difference with the control group, which may suggest that the AA is more sensitive.

In conclusion, higher level of AA in EHS participants may suggest that sympathetic adrenal medullar system is activated. Further studies should be focused on the mechanism of the AA increase. This finding could be a new element in the understanding, explanation and comprehension of the physiopathology of EHS.

# UNE NOUVELLE APPROCHE DE DÉTERMINATION de la composition stœchiométrique de nanopoudres

## RÉFÉRENCES

- [1] D. W. Hahn and N. Omenetto, *Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS), Part I: Review of Basic Diagnostics and Plasma-Particle Interactions: Still-Challenging Issues Within the Analytical Plasma Community*, *Appl. Spectrosc.* 64 (2010) 335-366
- [2] D. W. Hahn and N. Omenetto, *Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS), Part II: Review of Instrumental and Methodological Approaches to Material Analysis and Applications to Different Fields*, *Appl. Spectrosc.* 66 (2012) 347-473
- [3] M. Boudhid, J. Hermann and C. Dutouquet, *Compositional analysis of aerosols using calibration-free laser-induced breakdown spectroscopy*, *Analytical Chemistry* 88 (2016) 4029-4035

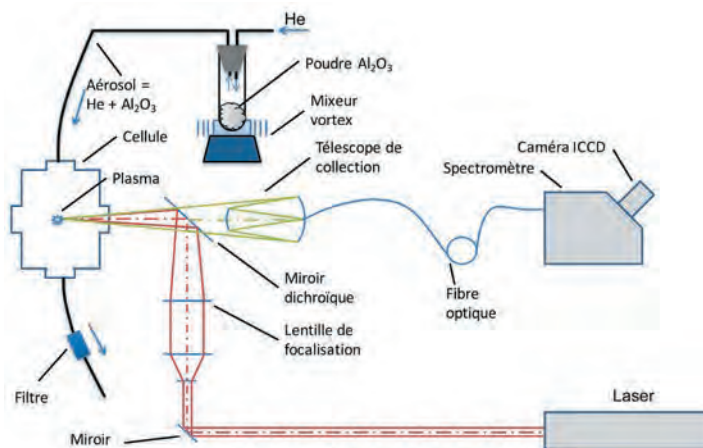
Les nanotechnologies sont considérées comme l'industrie du XXI<sup>e</sup> siècle. Très souvent, le développement de nanomatériaux implique en premier lieu la synthèse de nanoparticules. Celles-ci servent de briques élémentaires à la fabrication de matériaux aux propriétés avancées optiques, mécaniques, électriques, thermiques ou autre. L'avènement des nano-objets, de leurs agrégats et de leurs agglomérats nécessite une métrologie adaptée. Les procédés de fabrication requièrent le développement de nouveaux instruments permettant une analyse en ligne, en temps réel des caractéristiques des nanopoudres produites. La composition stœchiométrique des poudres est un exemple de paramètre qu'il peut être avantageux de suivre en temps réel sur la ligne de production afin d'obtenir un produit avec la composition chimique attendue.

La technique [1][2] LIBS (*Laser-Induced Breakdown Spectroscopy*) a été sélectionnée pour l'accomplissement de cette tâche. Elle consiste à focaliser un laser impulsionnel sur un échantillon à analyser qu'il soit sous forme solide, liquide, gaz ou aérosol. Au point de focalisation, la matière est très fortement chauffée, provoquant l'allumage d'un plasma. La lumière

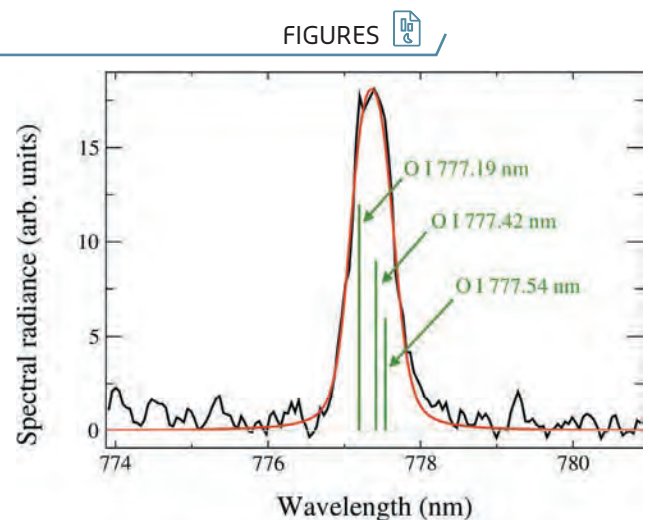
émise par ce dernier peut être analysée par spectroscopie d'émission et permet d'identifier tous les éléments chimiques présents dans le matériau sondé. Quasiment tous les éléments peuvent être détectés. Cette technique ne nécessite pas de préparation de l'échantillon. De plus, elle est non intrusive de par son caractère tout optique. Elle permet donc de réaliser des analyses *in situ*. Cela présente un avantage pour le contrôle de procédé. Un accès optique suffit à accéder à la matière à analyser. Cette analyse est potentiellement rapide, de quelques secondes à quelques minutes selon le nombre de tirs laser nécessaires à l'obtention d'un signal exploitable. Un système basé sur cette technique permet de déterminer (1) la nature chimique élémentaire de la matière analysée et (2) les concentrations en masse *in situ* et en temps réel des différents éléments. Le signal LIBS se présente sous la forme d'un spectre de raies atomique.

## Une analyse LIBS sans calibration

Le plus souvent, la technique LIBS, pour être opérationnelle, nécessite une calibration. Des échantillons parfaitement connus, des étalons,



**Fig1** Dispositif expérimental



**Fig2** Spectre de raies de l'aluminium





Nanopowders are very often used as basic building blocks to elaborate nanostructured materials displaying enhanced functionalities. With the advent of nanoparticle production, the need for an appropriate metrology allowing real-time and in-situ monitoring has risen. The LIBS (Laser-Induced Breakdown Spectroscopy) technique is deemed as a potential candidate for on-site control of the stoichiometry of composite nanopowders. With this aim in view, nanosecond duration laser pulses were focused inside a flow cell where an aerosol of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  particles was circulating at atmospheric pressure with helium as a background gas. Using LIBS, emission lines of aluminum and oxygen were recorded to infer the relative abundances of aluminum and oxygen in the powder. Such measurements usually require the calibration of the LIBS system. In these experiments, line simulation assuming local thermodynamic equilibrium was employed to successfully determine powder stoichiometry without LIBS calibration.

des poudres peut être déduite avec précision sans calibration. Une telle méthode pourrait donc être d'intérêt pour le contrôle de procédés.

doivent être analysés pour constituer une courbe d'étalonnage. Cette méthode, quoique très utilisée, présente des faiblesses. En effet, la composition de l'échantillon à analyser doit être proche de celle des étalons, sans quoi les mesures peuvent être faussées. C'est pourquoi une nouvelle approche de détermination de la composition stœchiométrique de nanopoudres a été proposée en recourant à une analyse LIBS sans calibration [3] (Fig1). Les conditions d'une analyse sur un procédé de production ont été reproduites en laboratoire. Pour ce faire, des poudres d'alumine ont été aérosolisées dans un flux d'hélium. Les procédés de fabrication utilisent souvent des gaz tampons inertes. Le flux de gaz avec les particules en suspension est alors acheminé vers une cellule pourvue de visée optiques. Des impulsions laser très énergétiques de durée nanosecondes sont alors focalisées au centre de la cellule créant ainsi le plasma à analyser. Des spectres d'émission expérimentaux contenant les raies atomiques sont alors enregistrés.

Au stade du traitement des données, les spectres expérimentaux sont comparés à la luminance spectrale d'un plasma en équilibre thermodynamique local (ETL) en utilisant un algorithme itératif développé au laboratoire LP3 (Laser, plasma et procédés photoniques) à Marseille. Dans les conditions de l'ETL, les lois de la physique statistique à l'équilibre s'appliquent et les caractéristiques du plasma sont déterminées par sa seule température. Les rapports des intensités totales des raies des différents éléments contenus dans le signal LIBS (Fig2 et

Fig3) peuvent être reliés aux densités d'espèces présentes dans le plasma par des lois connues. Celles-ci permettent par exemple de calculer les concentrations relatives de chaque élément. Pour aller encore plus loin dans la compréhension des travaux menés, il faut noter que les plasmas induits par laser ont un caractère transitoire. Leur durée de vie est d'environ 100  $\mu\text{s}$  pour une taille de quelques millimètres. L'enregistrement du signal LIBS nécessite donc une résolution temporelle adéquate avec deux paramètres importants. Le premier, le délai d'acquisition, représente le temps écoulé entre le tir laser et le début de l'enregistrement du signal par le détecteur. Le second, la porte d'intégration, est la durée pendant laquelle l'émission du plasma induit par laser est enregistrée.

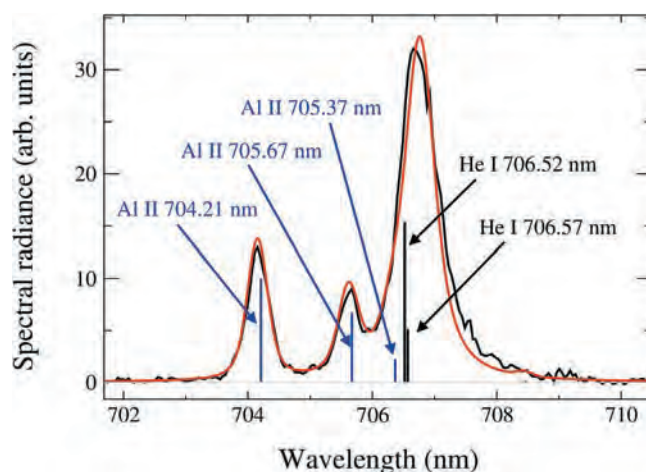
## Résultats

Ainsi, au cours des expériences décrites ci-dessus, l'étude des spectres a montré que l'équilibre thermodynamique local n'était réalisé que sur des fenêtres temporelles limitées. Ainsi, la stœchiométrie de l'alumine a pu être déterminée avec une précision de 10 % lorsque le plasma était à l'équilibre thermodynamique local soit 1.3 microsecondes après le tir laser avec un temps d'intégration de 500 ns. Les choix de ces paramètres sont donc primordiaux.

Cette étude met en évidence deux faits. Elle montre que le plasma induit par laser peut atteindre l'équilibre thermodynamique local dans une fenêtre temporelle bien déterminée. Elle montre également que dans ces conditions, la composition

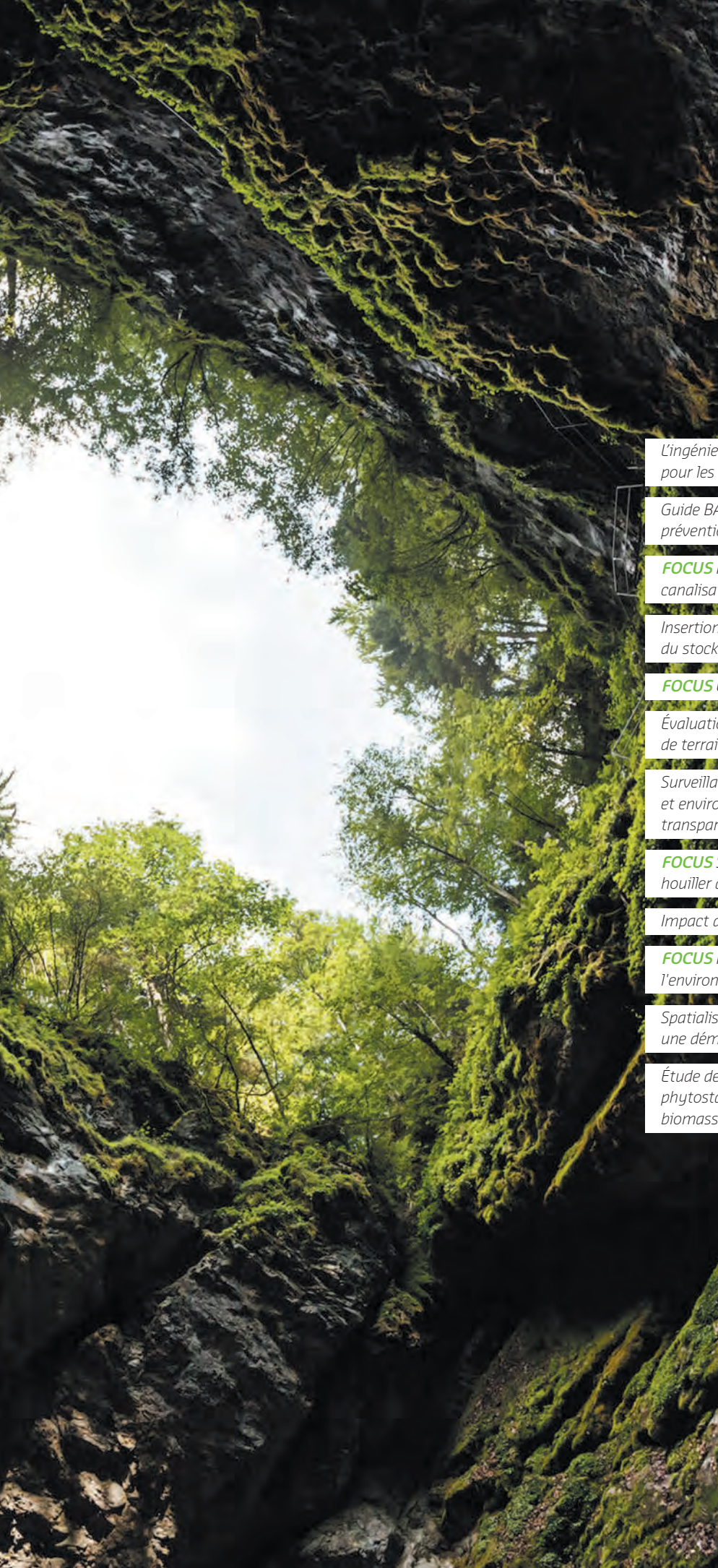
## FIGURES

Fig3 Spectre de raies de l'oxygène





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



*L'ingénierie FOH : un cadre de référence pour les acteurs de la sécurité*

*Guide BATIRSÛR : accompagner les entreprises dans la prévention des risques technologiques en zone PPRT*

**FOCUS** *Fold : localiser les fuites de gaz sur les canalisations enterrées grâce à la fibre optique*

*Insertion de l'incertitude pour l'analyse des risques du stockage de CO<sub>2</sub>*

**FOCUS** *Un nouveau laboratoire « gaz-eau-roche »*

*Évaluation des dommages liés aux mouvements de terrain sur les structures en maçonnerie*

*Surveillance globale et fusion de données industrielles et environnementales pour la sécurité et la transparence des mines du futur*

**FOCUS** *Sismicité post-minièrre dans l'ancien bassin houiller de Gardanne (Provence)*

*Impact de l'agriculture sur la qualité de l'air*

**FOCUS** *Identification des sources des particules dans l'environnement : réactivité et traceurs*

*Spatialisation des inégalités environnementales dans une démarche de caractérisation de l'exposome*

*Étude de l'efficacité et de la pérennité de la phytostabilisation aidée couplée à une valorisation biomasse en bois-énergie*

## L'INGÉNIERIE FOH : un cadre de référence pour les acteurs de la sécurité

### DÉFINITION INERIS

Les démarches « Facteurs organisationnels et humains (FOH) » désignent des approches pluridisciplinaires qui mobilisent les connaissances, modèles et techniques issues des sciences humaines et sociales afin d'appréhender les systèmes sociotechnologiques dans leur fonctionnement réel. Ces démarches s'appliquent ainsi à l'évaluation de ces systèmes, au retour d'expérience et à la conception, avec un objectif de prévention des risques industriels et professionnels.

### TRANSLATION

There exists today a diversity of practices in the domain of what is called 'human and organisational factors'. Historically developed in high-risk industries such as the nuclear or civil aviation, the chemical and petrochemical industries as well as other systems (e.g., dams, tunnels) have been involved in such development in the past 10 to 20 years. But one problem is to situate the diversity of disciplines, methods and perspectives in this field, as much for large companies than for smaller ones. For this reason, INERIS has carried out several studies in order to help companies stand back and design 'human and organisational' strategies. Following these studies, INERIS published a guide for this specific purpose. The guide contains methodological principles, theoretical insights and practical examples for companies to design a program then introduce 'human and organisational factors' in their activities.

Depuis quelques années, il existe de nombreuses et diverses expériences au sein des industries à risque comme l'aéronautique, le nucléaire ou les Installations classées pour la protection de l'environnement (ICPE) dans le domaine dit des Facteurs organisationnels et humains (FOH). Il existe pour ces différentes filières un historique singulier et varié en ce qui concerne l'introduction de démarches d'ingénierie FOH, c'est-à-dire de démarches mettant en œuvre des connaissances issues des sciences humaines et sociales (SHS) appliquées à la sécurité industrielle et professionnelles.

Dans ces grandes filières, les experts FOH se sont à certaines occasions exprimés pour offrir un point de vue mettant plus particulièrement en avant les méthodes mises en œuvre [1] [2], les programmes de recherche développés [3] ou encore la mise en place d'un réseau d'animateurs ou de consultants FOH [4].

Il existe de nombreuses expériences dans les entreprises (ICPE) de « rencontre » avec les FOH. Voici quelques exemples :

- Étude du travail des opérateurs dans le cadre de la conception d'une nouvelle interface homme machine, appuyée par un consultant externe spécialisé en ergonomie.
- Mise en place de « causeries sécurité » par le service QHSE d'une entreprise pour faire dialoguer et échanger les différents acteurs au quotidien, animées par une personne qui a été formée pour son déploiement.
- Investigation approfondie à la suite d'un accident par une équipe spécialisée d'un grand groupe (e.g. consultants FOH) pour un site industriel, sur la base d'un modèle d'accident « FOH »...

Parfois, certaines entreprises mettent en œuvre plusieurs de ces démarches en parallèle. Si de telles combinaisons sont tout à fait envisageables, il est parfois difficile pour les organisations de saisir la complémentarité, mais aussi la pertinence de mener de front plusieurs de ces démarches tout en maintenant une vision d'ensemble. Il est aussi difficile pour ces entreprises de se situer par rapport à tout ce qu'il est possible de faire dans ce domaine lorsque

l'on a mené une étude ponctuelle, et que la diversité des possibilités n'est explicitée nulle part. Les contours ne sont pas toujours clairs, la portée des démarches non plus, et il peut en résulter une certaine confusion quant aux suites à donner. Parfois également, les entreprises assimilent leur expérience plutôt ponctuelle à une démarche FOH alors que cette expérience n'en couvre qu'un aspect.

Cette situation peut quelques fois dérouter les organisations qui souhaitent se lancer dans ce type de démarche et qui ont des difficultés à déterminer, face à la diversité des approches possibles et des situations à investiguer, quel est le chemin à suivre. Or il s'agit pour les entreprises de pouvoir identifier, calibrer et engager une démarche FOH qui soit viable par rapport aux ressources, compétences et temps disponibles dans une entreprise, mais aussi par rapport aux dimensions qui seraient les plus importantes sur le plan de la sécurité (*i.e.* sur quoi se focaliser prioritairement).

Ainsi, dans le cadre de son activité de recherche [5], l'INERIS a produit un guide, reposant sur une définition des FOH [6], qui a pour but de fournir un cadre pour réaliser un bilan et envisager une stratégie et un plan d'action FOH (Fig1) :

- Il précise ce que l'on entend par démarche FOH.
- Il propose une liste de démarches FOH existantes et des fiches descriptives.
- Il propose des principes de description de ces démarches.
- Il cartographie de manière simple les démarches FOH.
- Il présente une matrice d'analyse des capacités d'ingénierie FOH d'une entreprise pour établir un bilan et structurer un plan d'action d'ingénierie FOH.

L'application concrète du guide repose sur une série de questions qui interrogent l'entreprise sur le niveau d'expertise disponible dans l'entreprise en FOH, sur les moments pendant lesquels elle est mobilisée ainsi que sur les niveaux ou thèmes qui font l'objet d'analyses (Tab1).



## RÉFÉRENCES

[1] Lagrange, V. 2011. *Culture de sûreté, concept fourre-tout ou opportunité pour tenir compte davantage des hommes et des organisations dans les industries à risque*. 46<sup>e</sup> Congrès international. Société d'ergonomie de langue française. 14 au 16 septembre. Paris.

[2] Figarol, S. 2010. *Risque et facteurs humains dans le contrôle aérien : voyage dans la complexité*. dans Nicolet, JL (dir). Risques et complexité. L'Harmattan.

[3] Blatter, C. 2004. *Analyse des situations de travail dans le transport ferroviaire : quelles évolutions en vingt ans ?* @ctivités. Vol 1. n° 1.

[4] Vautier, JF., Tosello, M., Barnabe, I., Lipart, C., Leveque, F., Hernandez, G., Dupont, M., Dutilleul, S., Quiblier, S., Barriere, V., Baussart, N. 2011. *Développement du réseau facteur humain et organisationnel (FH&O) du CEA : un témoignage réflexif*. 46<sup>e</sup> Congrès international. Société d'ergonomie de langue française. 14 au 16 septembre. Paris.

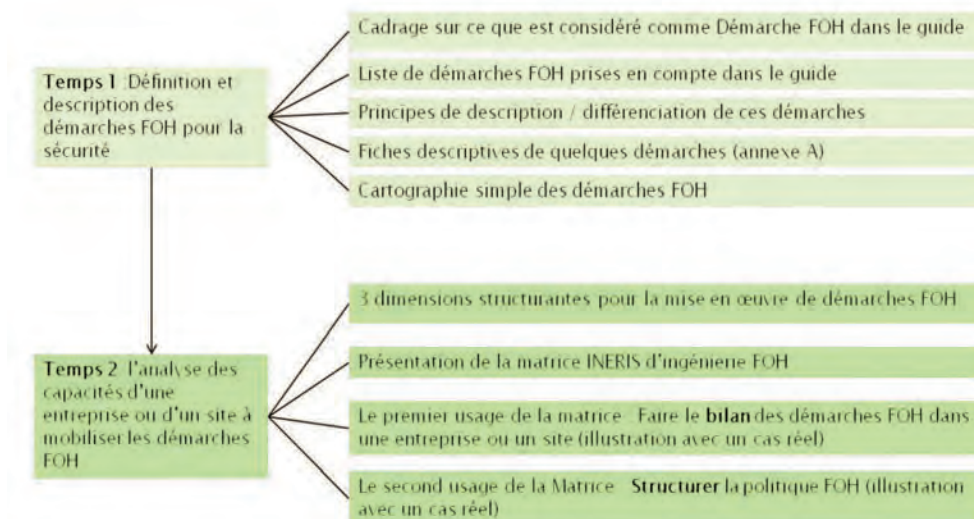
[5] Le Coze, JC. 2016. *Trente ans d'accidents. Le nouveau visage des risques sociotechnologiques*. Toulouse : Octarès.

[6] INERIS. 2015. *Guide d'ingénierie des facteurs organisationnels et humains (FOH)*. Rapport d'étude DRA-15-149659-05857A, disponible à l'adresse suivante <http://www.ineris.fr/centredoc/guideingenierie-foh-vf-publication-internet-1443789018.pdf>



## FIGURES

**Fig1** structure du guide



**Tab1** Questions posées

Expertise	Niveaux d'analyse	Moments
Quel est le degré d'expertise disponible dans l'entreprise dans le domaine des FOH ?	Quelles sont les études ou approches qui ont été menées dans le domaine des FOH ?	À quelles occasions des études et approches FOH sont déployées ?
S'agit-il d'une expertise plutôt dans le domaine de l'ergonomie (FH) ou de la sociologie (FO) ?	Quels acteurs et situations ont été observés et rencontrés pour ces études et approches FOH ?	S'agit-il d'études et approches qui concernent les phases de conception lors de modification ou de projet (avant) ?
Cette expertise est-elle internalisée ou externalisée ?	Ces études et approches ont-elles porté sur des postes de travail ?	(...)
À quelle fréquence cette expertise est-elle sollicitée par l'entreprise ?	Ces études et approches ont-elles porté sur le fonctionnement des équipes d'opérationnels ?	
S'agit-il d'une expertise qui repose sur la sensibilisation de personnel de l'entreprise ?	(...)	
(...)		

## GUIDE BATIRSÛR: accompagner les entreprises dans la prévention des risques technologiques en zone PPRT

### TRANSLATION

The objective of the project is to help companies to take into account the technological risk prevention plans (PPRT) introduced in France following AZF's accident to manage land-use planning in the vicinity of upper-tier SEVESO establishments. The project started in 2012 was conducted by INERIS in collaboration with CTICM, INSA Centre Val de Loire, ArcelorMittal, AMARIS, the Ministry of the Environment, Energy and Marine affairs, Bourges Plus Urban Community and Cher County Council. It aimed to improve knowledge and to better understand and predict the structural response of single storey steel framed building to actions caused by explosions. The work involved blast small and middle-scale tests on building and analytical and numerical modelling. It led to develop a guide for practitioners allowing to facilitate the blast design of steel building. It gives a technical and economical solution to make the setting-up of companies around blast technological risk area easier as well as to improve levels of structural safety. The guide is available free of charge on the INERIS and other partners' website.

À la suite de la catastrophe d'AZF, la loi « Risque » n° 2003-699 du 30 juillet 2003 a créé les Plans de préventions des risques technologiques (PPRT). Ces plans visent à améliorer la coexistence des sites industriels à l'origine du risque et les activités économiques, tout en assurant la protection des personnes. Les PPRT peuvent ainsi prévoir des restrictions de l'urbanisation future autour du site industriel, et/ou des travaux de renforcement des bâtiments existants.

Les zones soumises à un aléa de surpression de faible intensité (20-50 mbar) représentent de grandes zones constructibles dans lesquelles les bâtiments d'activités économiques en acier sont majoritairement représentés. Toutefois, afin de faciliter leur implantation dans ces zones réglementées, il est nécessaire d'accompagner les entreprises dans les mesures techniques à mettre en œuvre.

Pour répondre à cet enjeu, l'INERIS a initié en 2012 et pour une durée de 3 ans le projet de recherche BATIRSÛR « Bâtiment en acier en zone PPRT de surpression 20-50 mbar » avec le soutien du ministère de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer. Ce projet visait d'une part à approfondir les connaissances sur le comportement et la tenue des bâtiments en acier de plain-pied face à l'aléa de surpression dans la zone 20-50 mbar, et d'autre part à améliorer la précision des modèles théoriques de prédiction existants. Il a été réalisé en partenariat avec le CTICM, l'INSA Centre Val de Loire, ArcelorMittal, AMARIS, la Communauté d'agglomération de Bourges Plus et le conseil départemental du Cher.

Les travaux de recherche se sont appuyés sur :

- La réalisation d'essais d'explosion sur maquette à échelle réduite de l'INSA CVL afin de mieux comprendre la répartition de l'onde de surpression autour du bâtiment (Fig1) [1].
- La réalisation d'essais d'explosion sur maquette à moyenne échelle sur la plateforme expérimentale Explosion-Structure de l'INERIS afin d'étudier la réponse et mieux comprendre le comportement de la toiture d'un bâtiment en acier [2].
- La réalisation de modélisations théoriques analytiques et numériques, validées par les essais à moyenne et petite échelle, afin de simuler de manière précise la réponse complète d'un bâtiment en acier [3].

Les résultats de ces recherches ont permis de développer une méthodologie modulaire unique, simple à appréhender qui, contrairement à l'approche statique des méthodes classiques employées par les bureaux d'études, repose sur des outils de calcul précis et prédictifs intégrant l'aspect dynamique du signal de surpression et le comportement associé de la structure.

Le guide BATIRSÛR [5] [6] qui en résulte, à destination des bureaux d'études construction, permet ainsi de faciliter le dimensionnement et d'optimiser la conception de bâtiments de plain-pied en acier soumis aux aléas de surpression 20-50 mbar en zone PPRT. Il donne des règles et dispositions constructives simples à respecter pour les différents éléments constitutifs du bâtiment afin de résister à l'explosion : éléments primaires (ossature porteuse composées de

### FIGURES



**Fig1** Essai à petite échelle sur table d'explosion de l'INSA CVL réalisé en partenariat avec le CTICM : caractérisation de l'onde de surpression et de la réponse de la structure

portiques), secondaires (pannes, lisses) et pour l'enveloppe (bardage). Il permet d'évaluer rapidement et facilement la résistance des structures métalliques, sans mise en œuvre de techniques de calcul complexes et coûteuses, tout en s'intégrant aux règles classiques de dimensionnement en limitant les coûts et en assurant la protection des personnes.

La figure 2 (Fig2) donne un exemple comparatif de dimensionnement\* d'un bâtiment situé en zone PPRT de surpression avec le guide BATIRSÛR et avec les pratiques simplifiées actuelles employées par les bureaux d'études construction. Selon ces dernières, de nombreuses modifications sur l'ensemble des éléments constitutifs du bâtiment sont nécessaires. Avec le guide pratique BATIRSÛR, peu d'adaptations techniques sont nécessaires pour répondre aux exigences du PPRT, comparé au dimensionnement de ce même bâtiment en zone hors PPRT. Avec un dimensionnement facilité, et une conception optimisée, le guide BATIRSÛR répond aux impératifs économiques des professionnels. Il apporte une solution technique et économique à l'implantation ou au maintien des entreprises sur ces zones réglementées, par ailleurs attractives

## RÉFÉRENCES

- [1] CTICM, INSA CVL, 2016, *Étude expérimentale et numérique du comportement d'un bâtiment industriel en charpente métallique soumis aux effets d'une onde de surpression*, thèse présentée par Sara SANTANA HERRERA
- [2] INERIS, 2015, Projet BATIRSÛR - Livrable L(SE3.2) *Campagne d'essais à moyenne échelle - Rapport d'essais ref. DRA-14-131542-12720A.*
- [3] INERIS, 2013, Livrable L(SE2.2) *État de l'art des modèles de prédiction du comportement d'un bâtiment en acier soumis à une onde de surpression DRA-13-131542-12481A*
- [4] PARIS L. *Comportement des structures soumises à une explosion*. Paris: Édition T.I., 2010.
- [5] INERIS, CTICM, INSA Centre Val de Loire, ArcelorMittal, AMARIS, le ministère de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer, la Communauté d'agglomération de Bourges Plus et le conseil départemental du Cher, 2016, *Guide pratique de conception d'un bâtiment en acier à usage industriel implanté en zone 20- 50 mbar d'un PPRT Version n° 1* <http://www.ineris.fr/ressources/recherche/iddoc=2655>
- [6] INERIS, CTICM, ministère de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer., 2016, *Exemples d'estimations économiques des coûts liés au dimensionnement d'un bâtiment en zone 20-50 mbar d'un effet de surpression* <http://www.ineris.fr/ressources/recherche/iddoc=2656>

par leur positionnement (proximité de grandes voies routières, ferroviaires, zone de chalandise...), et contribue ainsi à la vie des territoires.

**Pour consulter le guide :** <http://www.ineris.fr/centredoc/batirsur-guide-pratique-vf-20160404-version-com-avec-logo-meem-1464770002.pdf>

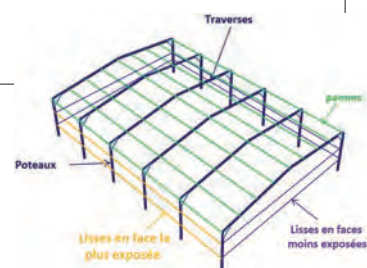
## FIGURES

**Fig2** Tableau comparatif des méthodes de dimensionnement

	<b>Dimensionnement du bâtiment - Hors exigences PPRT</b>	<b>Dimensionnement du bâtiment vis-à-vis des effets de surpression - Pratiques actuelles des bureaux d'études construction</b>	<b>Dimensionnement du bâtiment vis-à-vis des effets de surpression - Guide pratique BATIRSÛR</b>
<b>Portique</b>	Portiques, espacés de 6 m, Traverse IPE330 - S275, Poteau IPE360 - S275	Portique, espacés de 6 m, Traverse HEA600 - S275, Poteau HEB650 - S275	Pas de modification par rapport au dimensionnement hors PPRT
<b>Panne</b>	Pannes IPE 140 - S275 et espacées de 2 m environ	Pannes IPE 220 - S275 et espacées de 2 m environ	Pas de modification par rapport au dimensionnement hors PPRT
<b>Lisse</b>	Lisses IPE 120 - S275 espacées de 2 m environ	Face 1 : IPE270 - S275 espacés de 1 m Faces 3 et 4 : IPE220 - S275 espacés de 2 m	Face 1 : IPE160 - S275 espacés de 2 m Faces 3 et 4 : pas de modification
<b>Éléments non structuraux</b>	Couverture bac acier avec étanchéité/ Façade en bardage simple peau respectant les règles de dimensionnement des normes neige et vent	A minima renforcement des fixations des éléments de bardage et de couverture de toiture	Pas de modification par rapport au dimensionnement hors PPRT

\*Note: Dimensionnement d'un bâtiment en acier de plain-pied de 36 mètres de long et 15 mètres de large et de 6 mètres de haut, situé dans le périmètre d'exposition aux risques de surpression d'un PPRT et qui se doit de répondre aux objectifs de performances suivants, indiqués dans le règlement du PPRT :

- Zone d'intensité: 35-50 mbar,
- Nature de l'onde de surpression: onde choc,
- Temps d'application de l'onde de surpression: 150 ms





## FOLD : localiser les fuites de gaz sur les canalisations enterrées grâce à la fibre optique

Selon l'EGIG (European Gas pipeline Incident data Group), l'Europe de l'Ouest est traversée par un réseau de transport de gaz naturel par canalisation de 145 000 km de long. Sur ce réseau, dont la plus grande partie est enterrée, on recense chaque année en moyenne une vingtaine d'incidents dont une part de plus en plus significative est causée par la corrosion imputable au vieillissement des installations. Pour détecter au plus vite ces fuites, plusieurs sociétés envisagent d'utiliser la fibre optique comme moyen de détection sur des installations existantes et recherchent donc à définir une procédure standard d'installation. Ce type de détection pourrait également être utilisé sur de nouvelles installations car des fibres optiques sont souvent installées simultanément à des fins de télécommunication.

Dans le cadre du projet de recherche partenariale FOLD (*Fibre Optic Leak Detection*), les sociétés TOTAL, GRTgaz, AIR LIQUIDE et ENGIE E&P

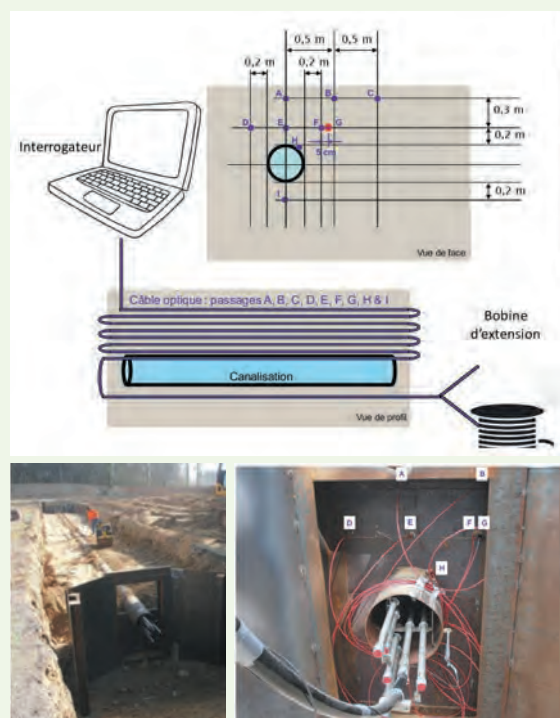
International ont sollicité l'INERIS pour mener une campagne d'essais visant à évaluer la capacité de dispositifs de détection par fibre optique à localiser de petites fuites de gaz sur une canalisation enterrée dans une configuration proche de la réalité. Une canalisation de transport de gaz, de diamètre 400 mm et de 30 m de long, a été enterrée à 1 m de profondeur et un câble optique, constitué de plusieurs fibres, exécutait plusieurs passages le long de cette canalisation (Fig1). Ces différents passages ont permis d'évaluer l'influence de la position du câble par rapport à la canalisation lors d'un même test. Les fuites de gaz (méthane essentiellement) se faisaient sur le pourtour de la canalisation, à travers des orifices de 1 à 7 mm, prééquipés d'un disque de rupture pour simuler au mieux l'éclatement d'une vraie canalisation, et sous une pression pouvant atteindre 100 bars. Lors de chaque essai, et pour chaque position du câble optique, il était possible de mesurer le profil de

température le long de la canalisation (Fig2). De ce projet, il ressort que la fibre optique peut détecter des fuites de méthane en respectant certaines règles d'implantation. Les conclusions de ces essais réalisés par l'INERIS pourront ainsi être directement utilisées par les industriels pour rédiger leur propre procédure d'implantation pour les installations existantes ou à venir.

### RÉFÉRENCE

Gentilhomme O, Audouin G., Houssin D., Raguin B. et Leininger J-P, « FOLD project: experimental assessment of the efficiency of an optical fibre to detect a gaseous leak in a buried pipe », *Int. J. of Safety and Security Eng.*, Vol. 6, N° 2, pp 219 – 228, 2016.

Fig1 Installation du câble optique autour de la canalisation enterrée



### FIGURES

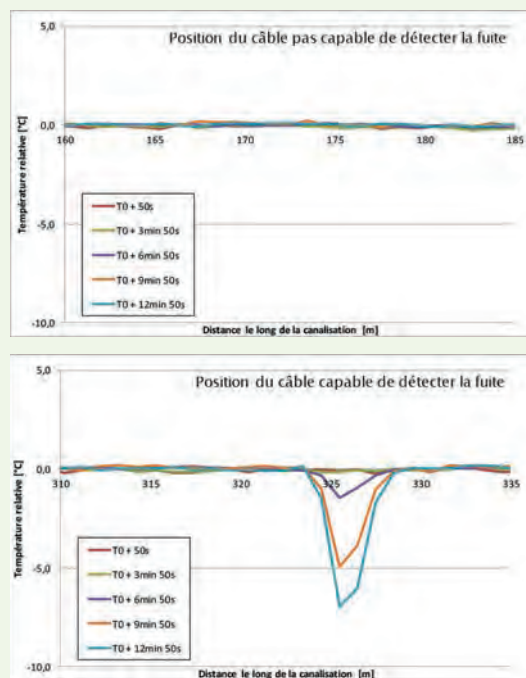


Fig2 Comparaison du profil de température mesurée le long de la canalisation lors d'une fuite de méthane pour deux positions données de la fibre (TO : démarrage du rejet)



# INSERTION DE L'INCERTITUDE

## pour l'analyse des risques du stockage de CO<sub>2</sub>

Le stockage du CO<sub>2</sub>, après sa capture sur les sites industriels émetteurs, est une des voies étudiées pour limiter les émissions anthropiques de CO<sub>2</sub> conduisant au réchauffement climatique: il s'agit de la filière CSC (captage et stockage de CO<sub>2</sub>). L'INERIS a engagé en 2012 une thèse de doctorat [1] dans le cadre de son axe de recherche EVARISTE. Menée par Tatiana Okhulkova et soutenue le 15 décembre 2015 à l'École centrale de Paris, ce doctorat avait pour objet l'étude des incertitudes de la modélisation en milieu souterrain dans le cadre d'une analyse de risques, avec pour cas d'application concret le stockage souterrain de CO<sub>2</sub>.

### Méthode

Le travail de thèse s'est centré sur la modélisation de deux scénarios de risques: la migration à travers la roche-couverture sous l'effet d'une surpression et la migration latérale plus lointaine que prévu au sein du réservoir. Il s'agit des scénarios 2 et 5 sur la figure 1 (Fig1), qui illustre les principaux scénarios de fuite de CO<sub>2</sub>



### TRANSLATION

Tatiana Okhulkova completed her PhD on Dec.15<sup>th</sup>, 2015, after studying the uncertainties in modeling the migration scenarios for CO<sub>2</sub> geological storage. Such a storage is envisaged to fight climate change, by injecting CO<sub>2</sub> in deep underground formations after capturing it at industrial plants.

An important task was to build a metamodel that reproduces the results of the complete numerical model previously developed by INERIS, with a mathematical function that demands much less calculation time (typically, 100 000 runs in a few minutes). Here, the polynomial chaos expansion theory was used. The importance of the different input variables was studied and compared for two risk scenarios: lateral migration of the CO<sub>2</sub> plume and overpressure at the caprock.

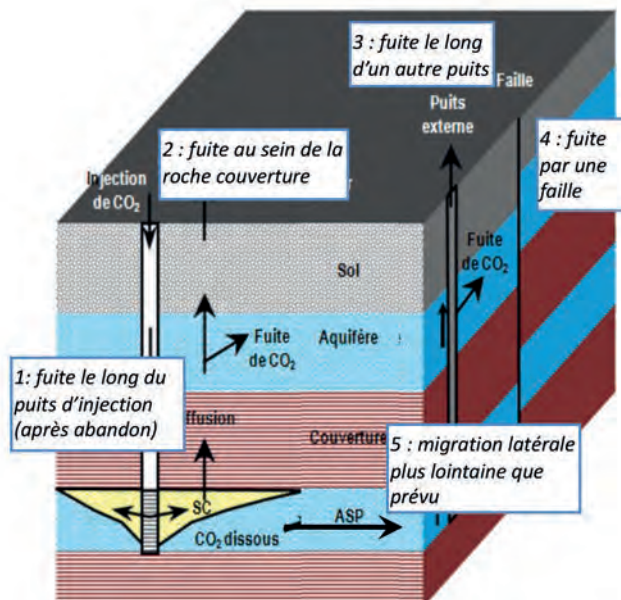
The PhD thesis also considered the influence of heterogeneities. In order to obtain an uncertainty that is similar to the homogeneous case, a 4.5 times higher standard deviation is needed for heterogeneity as input parameter. This shows that the contribution of heterogeneities to the global uncertainty is weaker. This work necessitated to combine the numerical model with a MATLAB routine that generates a 3D heterogeneous domain.

identifiés par l'INERIS lors des premiers travaux d'analyse des risques [2].

Pour étudier l'incertitude liée à une évaluation de risques à l'aide d'une simulation numérique,

il est nécessaire de réaliser un grand nombre de tirages en faisant varier les paramètres d'entrée du modèle utilisé. À cette fin, une tâche importante de la thèse a consisté à réaliser

### FIGURES



**Fig1** : Représentation schématique des 5 principaux scénarios de fuite de CO<sub>2</sub>



RÉFÉRENCES

[1] Thèse de doctorat de T.Okhulkova soutenue à l'École centrale de Paris le 15 décembre 2015 : "Integration of uncertainty and definition of critical thresholds in CO<sub>2</sub> storage risk assessment".

[2] Farret R., Thoraval A., Gombert P., *État de l'art et analyse des risques pour un stockage de CO<sub>2</sub> en aquifère salin, Rapport N° 2: les risques en phase de stockage à long terme*, Rapport INERIS-DRS-10-100887-12619A, janvier 2011

[3] Bastug E., Menafoglio A., Okhulkova, Tatiana, *Polynomial Chaos Expansion for an Efficient Uncertainty and Sensitivity Analysis of Complex Numerical Models*, ESREL conference 2013, Amsterdam, Sept 2013

[4] Okhulkova T., Clouteau D., Cottreau R. ; Farret R., *Probabilistic modeling and simulation of CO<sub>2</sub> storage in heterogeneous geological formations*, ICOSSAR Conference 2013, New York, Juin 2013

un métamodèle (également appelé surface de réponse). Son rôle est de reproduire les résultats du modèle numérique complet, pour une variable de sortie donnée, à l'aide d'une fonction mathématique qui demandera nettement moins de temps de calcul que le modèle initial. En effet, le métamodèle a besoin d'une centaine de simulations avec le modèle initial pour se caler, soit plusieurs jours de calcul, puis il peut effectuer 100000 tirages en quelques minutes. C'est la technique des polynômes de chaos qui a été utilisée, décrite dans la publication Bastug et Okhulkova en 2013 [3].

### Résultats

Tatiana Okhulkova a étudié un cas hypothétique de stockage dans le Dogger du Bassin parisien, sur la base d'un modèle 2D-axisymétrique puis d'un modèle 3D. Considérons à titre d'illustration le scénario 5, c'est-à-dire le risque que la migration latérale du panache de CO<sub>2</sub> soit plus lointaine que prévu : quand le rayon  $r_0$  du panache est estimé proche de 1 200 m dans le cas nominal, l'étude des incertitudes montre qu'il y a une probabilité de 2 % que ce rayon dépasse en fait 1 500 m. En comparant l'importance<sup>1</sup> des différentes variables d'entrée, on montre que cette incertitude est gouvernée avant tout par deux variables : la perméabilité de la roche et la saturation maximale en gaz.

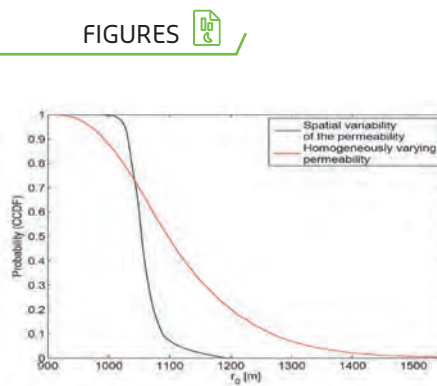
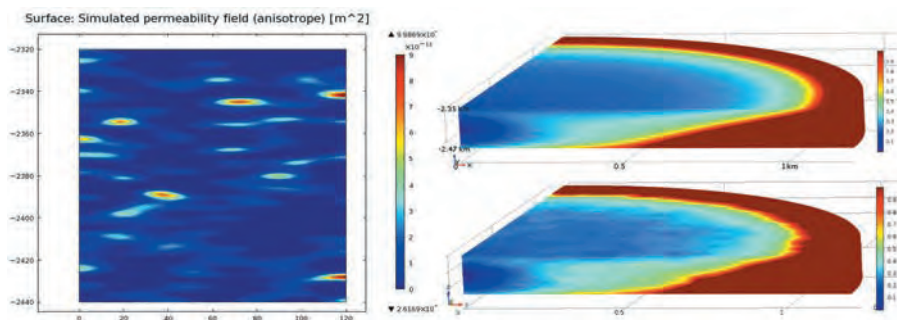
Le travail de thèse a également considéré l'étude des hétérogénéités, en construisant sous MATLAB un module de génération de champ 3D hétérogène pour la perméabilité [4] (Fig2). La figure 3 (Fig3) montre que la contribution de l'hétérogénéité spatiale à l'incertitude globale est plus faible que lorsque la perméabilité est supposée homogène (courbe rouge), ce qui met en évidence le caractère « automoyennant » des réalisations géostatistiques. Ainsi, pour avoir une incertitude équivalente sur le rayon du panache  $r_0$ , dans le cas hétérogène, l'écart-type relatif à la perméabilité devrait être multiplié par 4,5 par rapport au cas homogène.

Les travaux ont été encadrés par R. Farret, chef de projet pour la filière CSC à l'INERIS, avec l'appui de F. Laoufa et A. Thoraval. Ils ont été l'occasion d'une collaboration étroite avec deux laboratoires de l'École centrale de Paris : laboratoire de mécanique des matériaux (D. Clouteau - directeur de thèse - et R. Cottreau) et laboratoire de mathématiques (E. de Rocquigny). Des échanges ont également eu lieu avec d'autres partenaires impliqués avec l'INERIS dans des projets de recherche portant sur le stockage de CO<sub>2</sub>.

<sup>1</sup> Dans l'étude des incertitudes d'un modèle, l'importance d'une variable d'entrée (ou d'un paramètre) combine sa variabilité naturelle (donc son incertitude propre, habituellement représentée par une loi de distribution probabiliste) et la sensibilité du modèle à cette variable.

FIGURES

**Fig2** : à gauche : Champ de perméabilité hétérogène, en coupe verticale ; à droite : Saturation en CO<sub>2</sub> 10 ans après l'injection, modèle 3D (haut : cas homogène, bas : cas hétérogène).



**Fig3** : Incertitude sur la variable de sortie  $r_0$  (rayon du panache) pour une variation homogène et pour une variation hétérogène de la perméabilité, basées sur la même distribution de probabilité en entrée.

## UN NOUVEAU LABORATOIRE « gaz-eau-roche »

Développé depuis mi-2016, le nouveau laboratoire de la Direction des risques du sol et du sous-sol regroupe, sur un espace de 80 m<sup>2</sup> des équipements destinés à l'étude d'émissions de gaz et de transferts de fluides au sous-sol liés en particulier aux stockages souterrains. De nouvelles perspectives s'ouvrent dans ce domaine dans le contexte de la transition énergétique. Dans les années 2000, différentes recherches ont été menées pour caractériser les capacités de stockage du CO<sub>2</sub> dans les veines de charbon. Désormais, des études sont réalisées sur des roches autres que le charbon et des essais sont menés dans le domaine de la géochimie, intégrant gaz et eaux en milieu souterrain. Cela peut concerner des essais de dégradation d'une roche argileuse de couverture d'un site de stockage géologique de CO<sub>2</sub> ou bien l'étude des mécanismes de production de gaz en milieu souterrain. En effet, les premiers essais réalisés en 2016 dans ce nouveau laboratoire portent sur la dégradation géochimique des ouvrages miniers ennoyés.

### Un nouvel espace de 80 m<sup>2</sup>

Le laboratoire comprend 6 postes de travail, tous alimentés avec plusieurs gaz (par ex. : CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, Ar, N<sub>2</sub>, He) et dotés des équipements de sécurité appropriés. Deux postes de travail sont dédiés à la caractérisation de l'adsorption des gaz sur les surfaces solides. Ils sont équipés de balances à suspension magnétique d'une précision de

0,01 mg, fonctionnant jusqu'à une pression de 150 bar et une température de 200 °C. Un autre poste de travail est dédié aux interactions eau-gaz-roche dans les conditions de pression et de température régnant dans les mines profondes ou les réservoirs pétroliers. Il est équipé d'enceintes métalliques autoclaves pouvant être mises en service en parallèle, grâce à un programmeur dédié. Citons également le poste dédié au développement des dispositifs de mesure des flux de gaz à l'interface sol-atmosphère, qui est équipé de deux bancs d'essai remplis de sable calibré, à la base desquels un gaz peut être injecté avec un

débit prédéfini. Par ailleurs, le laboratoire est équipé d'un chromatographe en phase gazeuse pour l'analyse des atmosphères gazeuses – cette analyse pouvant être complétée par l'étude des isotopes du carbone.

Le laboratoire a été conçu comme un espace flexible, pouvant s'adapter aux nouvelles thématiques de recherche et aux besoins des industriels. Ainsi, en 2017, un nouveau projet de recherche ROSTOCK'H, dédié à l'étude du stockage souterrain d'hydrogène, sera l'occasion d'y concevoir des outils de surveillance *in situ* adaptés à ce gaz.

### 📖 RÉFÉRENCES

*Impact of Supercritical CO<sub>2</sub>/Water Interaction on the Caprock Nanoporous Structure* Procedia Earth and Planetary Science, Volume 7, 2013, Pages 738-741

David Ricardo Rhenals Garrido, Stéphane Lafortune, Hanène Souli, Philippe Dubujet

*Selection of coals of different maturities for CO<sub>2</sub> Storage by modelling of CH<sub>4</sub> and CO<sub>2</sub> adsorption isotherms* International Journal of Coal Geology, Volume 87, Issue 2, 1 August 2011, Pages 80-86 Ch. Garnier, G. Finqueneisel, T. Zimny, Z. Pokryszka, S. Lafortune, P.D.C. Défossez, E.C. Gaucher

*Effect of pressure and temperature on diffusion of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> into coal from the Lorraine basin (France)* International Journal of Coal Geology, Volume 81, Issue 4, 1 April 2010, Pages 373-380 Delphine Charrière, Zbigniew Pokryszka, Philippe Behra

*Assessing CO<sub>2</sub> Adsorption Capacities onto Shales Through Gravimetric Experiments: A First Step in the Feasibility Study of Coupling "Fracking" with Carbon Storage* Energy Procedia, Volume 63, 2014, Pages 5933-5937 Stéphane Lafortune, Francis Adeline, David Ricardo Rhenals Garrido, Zbigniew Pokryszka

### 📊 FIGURES



**Fig1 :**  
Préparation d'un essai pour établir l'isotherme d'adsorption d'un gaz sur une roche par méthode gravimétrique.

# ÉVALUATION DES DOMMAGES LIÉS AUX MOUVEMENTS DE TERRAIN

## sur les structures en maçonnerie

### RÉFÉRENCES

Thèse de Huu Luyen NGHIEM:  
*Évaluation des dommages induits par des mouvements de terrain sur des structures en maçonnerie à l'aide de la modélisation physique*  
- Thèse de doctorat. Université de Grenoble, 24/03/2015  
NGHIEM, Luyen; AL HEIB, Marwan; EMERIAULT, Fabrice  
- *Method based on digital image correlation for damage assessment in masonry structures* - Engineering Structures, 2015, 86: p. 1-15

Chaque année, les risques de mouvements de terrain associés aux phénomènes de retrait-gonflement des argiles, aux affaissements et effondrements de cavités souterraines d'origine anthropique ou de dissolution naturelle, et aux glissements de pente, frappent de nombreux territoires et gestionnaires d'infrastructures, endommageant des réseaux de transports ou de communications, des ouvrages d'art ou collectifs (bâtiments) ainsi que de nombreuses habitations individuelles. Source d'un préjudice considérable, ces risques constituent, après les inondations, le second poste d'indemnisation au titre des catastrophes naturelles. Dans la catégorie des maisons individuelles, les

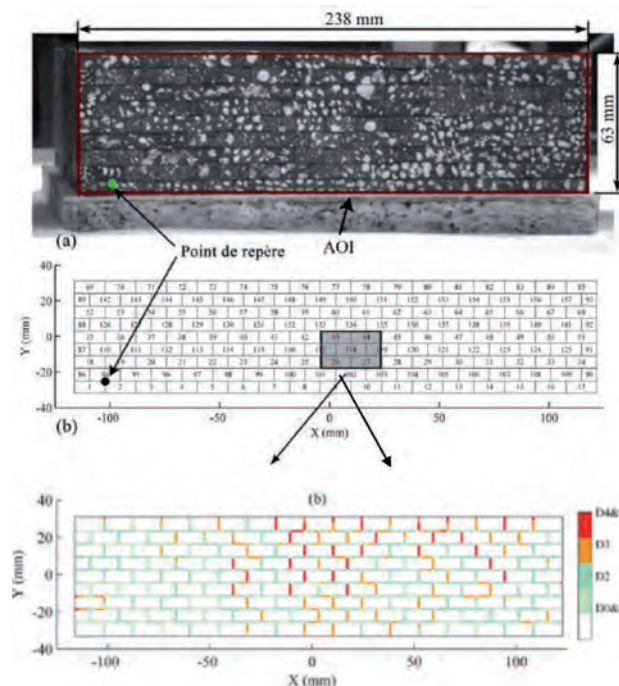
structures en maçonnerie représentent une proportion importante des ouvrages impactés car leur composition les rend particulièrement vulnérables aux mouvements de terrain.

### Améliorer la connaissance de l'interaction sol-structure

Pour évaluer les effets induits par ces mouvements de sol sur ce type de structure, plusieurs méthodes sont utilisées de manière combinée pour permettre d'aller plus loin dans l'évaluation des risques: la modélisation numérique, l'essai in situ à échelle réelle et la modélisation physique à échelle réduite. C'est

### FIGURES

**Fig1** Simulateur de mouvements de terrain et zoom sur la partie pilotage des mouvements



**Fig2** Vue de l'assemblage des blocs de maçonnerie et du traitement pour identification de la distribution des fissures dans le mur

cette dernière option sur laquelle l'INERIS a mis l'accent ces dernières années en développant une plateforme d'essais capable de fonctionner à des échelles de 1/10<sup>e</sup> à 1/40<sup>e</sup>. Cette plateforme permet de simuler physiquement différents types de mouvements de terrain et leurs impacts sur des maquettes de structure d'habitation.

Un travail de thèse a contribué à l'amélioration de la connaissance sur l'interaction sol-structure en développant notamment des méthodes d'évaluation des dommages. Les travaux ont été menés en s'appuyant sur le simulateur de mouvements de terrain sous gravité terrestre (1 g) qui se présente sous la forme d'une cuve rectangulaire de 3 m x 2 m de côté et de 2 m de hauteur utile, avec une partie inférieure dédiée à la génération des mouvements (**Fig1**).

Le terrain utilisé est un sable de Fontainebleau qui présente les propriétés adéquates pour ce type d'essais (cohésion faible). La fondation de la structure est produite à l'aide d'un moulage à base de silicone liquide. Les murs en maçonnerie sont, quant à eux, constitués d'un assemblage de petits blocs en bois (**Fig2**).

Pour mesurer les champs de déplacement du sol et de la structure, une technique de corrélation d'images numériques (DIC) est utilisée. Elle permet de s'affranchir des limites imposées par les méthodes conventionnelles basées sur les indicateurs de dommages de type abaques. Un nouvel outil a ainsi été développé, basé sur le modèle d'interaction sol-structure de Winkler qui permet d'identifier les modes de rupture dans la structure. Pour y parvenir, le problème est résolu par une méthode inverse basée sur les efforts internes.

Le modèle physique développé a par ailleurs été amélioré pour identifier et visualiser la position et l'écartement des fissures dans la maçonnerie. Le principe général réside dans l'utilisation d'un système d'éléments distincts pour calculer les mouvements des blocs. Par ce moyen, l'identification et la quantification des positions et des amplitudes de fissures deviennent aisées. Ce système permet d'assurer une reproduction réaliste des fissurations (**Fig2**). Sur cette base, un nouvel indicateur de dommages corrélé à la longueur, l'épaisseur et le chemin

de fissuration a pu être proposé. La méthode tient également compte de l'incertitude des mesures déterminée par un calcul d'erreurs sur les déplacements basés sur la méthode de Monte-Carlo.

L'avantage des modèles expérimentaux à échelle réduite est de pouvoir réaliser de nombreux essais pour un coût maîtrisé par rapport à ceux menés à échelle réelle. Plusieurs configurations ont donc pu être étudiées autour des paramètres principaux suivants :

- La présence ou l'absence d'ouverture (fenêtres) dans les murs, ainsi que leur nombre.
- La présence ou non de murs de renfort internes à l'habitation.
- La position relative de l'habitation par rapport à celle du mouvement de terrain (centré, en façade latérale ou sur un angle).
- L'amplitude du mouvement de terrain.

Les structures ont été sollicitées jusqu'à des niveaux d'endommagement élevés (**Fig3**) afin de mettre à l'épreuve les outils développés.

Les méthodes et outils développés ont été appliqués à ces différents cas de figure et ont permis une évaluation du niveau des dommages basée sur un indicateur qui a pu être simplifié (longueur de fissures). Celui-ci

## TRANSLATION

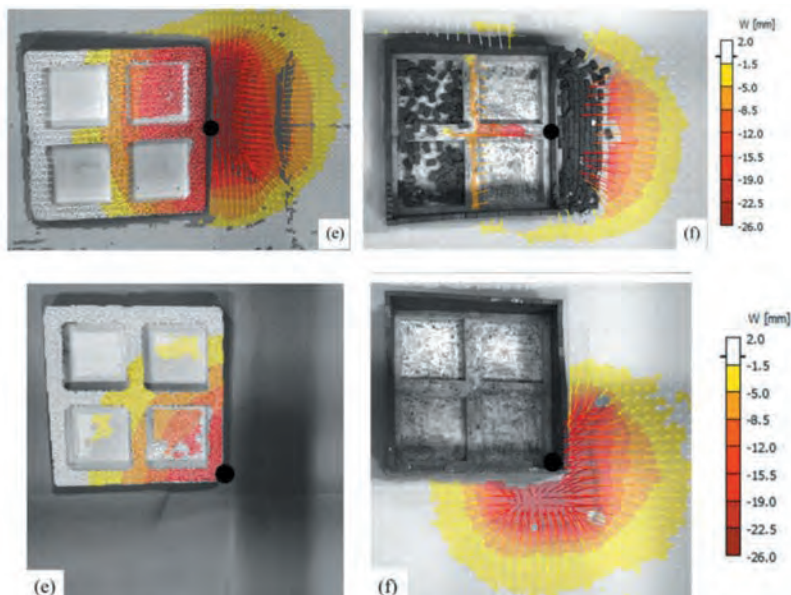
This research concerns the development of tools and methods to improve the quantification of the damage induced by ground movements on masonry residential structures. It is based on the use of a simulator for ground movement under natural gravity (1g), developed by the research team. The works include the development of an image analysis method to characterize large deformation, cracks, location, length and aperture. An algorithm calculates a level of damage calibrated with classifications based on visual assessments. The methodology has been applied to several scenarios in order to ensure its efficacy and reproducibility at low scale.

s'est avéré pertinent en comparaison aux méthodes plus conventionnelles.

Pour être tout à fait opérationnel, ce nouveau mode d'évaluation des dommages reste désormais à tester sur des ouvrages en maçonnerie à échelle réelle.

## FIGURES

**Fig3** Vue de dessus de l'état de la structure soumise à 2 amplitudes de mouvement en façade et sur un angle



# SURVEILLANCE GLOBALE ET FUSION DE DONNÉES INDUSTRIELLES ET ENVIRONNEMENTALES pour la sécurité et la transparence des mines du futur

## RÉFÉRENCES

Tonnellier A., Bouffier C., Bigarré P., Nyström A., Österberg A., Fjellström P., 2015: "Stress monitoring versus microseismic ruptures in an active deep mine", *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 17, EGU2015-13064-1, Vienna, Austria

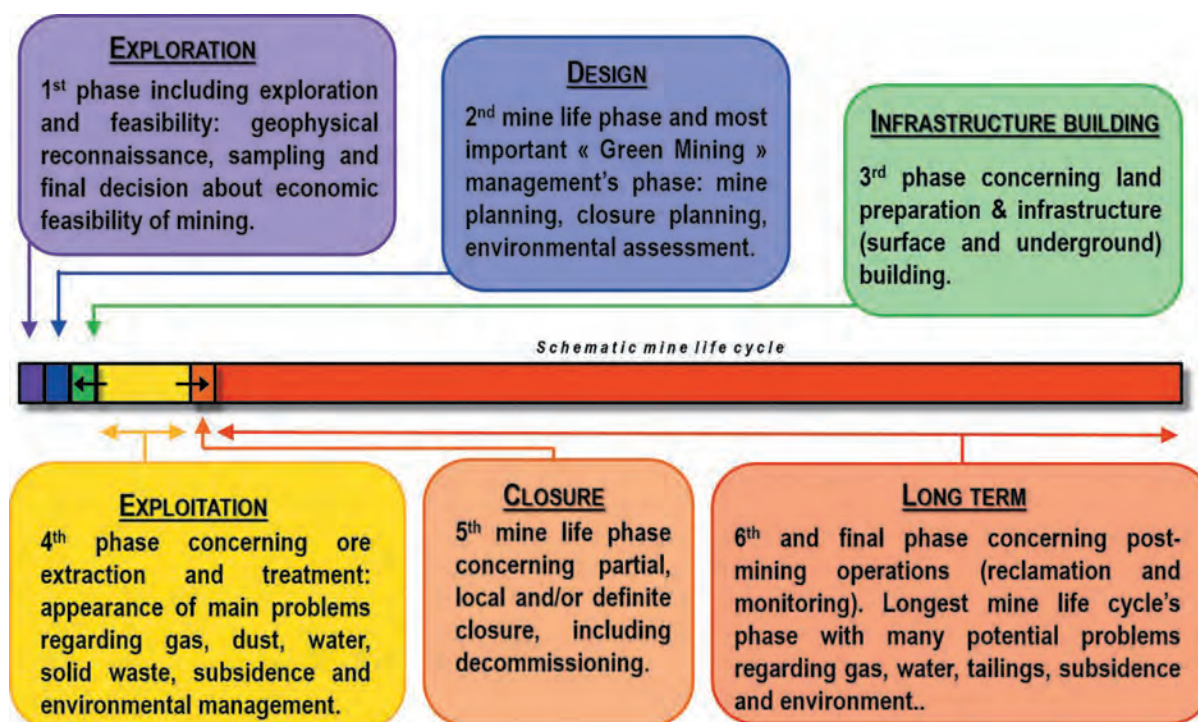
Tonnellier A., Bouffier C., Renaud V., Bigarré P., Mozaffari S., Nyström A., Fjellström P., 2016 : "Integrating microseismic and 3D stress monitoring with numerical modeling to improve ground hazard assessment", *GroundSupport2016*, Lulea, Sweden

Le projet européen I2MINE (*Innovative technologies and concepts for the intelligent deep mine of the future*) auquel participe l'INERIS a pour objectif de développer un ensemble de méthodes et de technologies destinées aux exploitations minières du futur. Celles-ci doivent viser une réduction exemplaire de l'empreinte environnementale des mines et s'inscrire dans un objectif vertueux qualifié de « mine transparente », dans l'acception large de cette expression. L'industrie minière allant en s'approfondissant, celle-ci doit également travailler à garantir la sécurité des personnes par une meilleure prévention des risques industriels liés aux grandes profondeurs.

## De l'exploration à l'abandon du site : quels impacts sur l'environnement ?

Dans le cadre de ce projet l'INERIS a ainsi mené un inventaire exhaustif des impacts avérés et potentiels d'un site minier sur son environnement. Cette étude, réalisée à partir de données issues de projets miniers en France et en Europe, a couvert toutes les phases du cycle de vie, depuis la phase d'exploration jusqu'à celle de fermeture et de l'abandon du site (Fig1). Les techniques de mitigation ont été aussi analysées. Elle révèle que c'est dès la phase exploratoire qu'il convient de définir et mettre en place

## FIGURES



**Fig1**  
Techniques de Green mining (A) et impacts de l'activité minière (B) dans le cycle de vie d'une mine (<http://green-mining.ineris.fr/>)

des bonnes pratiques pour limiter au maximum les impacts d'une opération minière dans sa globalité, notamment dans le cas d'exploitations minières profondes.

Des travaux ont aussi été menés pour évaluer les conditions de mise en œuvre et d'efficacité de la méthode dite méthode des chambres et piliers remblayés (Fig2). Ils montrent que dans les cas où le taux de défrèvement est élevé, dans des exploitations profondes, cette méthode peut jouer un rôle essentiel dans la stabilisation du massif rocheux et la réduction de l'affaissement en surface. Les conditions favorables sont identifiées pour que cet effet soit significatif notamment à long terme, et pour permettre l'exploitation totale des piliers tout en limitant l'impact en surface (les résidus stériles servant de remblais au fond).

## Une approche de surveillance globale

Enfin, le dernier volet des travaux menés par l'INERIS a porté sur le développement et la mise en œuvre de méthodologies et outils de



## TRANSLATION

The European I2MINE project ("Innovative technologies and concepts for the smart deep mine of the future") involving INERIS as a major partner, aims to develop innovative methods and technologies for the mine of the future. These target exemplary reduction of the environmental impact of mines in a virtuous goal of "Transparent Mine", defined in a broad sense. The mining industry going deeper and deeper, it must also develop new safety strategies for a better risk prevention.

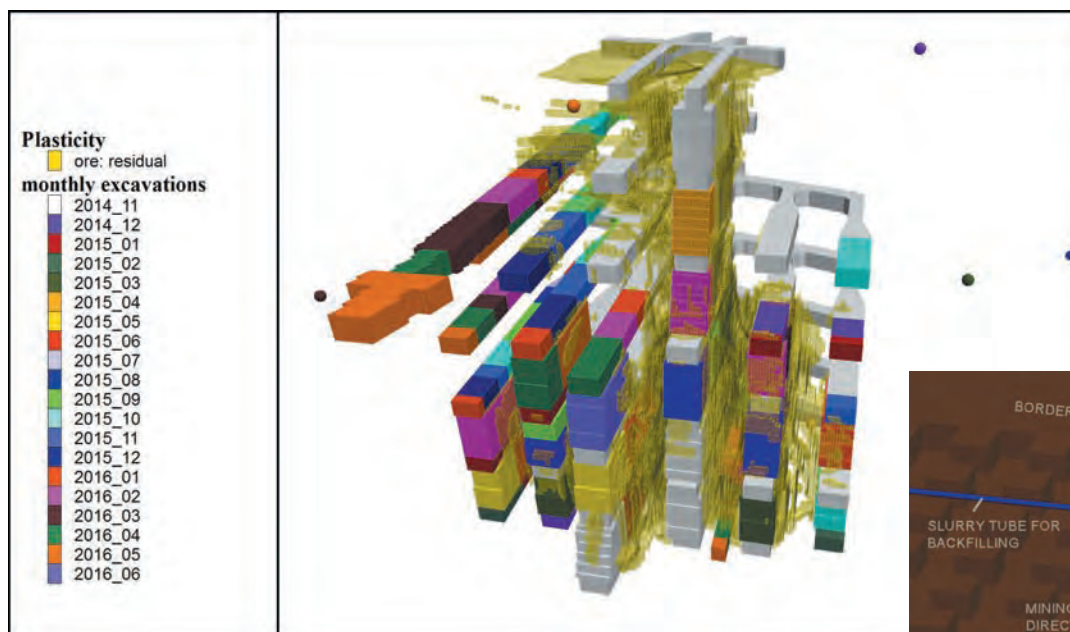
The research carried out by INERIS focuses on three main topics: comprehensive analysis of all prominent impacts of a mining project, implementation and efficiency assessment of the mining method known as "backfilled rooms and pillars" and prevention of geotechnical risks including induced seismicity hazard. The results provide new knowledge and wider information on proved and potential social and environmental impacts of a mining site on territory, as well as on georisks management during mine closure and beyond its abandonment.

prévention du risque sismique en chantier. L'approche innovante développée et mise en œuvre sur un pilote expérimental est celle de la fusion de données, croisant les données d'exploitation de la mine, courant géométrie spatio-temporelle des excavations, géologie locale, méthode de creusement, etc., avec les données géotechniques et microsismiques de surveillance en flux continu autour des

chantiers et les modèles numériques prédictifs des champs de contraintes et zones en rupture. Avec cette approche de surveillance globale « source-aléa-enjeux » (exploitation minière, sismicité, dégradation des ouvrages miniers), il sera possible de quantifier plus efficacement différents scénarios d'exploitation ainsi que la détection de signes précurseurs à des zones à risque fort de coups de terrains.



## FIGURES



**Fig2** Remblayage d'une exploitation par la méthode des chambres et piliers



**Fig3** Évaluation par modélisation 3D et monitoring géophysique des risques géotechniques en fonction de l'avancement des travaux miniers



## SISMICITÉ POST-MINIÈRE dans l'ancien bassin houiller de Gardanne (Provence)

### RÉFÉRENCES

Matrullo, E., Contrucci, I., Dominique, P., Bennani, M., Aochi, H., Kinsher, J., Bernard, P., and Bigarré, P., 2015, *Analysis and Interpretation of Induced Micro-seismicity by Flooding of the Gardanne Coal Basin (Provence - Southern France)*, 77<sup>th</sup> EAGE Conference & Exhibition 2015: Madrid, Spain.

Kinscher, J., Contrucci, I., Dominique, P., Matrullo, E., Bigarre, P. (2016) *Evidence for triggered seismicity in a flooded, abandoned coal mine (Gardanne, Provence, France)*. 9<sup>th</sup> international symposium on rockbursts and seismicity in mine. Nov 15-17 2017, Santiago, Chile. Abstract.

L'exploitation minière dans le bassin houiller de Provence a laissé de nombreux vides souterrains qui causent encore aujourd'hui des réajustements souterrains importants et qui génèrent un risque résiduel dans des régions à forte densité de population. Une majeure partie de ces vides est aujourd'hui ennoyée et peut ainsi générer une sismicité ressentie par les habitants. Pour limiter les risques liés à des mouvements en surface possibles à l'avenir, une surveillance microsismique en quasi-temps réel a été mise en œuvre dans plusieurs zones classées comme sensibles (**Fig1**) depuis la cessation des activités minières. Ainsi, l'INERIS a installé, à la demande des Charbonnages de France, un dispositif de surveillance microsismique et d'alerte dans le bassin houiller de Gardanne (**Fig1**). Ce dispositif est géré depuis le Centre national de surveillance des risques du sol et du sous-sol (CENARIS) de

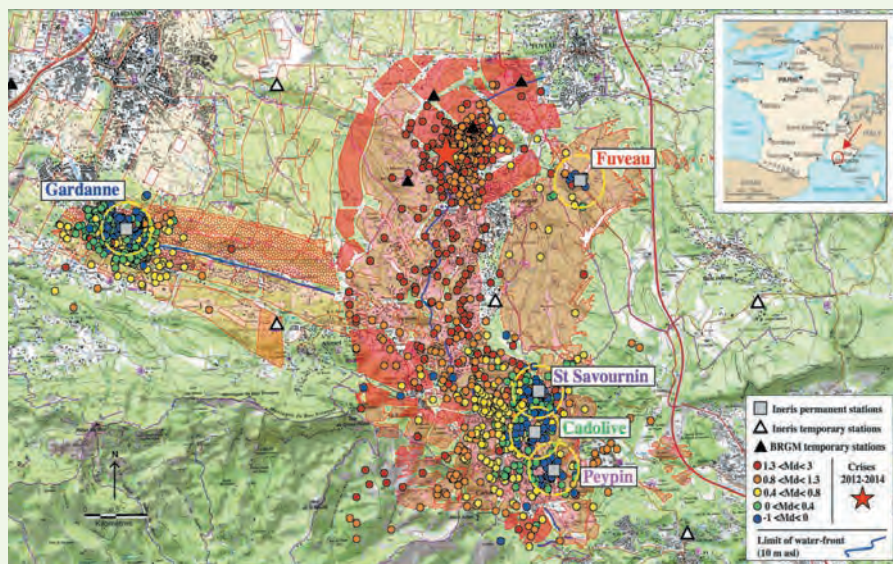
l'INERIS – pour le compte du Département de prévention et sécurité minière du BRGM. Depuis 2008, l'érosion naturelle des ouvrages miniers anciens, dimensionnés selon les règles de l'art de l'époque, et la montée du niveau des eaux souterraines induisent des réajustements à l'origine d'une activité microsismique significative. Plus de 2 000 événements de magnitude locale supérieure à 0 ont été détectés depuis le début de la surveillance (**Fig1**), et, pour les plus forts d'entre eux, ressentis en surface. Localisées principalement au niveau du front d'ennoyage, deux crises microsismiques importantes se sont produites en 2012 et 2014 avec des événements de magnitude de l'ordre de 2,5.

Les travaux de recherche menés en 2014 et 2015 ont contribué à mieux comprendre l'origine de ces crises sismiques sporadiques. L'étude a permis d'affiner la caractérisation des événements montrant qu'une partie de cette sismicité, celle située au nord-est du bassin (**Fig1**), serait liée à la remobilisation d'un réseau de failles préexistantes. Une telle hypothèse est basée sur la migration des eaux depuis les travaux miniers. En effet, les travaux miniers constituent un aquifère « anthropique » qui peut atteindre la saturation lors des périodes d'intensification des pluies et ainsi favoriser la migration des eaux en profondeur.

Ces modifications du champ de pression interstitielle se conjuguent à des champs complexes de décompression et redistribution des contraintes effectives à la fois dans le haut toit et le sous-sol profond des couches exploitées. Les résultats de cette étude suggèrent d'étendre l'analyse à d'autres zones du bassin minier, situées plus au sud, à proximité des failles de la Diote ou de Meyreuil. L'objectif sera de préciser les interactions possibles entre des grandes structures potentiellement sismiques et le système hydrologique composé d'anciens travaux miniers et de mieux caractériser à long terme l'aléa sismique sur ce territoire.

### FIGURES

**Fig1** Sismicité post-minièrre enregistrée dans l'ancien bassin houiller de Gardanne sur la période 2008 - 2014 (Matrullo *et al.* 2015)





# IMPACT DE L'AGRICULTURE sur la qualité de l'air



## TRANSLATION

Like all activity sectors, agriculture is responsible for emissions of many pollutants and particularly gaseous precursors of particulate matter, as ammonia. The French official emission inventory indicates that more than 97% (CITEPA, 2015) of anthropogenic ammonia emissions are due to agriculture (mainly due to breeding and nitrogen fertilizers applications). Ammonia combined with nitric acid is the source of secondary particles formation into the atmosphere contributing to the total particle load. Ammonia, under favorable weather conditions, reacts with nitrogen oxides and forms ammonium nitrate. During pollution episodes, this compound can represent over 50% of the PM10 mass. Anticyclonic situations conditions in late winter favor the accumulation of pollutants in the lowest layers of the atmosphere and the formation of ammonium nitrate. Scenario simulations using air quality models show that ammonia emission reductions lead to a significant reduction in ammonium nitrate concentrations, this decrease is even more important if other measures to reduce nitrogen oxides emissions are taken. Long-term policies to weaken ammonia emissions should reduce the number of exceedances of the PM10 and PM2.5 limit values. Other components like soil particles are also issued from agriculture, they are generally larger than 2.5 µm in diameter. Anyway, agriculture can play an important role in air quality management.

Comme tous les secteurs d'activité anthropique, le secteur agricole est responsable de l'émission de polluants et précurseurs de polluants atmosphériques, notamment particulaires. L'agriculture se distingue par de très fortes émissions d'ammoniac, le recensement national des émissions indique que plus de 97 % [1] des émissions anthropiques de ce composé sont dues à l'agriculture (élevage et épandages d'engrais azotés) en France. L'ammoniac combiné à l'acide nitrique est à la source de la formation de particules secondaires dans l'atmosphère contribuant ainsi à la charge totale en particules. En effet, dans des conditions météorologiques favorables, l'ammoniac réagit avec les oxydes d'azote pour former le nitrate d'ammonium. À la fin de l'hiver et au début du printemps, la France et une bonne partie de l'Europe font régulièrement face à des épisodes de particules d'ampleur importante qui trouvent leurs origines dans un cumul d'émissions auquel contribuent les activités agricoles du fait de la période propice aux activités d'épandage d'engrais. Par ailleurs, les situations météorologiques facilitent l'évaporation de l'ammoniac et les mécanismes chimiques de formation de nitrate d'ammonium. En situation d'épisode, le nitrate d'ammonium peut représenter plus de 50 % de la masse de PM10.

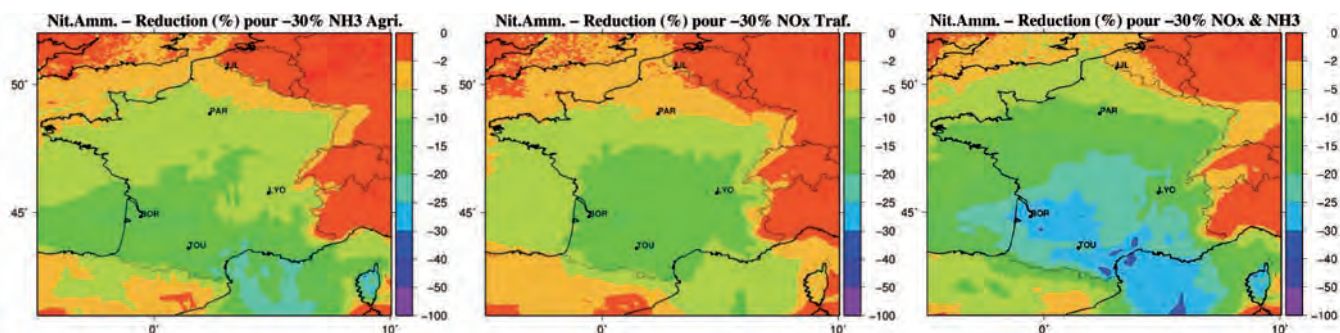
## Simulations

L'utilisation de modèles de chimie transport permet de simuler des scénarios permettant d'apprécier le poids d'un secteur d'activité sur les concentrations en polluants. Pour analyser l'épisode de particules de mars 2014, l'INERIS avait utilisé le modèle de chimie transport CHIMERE [2] en effectuant quatre simulations :

- Une simulation de référence intégrant l'ensemble des émissions.
- Une simulation avec une réduction de 30 % des émissions d'ammoniac du secteur agricole en France.
- Une simulation avec une réduction de 30 % des émissions de NO<sub>x</sub> du trafic routier en France.



## FIGURES



**Fig1** : Impact moyen en % de scénarios de réduction sur les concentrations en nitrate d'ammonium durant l'épisode de mars 2014 (du 7 au 17 mars 2014) : à gauche : réduction de 30 % des émissions d'ammoniac agricole ; au milieu : réduction de 30 % des émissions d'oxydes d'azote du trafic routier ; à droite : scénarios précédents combinés.



## RÉFÉRENCES

[1] CITEPA (2015) *Inventaire des émissions de polluants atmosphériques et de gaz à effet de serre en France – Format SECTEN*.

[2] Menut L, B. Bessagnet, D. Khvorostyanov, et al. (2013) CHIMERE 2013: a model for regional atmospheric composition modelling, *Geoscientific Model Development*, 6, 981-1028, doi: 10.5194/gmd-6-981-2013.

[3] Bessagnet, B., Beauchamp, M., Guerreiro, C., et al. (2014) *Can further mitigation of ammonia emissions reduce exceedances of particulate matter air quality standards?*, *Environmental Science & Policy*, Volume 44, 149-163.

<sup>1</sup> Le protocole de Göteborg est un protocole « multi-polluants/multi-effets », validé à Göteborg le 1<sup>er</sup> décembre 1999.

<sup>2</sup> COVNM: composés organiques volatils non méthaniques

- Une simulation combinant les deux scénarios précédents.

La Figure 1 (**Fig1**) montre un gradient nord-est/sud-ouest dans l'intensité de la réduction. Le flux étant généralement orienté au nord-est, l'impact des pays voisins comme la Belgique, les Pays-Bas et l'Allemagne atténue les réductions de concentrations en nitrate d'ammonium proches des frontières du nord-est. Sur la partie centrale de la France, la baisse atteint 10 à 15 %. Malgré les non-linéarités, il existe une certaine additivité des impacts lorsque les scénarios sont combinés, l'impact est maximal dans le sud-ouest de la France avec une réduction attendue jusqu'à 30 % sur les concentrations en nitrate d'ammonium, ces dernières étant néanmoins plus faibles au sud. Ces simulations montrent que des réductions d'émissions d'ammoniac aboutissent à une baisse sensible des concentrations de nitrate d'ammonium, cette baisse est d'autant plus importante si elle s'accompagne d'autres mesures visant à réduire les émissions des oxydes d'azote.

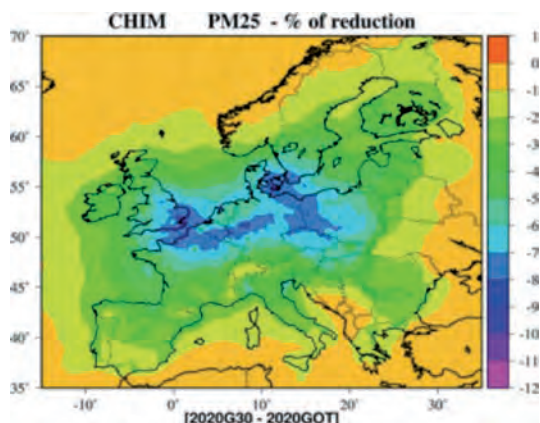
Le protocole de Göteborg<sup>1</sup>, dans sa version révisée en 2012, impose aux pays ayant ratifié la Convention sur le transport des polluants à longue distance de la Commission économique pour l'Europe des Nations unies, pour 2020, des plafonds annuels d'émissions sur les NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, COVNM<sup>2</sup>, PM<sub>2.5</sub> et NH<sub>3</sub>. Les réductions imposées pour l'ammoniac par le protocole sont faibles, de l'ordre de 6 % en moyenne sur l'Europe communautaire, et toujours plus faibles que celles

imposées aux autres composés. Dans ce cadre réglementaire, l'étude de Bessagnet *et al.* (2014) [3] étudie à l'aide de trois modèles de qualité de l'air très utilisés en Europe dans un contexte réglementaire (dont CHIMERE) pour évaluer les impacts attendus sur différents scénarios de réduction d'ammoniac plus ambitieux (**Fig2**). Des politiques de long terme visant à réduire l'ensemble des émissions d'ammoniac permettront de réduire le nombre de dépassements des valeurs réglementaires des PM<sub>10</sub> et PM<sub>2.5</sub>. Une réduction supplémentaire de 30 % d'ammoniac par rapport au protocole de Göteborg permettrait de diminuer de 23 à 40 le nombre de stations en dépassements. Cette réduction du nombre de stations est certainement sous-estimée du fait d'une sous-estimation systématique des concentrations de PM lors d'épisodes. La réduction attendue des concentrations de PM2.5 en valeur annuelle peut atteindre 8 à 10 % selon les modèles dans certaines régions. Par ailleurs, du fait de non-linéarités dans les transformations chimiques, les potentiels de baisses attendues seront d'autant plus forts que les niveaux de réductions sur l'ammoniac seront plus ambitieux.

## Collaboration

Laurent Menut (Laboratoire de météorologie dynamique, École polytechnique, IPSL Research University, École normale supérieure, Université Paris-Saclay, Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, route de Saclay, 91128 Palaiseau, France).

## FIGURES



**Fig2** Pourcentage de réduction des concentrations annuelle de PM2.5 du scénario 2020G30 (30 % de réduction supplémentaire de NH3 par rapport aux réductions attendue par le protocole de Göteborg) par rapport au scénario 2020GOT (protocole de Göteborg seul), calculée par le modèle CHIMERE

# IDENTIFICATION DES SOURCES DES PARTICULES DANS L'ENVIRONNEMENT: réactivité et traceurs

L'aérosol organique constitue une part majeure des particules (PM) dans l'air ambiant. L'INERIS a réalisé une meilleure caractérisation de l'aérosol organique atmosphérique au niveau moléculaire, en lien avec des composés polyaromatiques identifiés récemment comme précurseurs des aérosols organiques secondaires (AOS). Deux approches complémentaires ont été mises en œuvre: une étude de terrain et des expériences en chambre de simulation atmosphérique.

L'étude de terrain, conduite à Grenoble (38) et sans équivalent au niveau international, a permis de documenter les niveaux de concentration, la variabilité saisonnière et la répartition gaz/particule des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP), oxy-HAP (OHAP) et nitro-HAP (NHAP), sur une année. Ce travail a aussi permis d'appréhender les sources primaires et secondaires des OHAP et NHAP et de proposer des molécules marqueurs de ces processus de formation. Une première étude des sources de PM par modèle source-récepteur (*positive matrix factorization*, PMF) à partir de la base de données de caractérisation chimique très étendue (185 espèces quantifiées) à Grenoble a pu être effectuée. Les premiers résultats indiquent une solution

à 10 facteurs correspondant à 10 sources ou mélanges de sources d'aérosol dont une source AOS HAP caractérisée à l'aide de molécules marqueurs identifiées lors de ces travaux.

Les expériences conduites en chambre de simulation atmosphérique ont eu pour but d'étudier la formation d'AOS, suite à la photooxydation du naphthalène et du 2-méthyl-naphthalène. L'identification de la formation de produits organosoufrés de type organosulfates et

sulfonates, à partir de la photooxydation de HAP gazeux, a été mise en évidence pour la première fois. Cela a permis de proposer ces composés comme des marqueurs de formation d'AOS à partir des HAP. Une caractérisation chimique poussée de l'AOS a mis en évidence sa dépendance aux différentes conditions expérimentales (type de particules d'ensemencement, acidité et humidité relative) et a conduit à la proposition de nouvelles voies réactionnelles.

## REFFÉRENCES

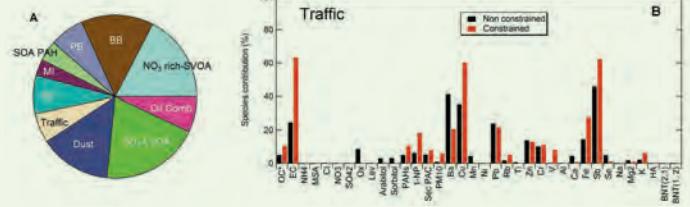
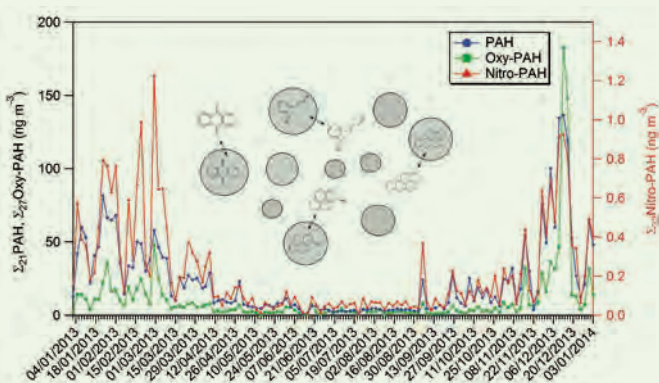
Tomaz, S.: *Étude des composés polyaromatiques dans l'atmosphère: caractérisation moléculaire et processus réactionnels en lien avec l'aérosol organique*, Université Bordeaux, <http://www.theses.fr/2015BORD0416>, 2015.

Tomaz, S., Shahpoury, P., Jaffrezo, J.-L., Lammel, G., Perraudin, E., Villenave, E. and Albinet, A.: *One-year study of polycyclic aromatic compounds at an urban site in Grenoble (France): Seasonal variations, gas/particle partitioning and cancer risk estimation*, *Science of The Total Environment*, 565, 1071-1083, doi: 10.1016/j.scitotenv.2016.05.137, 2016.

Srivastava, D., Masson, F., Ngo, S., Waked, A., Jaffrezo, J.-L., Golly, B., Francony, J.-C., Besombes, J.-L., Alleman, L.Y., Chabanis, C., Moussu, E., Bret, C., Tomaz, S., Perraudin, E., Villenave, E., Bocquet, E., Aujay, R., Nuttens, N., Guillaumet, N., Favez, O. and Albinet, A.: *PM source apportionment by Positive Matrix Factorization (PMF) using an extended aerosol chemical characterization including specific molecular markers*, Milan (Italy), 2015.

## FIGURES

**Fig1** : Evolution annuelle des concentrations atmosphériques de  $\Sigma_{21}$ HAP,  $\Sigma_{27}$ Oxy-HAP,  $\Sigma_{32}$ Nitro-HAP observée en 2013 sur le site de fond urbain de Grenoble – Les Frênes.



**Fig2** : A. Évaluation de la contribution annuelle des 10 sources de particules identifiées à Grenoble – Les Frênes (résultat après contrainte sur EC). BB: biomass burning, SVOA: semi volatile organic aerosol, Oil comb.: oil combustion, LVOA: low volatile organic aerosol, SS: sea salt, MI: metallurgic industry, SOA PAH: secondary organic aerosol from PAH, PB: primary biogenic. B. Profil du facteur d'émissions primaires par le trafic automobile avant (en noir) et après (en rouge) l'application d'une contrainte sur la contribution de EC au sein de ce facteur.

# SPATIALISATION DES INÉGALITÉS ENVIRONNEMENTALES dans une démarche de caractérisation de l'exposome

## RÉFÉRENCES

[1] Caudeville J., « Caractériser les inégalités environnementales » in Eloi Laurent (dir.), *Vers l'égalité des territoires - Dynamiques, mesures, politiques*, Rapport pour le ministère de l'Égalité des territoires et du Logement, 2013.

[2] Bonnard R. *Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle*. DRC-08-94882-16675B, 2010.

[3] Davezac H, Grandguillot G, Robin A, et al. *L'Eau potable en France 2005-2006*, ministère de la Santé, de la Jeunesse, des Sports et de la Vie associative, Paris 2008.

[4] Les modèles toxicocinétiques à fondement physiologique (appelés aussi PBPK pour *physiologically based pharmacokinetic*) permettent de décrire le cheminement de molécules dans l'organisme et ainsi simuler l'évolution des concentrations dans différents organes et fluides de l'organisme.

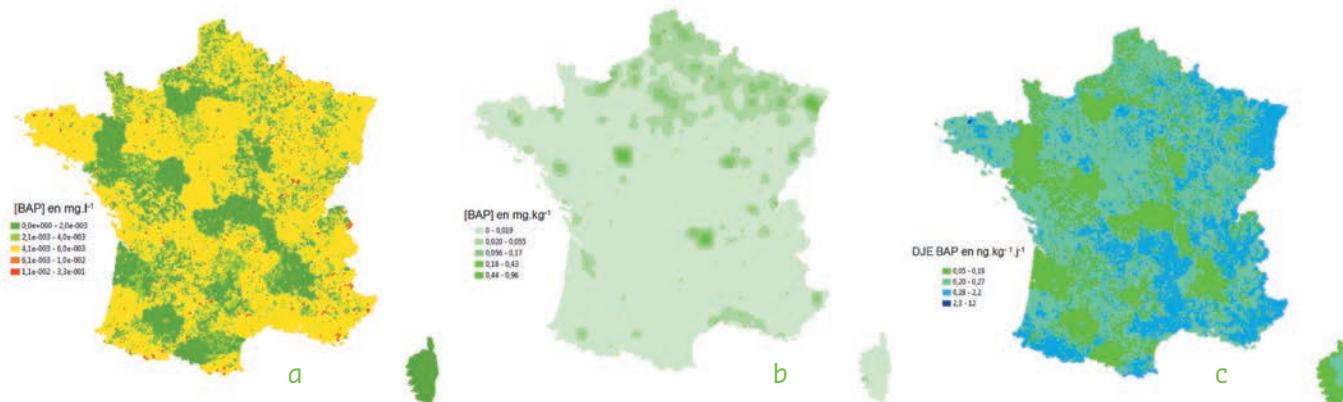
Le PNSE3 a introduit la notion d'« exposome » qui représente l'ensemble des expositions couvrant la vie entière (incluant la période prénatale) qui peuvent influencer la santé humaine, à savoir les expositions chimiques, physiques et biologiques, le contexte psycho-social et les régulations biologiques internes.

L'« exposome territorialisé » correspond à l'application du concept d'exposome à la caractérisation des inégalités environnementales, ce qui implique de développer des approches dynamiques et multidimensionnelles à l'aide de systèmes d'information et requiert l'adoption de méthodes transdisciplinaires pour l'analyse des données. La recherche s'est orientée ici vers l'identification de zones de surexposition [1] liées à trois hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP : Benzo[a]pyrene, BaP; Benzo[ghi]perylene, BghiP; Indéno[cd]pyrene, InD) sur le territoire français en retenant en première approche la voie par ingestion. Cette démarche nécessite la description de données d'entrées représentatives de la population et de la contamination des milieux sur les territoires étudiés.

## Méthodes

La démarche de caractérisation de l'exposition a été réalisée au sein de la plateforme PLAINE (Plateforme intégrée pour l'analyse des inégalités environnementales), destinée à évaluer et représenter les expositions au niveau territorial. L'outil de modélisation multimedia MODUL'ERS [2] développé par l'INERIS pour le calcul des doses d'exposition, des bases de données géo-référencées (environnementales et comportementales) et un système d'information géographique (SIG) ont ainsi été combinés pour obtenir des cartographies d'exposition des populations sur l'ensemble de la France métropolitaine à une échelle spatiale fine (maillage de 3 km de côté). Des méthodes de traitement ont été développées pour construire les variables d'intérêt au niveau de résolution défini. L'année 2010 correspond à l'année de référence pour laquelle le plus grand nombre de données dans les milieux (eau potable, sols, air extérieur) étaient disponibles. Des développements spécifiques ont, en particulier, concerné les données de concentrations dans l'eau et dans les sols.

## FIGURES



**Fig1** Cartographie pour le Benzo[a]pyrène (BaP) des concentrations environnementales dans a) l'eau (source : ministère chargé de la santé - ARS - SISE Eaux. Traitement : INERIS), b) les sols (source : © INRA, Unité INFOSOL, Orléans, 2015. Traitement : INERIS) et c) des doses d'exposition journalières moyenne

La base SISE'Eaux [3] a été retenue pour évaluer l'exposition par ingestion d'eau. Il s'agit de données recueillies par les Agences régionales de santé dans le cadre de leur mission de contrôle sanitaire des eaux d'alimentation destinées à l'eau potable. En France, le réseau de distribution est structuré en unités de distribution (UDI) qui acheminent du site de production au robinet une eau de qualité homogène (même origine). Ces concentrations sont spatialisées sur la grille de référence en associant aux communes les concentrations mesurées au niveau des UDI. Une méthode d'imputation multiple a été développée pour pallier les problèmes d'irrégularités temporelles d'échantillonnage et de données inférieures aux limites de détection. La concentration par commune est calculée comme la moyenne des concentrations pondérées par la population de chaque UDI desservant les communes (Fig1a).

Les concentrations dans les sols issues du réseau d'échantillonnage systématique RMQS (Réseau de mesure de la qualité des sols du Gis sol), piloté par l'unité Infosol de l'INRA d'Orléans, ont été utilisées pour l'évaluation de l'exposition par ingestion de sol. Dernièrement, les HAP ont été mesurés sur les 2 200 sites du réseau répartis uniformément sur le territoire français selon un quadrillage de 16 x 16 km. Les méthodes géostatistiques permettent l'interpolation spatiale des données sur le territoire considéré, et notamment l'estimation et la cartographie des niveaux de concentrations sur l'ensemble de la zone d'étude. Une analyse statistique des données de concentration de HAP dans le sol en fonction de la localisation des sites pollués aux HAP répertoriés dans BASOL a permis d'intégrer les gradients de concentrations relatifs aux distances par rapport à ces sites (Fig1b).

## Résultats et conclusion

Des techniques d'analyse spatiale sont développées dans les SIG pour traiter les bases de données d'entrée et les rendre pertinentes en vue des objectifs définis dans l'étude. Elles permettent de reconstruire des variables à partir de variables connues ou d'augmenter les résolutions de celles-ci (Fig1a et b). Les résultats de ces méthodes restent néanmoins dépendants des couvertures spatiales et temporelles, de la qualité des données et de la disponibilité de données harmonisées. La Fig1c



## TRANSLATION

Analyzing the relationship between the environment and health has become a major focus of public health efforts in France, as evidenced by the national action plans for health and the environment. These plans have identified the following two priorities:

- identify and manage geographic areas where hotspot exposures are a potential risk to human health; and
- reduce exposure inequalities.

The aim of this study is to build spatial exposure indicators using a spatial stochastic multimedia exposure model for detecting vulnerable populations and analyzing exposure determinants at a fine resolution and national scale. A multimedia exposure model was developed by INERIS to assess the transfer of substances from the environment to humans through inhalation and ingestion pathways. The PLAINE platform adds a spatial dimension by linking GIS (Geographic Information System) to the model. Tools are developed using modeling, spatial analysis and geostatistical methods to build and discretize interesting variables and indicators from different supports and resolutions on a 9-km<sup>2</sup> regular grid. We applied this model to the risk assessment of exposure to PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons) using national databases. The results will permit to estimate ingestion exposure pathway contributions based on exposure scenarios defined for two different referent groups (age, dietary properties, and the fraction of food produced locally).

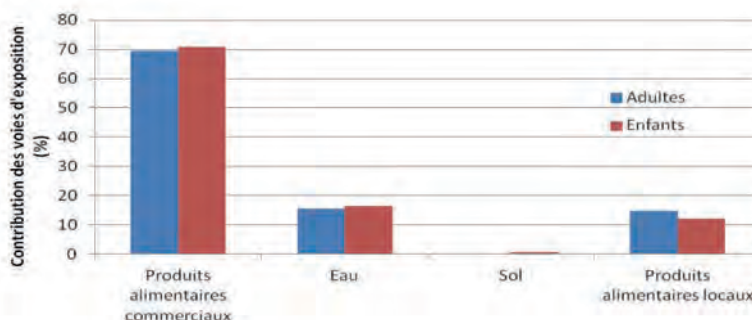
présente les doses d'exposition au Benzo[a]pyrène calculées pour les populations cibles. La contribution des voies d'exposition à la dose journalière d'exposition est présentée dans la Fig2. Les travaux sur les HAP se poursuivront en intégrant la voie par inhalation.

L'utilisation de données ne répondant pas initialement exactement aux objectifs de l'étude implique bien souvent d'adapter leur intégration et ainsi de formuler des hypothèses supplémentaires pouvant conférer des biais. L'incertitude peut être réduite et mieux caractérisée par le développement de techniques permettant l'intégration de variables secondaires et l'amélioration de la représentativité des données d'entrée.

Ces travaux répondent aux enjeux, au niveau national et en appui aux pouvoirs publics, d'identification et de hiérarchisation des zones de surexposition (PNSE3), en vue de prioriser les mesures de gestion à mettre en œuvre. Au regard de ces limites associées, les indicateurs agrégés d'exposition sont des scores relatifs permettant la priorisation de l'action. Des développements ultérieurs permettront le passage des cartes d'exposition externe aux doses internes à partir du couplage de ces approches avec un modèle PBPK [4]. De même les exercices réalisés sur les quatre éléments traces métalliques et sur les trois HAP seront déclinés prochainement sur d'autres polluants ou facteurs de risque.

## FIGURES

**Fig2** Contribution des différentes voies d'exposition d'ingestion à la dose journalière d'exposition pour le Benzo(a)pyrène sur l'ensemble de la France.



# ÉTUDE DE L'EFFICACITÉ ET DE LA PÉRENNITÉ DE LA PHYTOSTABILISATION AIDÉE couplée à une valorisation biomasse en bois-énergie

## TRANSLATION



The Phytosed 2 project (2011-2014) monitored aided phytostabilization on 1 ha of a metal-contaminated sediment landfill site and gained practical information on its deployment. The experimental design was based on the combined use of a basic mineral amendment and the tufted hair-grass and two willow cultivars. The perennial grass *Barcampsia cespitosa* was highly relevant as it quickly grew, quite totally covered the sediment, did not show toxicity signs and did not transfer trace elements in its aerial parts. In addition, it participated in the regression of *Fallopia japonica*, an invasive species present in the site. In our sediment conditions, the amendment did not give the short-term expected effects, i.e. decrease of the metal mobility in the sediment and of the foliar metal concentrations in the plants, although the pH increase was significant. In our study, the use of *Tordis* and *Inger* willow clones for biomass production seemed not relevant due to their Zn and Cd accumulator behaviour and low biomass yield. The on-going DEMOPHYTO (2014-2018) project will investigate the questions raised by Phytosed 2.

Dans le cadre de sa politique de développement durable, Voies navigables de France (VNF) privilégie les voies de valorisation des sédiments de dragage. À ce jour, il n'existe pas de filière industrielle pour le traitement et la valorisation des sédiments pollués capable d'absorber l'ensemble du gisement disponible. Le stockage en terrain de dépôt des sédiments pollués demeure la solution principale et économique.

L'utilisation de la phytostabilisation, aidée conjointement avec la valorisation de la biomasse produite sur certains sites de dépôt de sédiments pollués comme mode de gestion de ces sites, pourrait permettre le renforcement de la mise en sécurité du site car les voies de transfert seront contrôlées. Elle permettrait aussi de dégager une plus-value sociale et économique via le développement des filières biomasses non alimentaires.

Le projet PHYTOSED 2 (2011-2014), co-financé par VNF et l'ADEME, avait pour objectif d'étudier l'efficacité et la pérennité de la phytostabilisation aidée couplée à une valorisation biomasse en bois-énergie à l'échelle d'un hectare d'un site de dépôt de sédiments pollué par les éléments traces. Le projet a permis (1) d'étudier la dynamique d'espèces sélectionnées, colonisatrices et invasives et la co-culture d'espèces sélectionnées, (2) d'étudier l'effet d'un amendement sur la mobilité des éléments traces du sédiment et sur l'accumulation dans les parties aériennes des plantes, (3) de développer une batterie de tests pour évaluer les effets écotoxicologiques potentiels sur les plantes et les organismes vivants au contact du sédiment étudié, et (4) d'évaluer à l'échelle de l'expérimentation la faisabilité technique, réglementaire et économique de la filière bois-énergie.

## Résultats et perspectives

La graminée sélectionnée pour la couverture au sol (canche cespiteuse) s'est montrée très pertinente (**Fig1**). Elle recouvre le sédiment à

environ 95 % de sa surface de manière pérenne. Son maintien nécessite d'éviter la présence de trop d'adventices plus compétitrices qui pourraient la faire régresser. N'ayant pas montré de signe de toxicité durant le projet, cette graminée s'est montrée très tolérante aux éléments traces présents dans le sédiment (Zn, Cd, Pb, Cu). Elle affiche des concentrations proches des valeurs physiologiques (**Fig2a**). La canche en synergie avec des opérations de tonte a permis de diminuer la vigueur de la renouée du Japon, espèce invasive très présente le long des voies d'eau.

L'amendement utilisé dans cette étude est proche de celui utilisé dans le projet PHYTOSTAB. Dans ce projet, cet amendement avait été très efficace à forte dose en diminuant la mobilité du Zn et du Cd d'un sédiment excavé très pollué ainsi que les concentrations foliaires en Zn et en Cd de la canche cespiteuse. La dose d'amendement utilisée dans notre étude résulte d'un compromis entre pratiques agricoles, faisabilité technique de l'épandage, contraintes réglementaires, viabilité économique de l'opération, développement des végétaux et résultats d'expérimentation pour déterminer l'effet d'un produit sur le pH d'un sol. Dans les conditions de notre étude, il n'a pas été mis en évidence l'effet court terme de l'amendement sur la diminution de la mobilité du Zn et du Cd, et sur la diminution des concentrations foliaires de la canche et des saules. Des concentrations extractibles faibles, une hétérogénéité forte de la pollution, des concentrations foliaires de la canche cespiteuse faibles et un pouvoir tampon très fort du sédiment pourraient expliquer ce résultat.

Concernant les saules, les concentrations foliaires en Cd les plus élevées ont été mesurées dans la zone amendée (**Fig2b**), ce qui va à l'encontre du résultat souhaité. Les hypothèses explicatives pourraient être : dose d'amendement utilisée insuffisante pour engendrer une diminution significative sur le transfert sédiment-saule, un comportement accumulateur des saules sélectionnés plus fort que l'effet immobilisant de l'amendement.

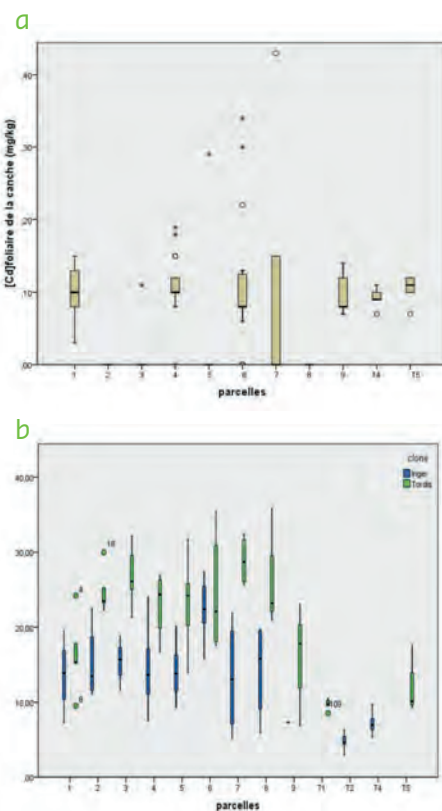
Dans notre cas, l'utilisation des deux cultivars de saules Tordis et Inger pour la partie valorisation du foncier via la valorisation de la biomasse ne semble pas pertinente pour la filière bois-énergie, le comportement accumulateur des saules pour le Cd et le Zn ayant été confirmé. La mortalité des saules a augmenté au cours du projet, rendant non viable la réalisation d'une coupe en fin de projet. La sensibilité de ces cultivars aux concentrations très élevées en Zn et en Cd du sédiment en synergie avec la compétition avec la canche pour l'eau et les nutriments semblent des facteurs probables de cette mortalité. Dans le cadre du projet DEMOPHYTO (2014-2018), les questions soulevées dans le projet PHYTOSED 2 sont en cours d'approfondissement. Les causes de la mortalité des saules sont explorées et une attention particulière est portée à la répartition des éléments traces dans les différentes phases du sédiment amendé et non amendé ainsi que sur le rôle des matières organiques réactives.

## RÉFÉRENCES


- Marchand L, Lamy P, Bert V, Quintela-Sabaris C, Mench M. 2015. *Potential of Ranunculus acris L. for biomonitoring trace element contamination of riverbank soils: photosystem II activity and phenotypic responses for two soil series*. Environment Science and Pollution Research, DOI 10.1007/s11356-015-4646-9.
- Kidd P, Mench M, Álvarez-López V, Bert V, Dimitriou I, Friesl-Hanl W, Herzig R, Janssen JO, Kolbas A, Müller I, Neu S, Renella G, Ruttens A, Vangronsveld J, Puschenreiter M. 2015. *Agronomic practices for improving gentle remediation of trace element-contaminated soils*. International Journal of Phytoremediation, 17: 1005-1037.
- Projet GREENLAND (best practice guidance for practical application of GRO). <http://www.greenland-project.eu/>
- Andersson-Sköld Y, Bardos P, Chalot M, Bert V, Crutu G, Phanthavongsa P, Delplanque M, Track T, Cundy AB. (2014). *Developing and validating a practical decision support tool (DST) for biomass selection on marginal land*. Journal of Environmental Management, 145: 113-121.
- Bert V, Hadj-Sahraoui A, Leyval C, Fontaine J, Ouvrard S (2012). *Les Phytotechnologies appliquées aux sites et sols pollués. État de l'art et guide de mise en œuvre*. ADEME/INERIS. Ed. EDP sciences. ISBN: 978-2-7598-0805-2.



**Fig1** Canche cespiteuse en couverture au sol en interrangées avec les saules



**Fig2** concentration en Cd (mg kg<sup>-1</sup> poids sec) dans les feuilles de canche (a) et de saule (b) selon les parcelles (médiane, intervalles interquartiles, ° valeurs éloignées, \*valeurs extrêmes des variables individuelles)



**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 du point d'éclair de mélanges binaires organiques*

*Modélisation intégrée de la perturbation endocrinienne à différents niveaux d'organisation biologique chez le poisson zèbre*

*Profilage de la toxicité de nouvelles substances par méthodes alternatives*

*Modélisation toxicocinétique de la perméthrine pour lier l'exposition aux biomarqueurs mesurés lors des campagnes de biosurveillance humaine*

# DÉVELOPPEMENT DE MODÈLES QSPR

## pour la prédiction du point d'éclair de mélanges binaires organiques

### TRANSLATION

Quantitative structure property relationships (QSPR) are increasingly used for the prediction of physico-chemical properties of pure compounds but only few were developed to predict the properties of mixtures.

In this work, a series of existing and new formula were proposed to derive mixture descriptors to develop QSPR models for mixtures. These mixture descriptors were used to model the flash point of a series of 435 organic mixture compositions. Multilinear models were obtained using twelve different mathematical formulas taking into account the linear or non-linear dependences of the flash point with the concentration of each compound. The best model, issued from the newly proposed  $(x_1d_1 + x_2d_2)^2$  formula, was a four parameter model presenting good prediction capabilities (with a mean absolute error in prediction of 10.3°C) compared to existing predictive methods for both mixtures and pure compounds.

L'INERIS évalue et développe des méthodes prédictives QSPR (Quantitative Structure/Property Relationship), complémentaires aux essais pour déterminer les propriétés physico-chimiques dangereuses de substances chimiques. Ces méthodes visent à relier de manière quantitative une propriété expérimentale à la structure moléculaire d'une substance. Avec l'application du règlement CLP [1] au cas des mélanges au 1<sup>er</sup> juin 2015, des modèles QSPR pour la prédiction des points d'éclair (PE) de mélanges organiques inflammables, qui peuvent s'avérer plus dangereux que les produits purs les constituant, ont été développés. La prédiction des propriétés de mélanges constitue un vrai challenge puisqu'il faut disposer de bases de données expérimentales suffisamment importantes à la fois en termes de nombre de données et en termes de diversité de structures (que ce soit pour les produits purs ou pour les mélanges, avec des données pour différentes concentrations). Ce domaine de recherche est récent puisque les premières études proposant un modèle QSPR pour les mélanges datent de 2006 [2] et un seul modèle de la littérature [3] avait été recensé au démarrage des travaux de l'INERIS pour le PE. Après avoir développé des modèles prédictifs du PE à partir d'une

approche combinant l'utilisation d'une loi de mélange avec des modèles QSPR pour les produits purs [4], une approche consistant à établir des modèles QSPR à partir du calcul de descripteurs de mélanges a été proposée. Ceux-ci sont calculés à partir des descripteurs moléculaires  $d_i$  et la fraction molaire  $x_i$  de chaque constituant du mélange, comme illustré sur la **Fig1**.

### Point d'éclair

Le point d'éclair est la température la plus basse de la prise d'essai, corrigée à la pression barométrique de 101,3 kPa, à laquelle l'application d'une source d'inflammation provoque l'inflammation des vapeurs émises par la prise d'essai avec propagation de la flamme sur toute l'étendue de la surface du liquide, dans les conditions spécifiées [5].

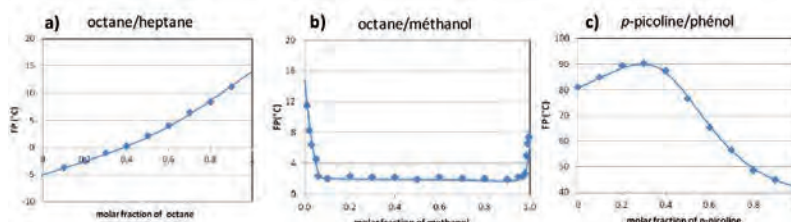
Cette propriété est nécessaire pour le classement des liquides inflammables dans le cadre du règlement CLP. Un liquide est classé inflammable s'il présente un PE inférieur à 60 °C. Différents profils de mélanges de points d'éclair existent (**Fig2**) et l'exemple b) indique clairement la nécessité de connaître ces profils car la considération des PE des corps purs est dans ce cas une approche non sécuritaire.

### FIGURES



**Fig1** Schéma de principe des modèles QSPR pour des mélanges

**Fig2** Profils de points d'éclair de mélanges ; a) mélange idéal, b) déviation positive par rapport à l'idéalité (avec un PE minimum), c) déviation négative par rapport à l'idéalité (avec un PE maximum)



## Méthodes

Une base de données de 435 points d'éclair de 43 mélanges binaires différents issus de 34 composés organiques purs inflammables a été recensée dans la littérature et divisée en 2 jeux de données :

- un jeu d'entraînement (284 points d'éclair de 22 mélanges binaires différents issus de 21 composés purs, obtenus en coupelle fermée selon la norme ASTM D56);
- un jeu de validation (151 points d'éclair de 21 mélanges binaires différents issus de 21 composés purs, obtenus par d'autres protocoles standards recommandés par le CLP).

Concernant le calcul des descripteurs, les structures moléculaires des constituants des différents mélanges ont été optimisées à l'aide du programme Gaussian09, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité au niveau B3LYP/6-31+G(d,p). Plus de 300 descripteurs moléculaires (constitutionnels, topologiques, géométriques et quantiques) ont été calculés pour chaque constituant à l'aide du logiciel Codessa.

Ensuite, des descripteurs de mélanges ont été calculés selon l'équation 1 :

$$D_{mix} = f(D_i, x_i)$$

avec  $D_{mix}$  le descripteur du mélange,  $D_i$  le descripteur pour le constituant  $i$  et  $x_i$  la fraction molaire du constituant  $i$  dans le mélange.

Des descripteurs de mélanges ont été calculés selon 12 formules mathématiques dont 8 nouvelles proposées dans ces travaux (en rouge

## RÉFÉRENCES

- [1] Règlement CE N°1272/2008 du Parlement européen et du Conseil du 16 décembre 2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges, modifiant et abrogeant les directives 67/548/CEE et 1999/45/CE et modifiant le règlement (CE) n° 1907/2006
- [2] Ajmani *et al.*, *J. Chem. Inf. Model.*, 2006, 46, 2043
- [3] Saldana *et al.*, *Energy Fuels*, 2013, 27, 3811
- [4] Gaudin *et al.*, *Fire Saf. J.*, 2015, 74, 61
- [5] Norme EN ISO 2719, *Détermination du point d'éclair – Méthode Pensky-Martens en vase clos*, 2003.
- [6] Gaudin *et al.*, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2015, 54, 6596

dans le **Tab1**). Des modèles multilinéaires ont été développés à l'aide du logiciel Codessa, à partir du jeu d'entraînement et des descripteurs de mélanges calculés.

## Résultats et perspectives

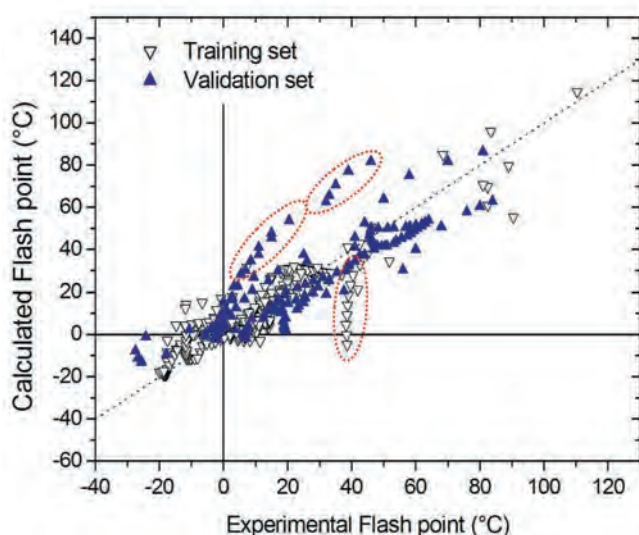
Le meilleur modèle QSPR obtenu comporte 4 descripteurs permettant de prendre en compte la non-linéarité du PE avec la concentration :

$$\begin{aligned} FP = & 50.3 + 16.3(x_1^3\chi_1 + x_2^3\chi_2)^2 \\ & + 5.5 \cdot 10^{-3}(x_1 HDCA_{p1} + x_2 HDCA_{p2})^2 \\ & - 2.4 \cdot 10^{-6}(x_1 \Delta\alpha_1 + x_2 \Delta\alpha_2)^2 \\ & - 88.0(x_1 V_{min,H,1} + x_2 V_{min,H,2})^2 \end{aligned}$$

Avec  $\chi$  l'indice de Randic d'ordre 3,  $HDCA_{p1}$  la surface chargée donneuse d'hydrogène,  $\Delta\alpha$  la polarisabilité anisotropique et  $V_{min,H}$  la valence minimale pour un atome d'hydrogène.

Le modèle présente de bonnes performances avec une erreur moyenne absolue de 6,3 °C sur le jeu d'entraînement et de 10,3 °C sur le jeu de validation. Une bonne corrélation est obtenue pour la plupart des composés de la base de données, même si 3 mélanges spécifiques (en rouge sur la **Fig3**) présentent de mauvaises prédictions. Ce modèle reproduit correctement les différents profils de mélanges, idéaux comme non idéaux, présentés dans la **Fig2**. Ces travaux ont été publiés en 2015 [6]. Pour améliorer ces performances, un accroissement de la base de données, couvrant une plus grande diversité chimique, mais aussi des améliorations méthodologiques (sélection de descripteurs, méthodes de validation et définition du domaine d'applicabilité) sont à envisager. D'autres mélanges plus complexes (mélanges ternaires et au-delà, mélanges aqueux) seront aussi considérés.

## FIGURES



**Fig3** Corrélation entre les valeurs expérimentales de point d'éclair et les valeurs calculées par le modèle QSPR (Eq. 2).

Formule
$D_{mix} = x_1 D_1 + x_2 D_2$
$D_{mix} =  x_1 D_1 - x_2 D_2 $
$D_{mix} = x_1^2 D_1 + x_2^2 D_2$
$D_{mix} = \sqrt{x_1 D_1 + x_2 D_2}$
$D_{mix} = (x_1 D_1 + x_2 D_2)^2$
$D_{mix} = \sqrt{(x_1 D_1)^2 + (x_2 D_2)^2}$
$D_{mix} = (1 - \Delta x) \Delta D$
$D_{mix} = (1 - \Delta x^2) \Delta D$
$D_{mix} = (1 - \Delta x)^2 \Delta D$
$D_{mix} = \frac{D_1 + D_2}{2}$
$D_{mix} =  D_1 - D_2 $
$D_{mix} = (D_1 - D_2)^2$

**Tab1** Formules de descripteurs de mélanges testées

# MODÉLISATION INTÉGRÉE DE LA PERTURBATION ENDOCRINIENNE

## à différents niveaux d'organisation biologique chez le poisson zèbre

### TRANSLATION



The translation of subtle functional deficits within individuals into population-level effects is identified as a main challenge for the hazard and risk assessment of endocrine disruptor compounds (EDCs). Thus, the aim of MOZAIC project was to propose an integrated modelling framework for zebrafish (*Danio rerio*) to assess impacts of EDCs at different biological levels from the organism to the population.

The first phase of the project was focused on the generation of new experimental data to fulfill the lack of knowledge concerning the zebrafish endocrinology and physiology. These original datasets were used to develop a physiologically-based pharmacokinetic (PBPK) for the zebrafish using validated and/or new QSAR/QSPR models to predict some toxicokinetic parameters. The impacts of EDCs on populations was predicted using a population dynamics model for zebrafish developed by coupling a model of individual bioenergetics with an individual-based model. The model was tested to predict the impacts of the ethinylestradiol at the population level conformed to these observed experimentally.

The models which remain to be developed are those relating these different biological levels, in particular between hormonal disturbances and individual performances.

Certains composés chimiques dénommés perturbateurs endocriniens (PE) possèdent la capacité de perturber le système endocrinien entraînant des dysfonctionnements de la reproduction et du développement des individus, entre autres. Un enjeu majeur pour l'évaluation des risques écologiques des PE est la traduction des déficits fonctionnels des individus en effets quantifiables au niveau des populations, i.e. un ensemble d'individus d'une même espèce se perpétuant dans un territoire donné et qui est l'unité biologique à protéger.

Dans ce contexte, le projet MOZAIC, coordonné par l'INERIS, visait à proposer un ensemble de modèles mathématiques mécanistiques permettant d'évaluer les modifications hormonales dues aux PE et leurs incidences sur les performances des individus et sur la dynamique des populations. L'INERIS s'est intéressé à une espèce modèle le poisson zèbre (*Danio rerio*) très utilisée en écotoxicologie.

Le projet MOZAIC était constitué de trois étapes (**Fig1**). La première a consisté à développer un modèle pharmacocinétique à fondement physiologique (PBPK) pour prédire les concentrations de PE dans les organes du système endocrinien, et en particulier ceux de l'axe hypothalamus-hypophyse-gonades (**Fig2**) [1]. Le modèle a été calibré avec des nouvelles données sur la physiologie du poisson zèbre et, pour les paramètres spécifiques aux substances, avec des relations quantitatives liant la structure chimique des composés et leurs activités (QSAR). En particulier, un modèle QSAR a été développé pour la glycoprotéine *Sex Hormone-Binding Globulin* qui joue un rôle important dans l'absorption et la distribution des PE dans l'organisme [2]. Le modèle PBPK calibré a ensuite été évalué à l'aide de données existantes sur la toxicocinétique de plusieurs substances, et a montré une bonne capacité prédictive. Une analyse approfondie du modèle a montré que le paramètre influençant le plus la toxicocinétique était le coefficient de partage octanol/eau. C'est un paramètre clé des modèles QSAR définissant certains paramètres du modèle PBPK. Ainsi, le développement de modèles QSAR

spécifiques aux PE pourrait améliorer les capacités prédictives du modèle PBPK.

En parallèle, un modèle de l'axe hypothalamus-hypophyse-gonades (HPG) a été développé pour prédire la cinétique d'hormones stéroïdiennes et la production de vitellogénine (lipoprotéine précurseur du vitellus constituant les réserves dans les œufs, utilisée comme biomarqueur d'exposition et d'effet aux PE). Le modèle HPG se base sur les doses internes effectives simulées par le modèle PBPK afin de prédire l'impact de substances sur le fonctionnement de l'axe. Pour cela, la compétition entre hormones endogènes et PE pour les récepteurs aux œstrogènes dans les différents organes et les régulations induites par ces récepteurs ont été considérées. La calibration du modèle sur des données expérimentales obtenues pour plusieurs concentrations d'œstradiol a été initiée mais de nouvelles données expérimentales devront être acquises pour mieux caractériser certains phénomènes.

La dernière étape visait à développer un modèle individu-centré (IBM) de dynamique de population du poisson zèbre tenant compte des facteurs écologiques les plus importants pour cette espèce (température de l'eau, densité, nourriture, photopériode...), dans le but de prédire les impacts de substances sur les populations de poissons. Un modèle bioénergétique (de type DEB pour *Dynamic Energy Budgets*) a été intégré au modèle IBM afin de décrire de façon mécanistique l'acquisition, le stockage et l'utilisation de l'énergie par chaque individu. La capacité du modèle à simuler la dynamique d'une population dans son milieu naturel sans stressor chimique a tout d'abord été évaluée [3]. Ensuite, les capacités du modèle pour extrapoler des effets mesurés sur les organismes en laboratoire ont été testées avec des expérimentations visant à observer les impacts de l'éthinylestradiol sur des populations de poissons dans un lac naturel. La Figure 3 (**Fig3**) présente différentes prédictions sur les effectifs de la population en fonction de la concentration. Nos résultats montrent une quasi-extinction qui serait liée, entre autres, à une diminution du pourcentage

de mâles parmi les adultes et aux effets directs de cette molécule sur le comportement reproducteur. Ce cas d'étude montre l'intérêt des modèles de dynamique de population pour mieux caractériser le risque selon différents scénarii d'exposition et par la suite pour le gérer.

Au cours du projet MOZAIC, nous avons donc développé un premier ensemble de modèles couvrant différents niveaux biologiques. La modélisation des liens entre les différents niveaux biologiques, et en particulier entre les perturbations hormonales et les performances des individus (croissance, survie, fécondité, ...), reste un point à développer à l'avenir.

## RÉFÉRENCES

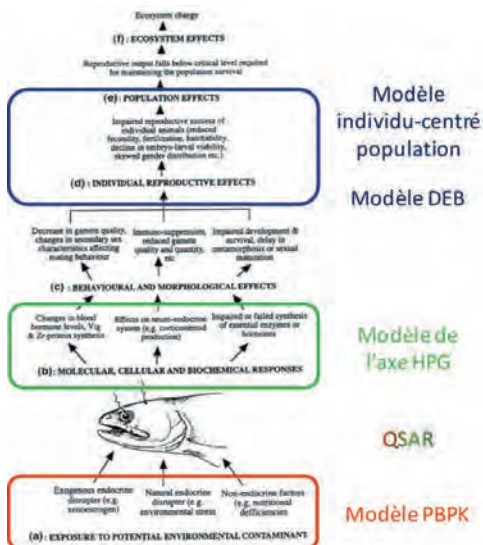
[1] Pery, A. R. R., J. Devillers, C. Brochet, E. Mombelli, O. Palluel, B. Piccini, F. Brion, and R. Beaudouin. 2014. *A Physiologically Based Toxicokinetic Model for the Zebrafish Danio rerio*. *Environmental Science & Technology* 48: 781-790

[2] Saxena, A. K., J. Devillers, A. R. R. Pery, R. Beaudouin, V. M. Balaramnavar, and S. Ahmed. 2014. *Modelling the binding affinity of steroids to zebrafish sex hormone-binding globulin*. *Sar and Qsar in Environmental Research* 25: 407-421.

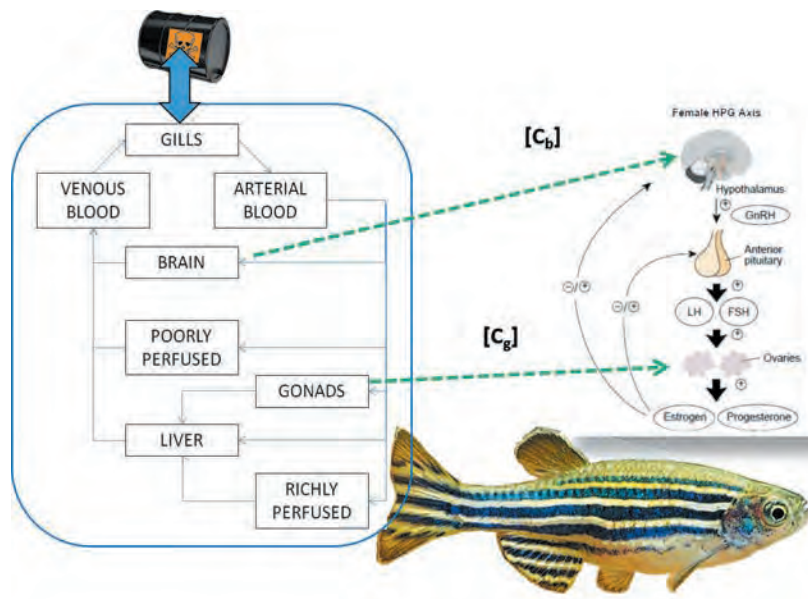
[3] Beaudouin, R., B. Goussen, B. Piccini, S. Augustine, J. Devillers, F. Brion, and A. R. R. Pery. 2015. *An Individual-Based Model of Zebrafish Population Dynamics Accounting for Energy Dynamics*. *Plos One* 10.

## FIGURES

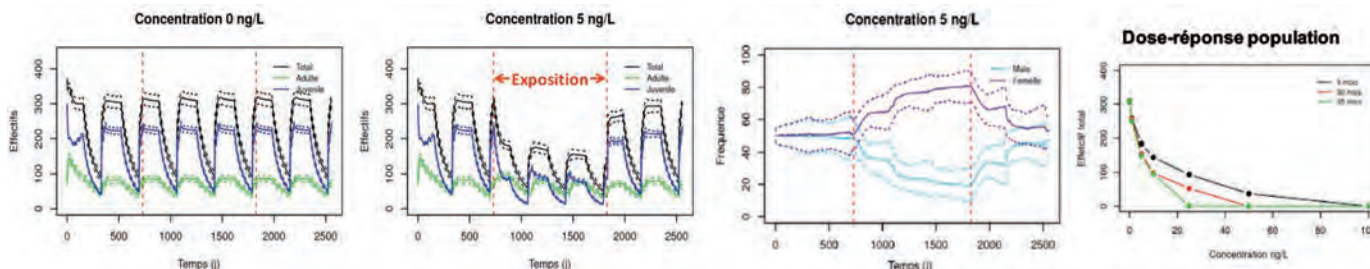
**Fig1** Ordre séquentiel d'effet d'un PE (issu de (Arukwe, 2001)) en parallèle de la stratégie proposée dans le projet MOZAIC.



**Fig2** Description schématique du modèle PBPK du poisson zèbre.



**Fig3** Effectif en fonction du temps (jour) pour des populations témoins et des populations exposées pendant 3 ans à 5 ng.L<sup>-1</sup> d'EE2. Lignes en pointillé : intervalle de confiance à 95 % ( ) des variables des 1 000 populations simulées.



# PROFILAGE DE LA TOXICITÉ DE NOUVELLES SUBSTANCES

## par méthodes alternatives

### TRANSLATION

Toxicology is changing its experimental approaches from animal testing to less expensive, more ethical and relevant methods. Modern toxicology relies on two main components: *in vitro* testing and *in silico* analyses. Toxicology has also entered a world of "big data" production, switching from a low-throughput to a high-throughput mode of screening. The DRC/VIVA/METO unit of INERIS is spearheading the development of the methods and models needed to extrapolate the results of *in vitro* assays to *in vivo* human exposures. The key ingredients of our approach are physiological pharmacokinetic (PBPK) models, systems biology models of adverse outcome pathways (AOP) and Bayesian methods for statistical inference and uncertainty reduction. In the framework of large European projects such as PREDICT-IV, COSMOS, StemBANCC, EU-ToxRisk and Euromix, METO actively transfers its results to university and chemical, cosmetic or pharmaceutical industry partners.

Le principal objectif sociétal de la toxicologie est de développer des prévisions fiables de l'impact sur la santé humaine de l'exposition à des produits chimiques, avant même que cette exposition se produise. La détermination expérimentale de la toxicité passe traditionnellement par des essais sur animaux dont les résultats sont ensuite extrapolés empiriquement pour estimer les doses sûres chez l'homme. Cette approche, qui soulève des interrogations éthiques, est également coûteuse : les dépenses annuelles mondiales pour l'expérimentation animale en toxicologie sont estimées à deux milliards d'euros. De plus, les études animales sont trop lentes pour dépister les dizaines de milliers de produits chimiques déjà commercialisés et les nouvelles molécules mises sur le marché chaque année. En outre, la transposition de l'animal à l'homme est très incertaine.

Pour résoudre ces problèmes on s'oriente résolument vers le développement de tests *in vitro* utilisant des cellules humaines. Pour une mise à l'échelle de l'organisme entier des résultats de ces tests, il est également nécessaire de définir des méthodes mathématiques et statistiques adaptées. Les progrès de la biologie moléculaire et cellulaire (sur les cellules-souches), de la bio-informatique, de la biologie des systèmes et

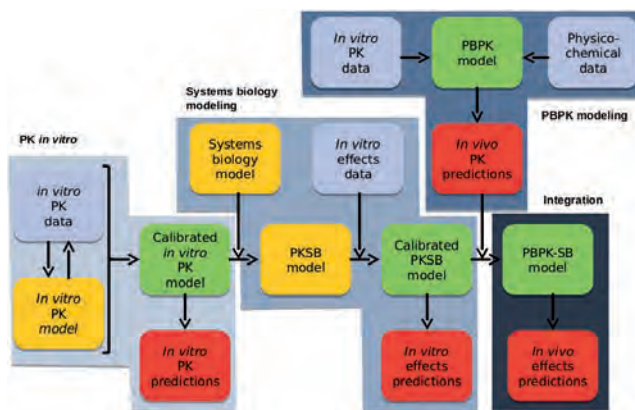
de la toxicologie prédictive nous ont fait passer de tests *in vivo* à faible débit à une approche mécaniste intégrée à haut débit. Le profilage haut débit, robotisé, permet un examen rapide de milliers d'agents simples ou des mélanges complexes par jour. Ce profilage peut permettre la prédiction des effets toxiques chez l'homme à différents stades de la vie et pour différentes conditions physiologiques [1]. L'équipe Modèles pour l'écotoxicologie et la toxicologie (METO) de l'INERIS participe activement, par des partenariats européens, à cette révolution de la toxicologie.

## Contribution de l'INERIS

L'INERIS accompagne depuis plusieurs années les toxicologues européens (projets PREDICT-IV, COSMOS, StemBANCC, EU-ToxRisk, Euromix) dans la définition des processus d'extrapolation *in vitro* - *in vivo*. Cela passe par la définition de la méthode à suivre, des données à collecter et des modèles à utiliser pour interpréter et extrapoler ces données (Fig1).

Outre cet accompagnement conceptuel des partenaires universitaires et industriels de la chimie, de la cosmétique et de la pharmacie, l'équipe METO développe concrètement les équations et le code informatique de modèles

### FIGURES



**Fig1** : Schéma des principales étapes de l'extrapolation *in vitro* - *in vivo*. La pharmacocinétique (PK) *in vitro* permet de connaître l'exposition exacte des cellules testées. Un modèle (PKSB) couplant cette pharmacocinétique et la biologie systémique des effets toxiques permet de prédire les effets cellulaires à différents temps et doses d'exposition des cellules. Le couplage final avec un modèle pharmacocinétique physiologique (PBPK) permet de prédire les concentrations tissulaires (par exemple au niveau du rein) auxquelles les cellules seront exposées *in vivo* (adapté de Hamon *et al.*, 2015 [2]).

pharmacocinétiques et de modèles de biologie systémique [3; 4; 5]. Ce travail de modélisation mathématique s'accompagne du développement de méthodes statistiques bayésiennes, adaptées à l'inférence sur des modèles complexes [6; 7].

## Perspectives

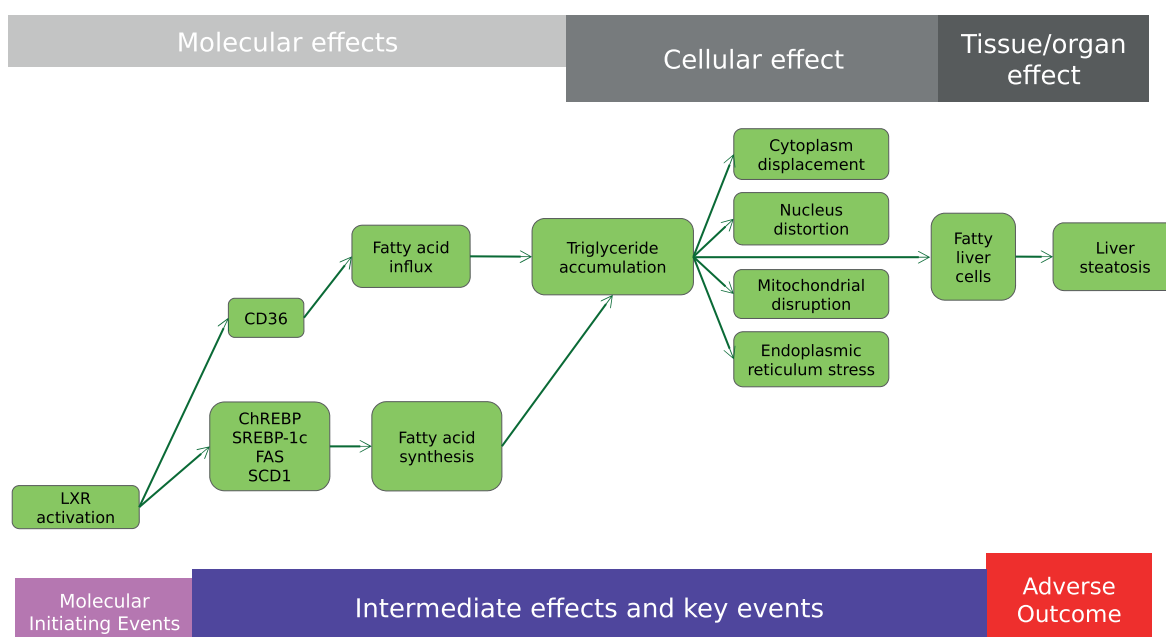
L'un des développements notables de ces deux dernières années est celui du concept d'AOP (*adverse outcome pathway*, ou voie de toxicité). Une AOP est d'abord une description mécaniste formalisée des événements moléculaires, cellulaires puis tissulaires, conduisant de l'interaction d'un produit toxique avec une cible moléculaire à l'apparition d'une pathologie avérée (Fig2). L'OCDE mène un programme international de définition standardisée d'AOP. Le projet européen EU-ToxRisk complète ce programme. L'équipe METO de l'INERIS y dirige le développement d'AOP quantitatives, c'est-à-dire sous-tendues de modèles de biologie systémiques capables d'intégrer des données obtenues *in vitro* (par exemple dans le programme nord-américain Toxcast) et ainsi que des prédictions faites par méthodes QSAR (*Quantitative structure-activity relationship*), *in silico*.

## RÉFÉRENCES

- [1] Zeise L, Bois FY, Chiu WA, *et al.* Addressing human variability in next-generation human health risk assessments of environmental chemicals. *Environ. Health Perspect.* 2013; 121 : 23-31.
- [2] Hamon J., Renner M., Jamei M., Lukas A., Kopp-Schneider A., Bois F, 2015, *Quantitative in vitro to in vivo extrapolation of tissues toxicity*, *Toxicology in Vitro*, 30: 203-216.
- [3] Mueller S., Dekant W., Jennings P., Testai E., Bois F., 2015, *Predict-IV: a systems toxicology approach to improve pharmaceutical drug safety testing*. *Toxicology in Vitro*, 30: 4-6.
- [4] Bois F., Brochot C., 2016, *Modeling pharmacokinetics*, in *In Silico Methods for Predicting Drug Toxicity*, Benfenati E. Ed., *Methods in Molecular Biology Series*, 1425 :37-62, Humana Press, New-York, doi: 10.1007/978-1-4939-3609-0\_3.
- [5] Bois F., Diaz Ochoa J.G., Gajewska M., Kovarich S., Mauch K., Pains A., Péry A., Sala Benito J.V., Teng S., Worth A., Bois F. sous presse, *Multiscale modelling approaches for assessing cosmetic ingredients safety*, *Toxicology*.
- [6] Bois F., 2012, Bayesian inference, in *Computational Toxicology vol. II*, Reisfeld B., Mayeno A.N. Eds., *Methods in Molecular Biology Series*, 930: 597-636, Humana Press, New-York, doi: 10.1007/978-1-62703-059-5\_25.
- [7] Bois F., Gayraud G., 2015, *Probabilistic generation of random networks taking into account information on motifs occurrence*, *Journal of Computational Biology*, 22:25-36, doi: 10.1089/cmb.2014.0175.

## FIGURES

**Fig2** : Exemple d'AOP (*adverse outcome pathway*), liant l'activation du récepteur nucléaire LXR par une substance chimique à l'apparition d'une stéatose (accumulation de graisse) hépatique.



# MODÉLISATION TOXICOCINÉTIQUE DE LA PERMÉTHRINE pour lier l'exposition aux biomarqueurs mesurés lors des campagnes de biosurveillance humaine

## RÉFÉRENCES

[1] Brochot C, Willemin ME, Zeman F (2014). *La modélisation toxico/pharmacocinétique à fondement physiologique: son rôle en évaluation du risque et en pharmacologie. Modéliser & simuler Epistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation Tome 2. Collection « Modélisations, Simulations, Systèmes complexes ».* Éditeurs F. Varenne, M. Silberstein, S. Dutreuil, P. Huneman. p. 455-492

[2] Lestremau F, Willemin ME, Chatellier C, Desmots S, Brochot C (2014) *Determination of cis-permethrin, trans-permethrin and associated metabolites in rat blood and organs by gas chromatography-ion trap mass spectrometry.* *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 406 (14): 3477-3487.

[3] Willemin ME, Desmots S, Le Grand R, Lestremau F, Zeman FA, Leclerc E, Moesch C, Brochot C (2016). *PBPK modeling of the cis- and trans-permethrin isomers and their major urinary metabolites in rats.* *Toxicology and Applied Pharmacology*, 294: 65-77.

[4] Willemin ME, Kadar A, de Sousa G, Leclerc E, Rahmani R, Brochot C (2015) *In vitro human metabolism of permethrin isomers alone or as a mixture and the formation of the major metabolites in cryopreserved primary hepatocytes.* *Toxicology in Vitro* 29 (4): 803-812.

La présence de pyréthrinoides dans l'environnement et plusieurs matrices biologiques indique une large imprégnation de la population humaine à ces insecticides. En raison de leur utilisation dans divers domaines (agriculture, médecine, traitements des intérieurs, etc.), la quantification de l'exposition réelle des populations s'avère difficile.

Une méthodologie a été mise en place, basée sur la modélisation toxicocinétique afin d'estimer, à partir de mesures chez les individus, les expositions des populations à la perméthrine, un des pyréthrinoides les plus utilisés. Le premier volet est ici présenté: la construction d'un modèle toxicocinétique basé sur la physiologie (appelé aussi modèle PBPK) liant l'exposition aux biomarqueurs d'exposition, à savoir les concentrations en métabolites dans les urines [1].

Ce premier volet comporte trois étapes: la mise en place d'une méthode analytique permettant le dosage des composés dans des matrices biologiques, le développement d'un modèle PBPK pour la perméthrine chez le rat, puis l'extrapolation de ce modèle à l'humain.

## Méthodologie et expérimentations

Une méthode analytique par GC-MS/MS a été développée pour doser simultanément les isomères de la perméthrine et ses métabolites (3-PBA, cis- et trans-DCCA) dans des matrices biologiques de natures très diverses: tissus (rein, cerveau, foie, muscle, testicules, graisse, fèces) et fluides (sang, plasma, globules rouges). L'analyse a été réalisée en chromatographie en phase gazeuse (Gc) couplée à un spectromètre de masse (MS) de type « trappe d'ion » en mode MS/MS [2]. Les rendements d'extraction (entre 80 et 120 %) et les limites de quantification obtenues (entre 25 et 50 ng/mL pour les fluides, et 50 à 100 ng/g pour les tissus) attestent de

la fiabilité de la méthode pour les analyses de toxicocinétique.

Un modèle PBPK pour la perméthrine (Fig1) a été développé afin de lier la cinétique du composé actif (la perméthrine) à celles de biomarqueurs d'exposition (métabolites). La perméthrine se présentant sous la forme de deux isomères (cis et trans), la cinétique de chacun des isomères a été étudiée individuellement afin d'observer d'éventuelles différences de comportement. La calibration du modèle s'est faite à partir d'expériences *in vivo* chez le rat qui ont permis de suivre l'évolution des concentrations de la perméthrine et de ses métabolites dans plusieurs matrices biologiques. La structure du modèle PBPK est basée sur celle de modèles précédemment publiés, avec l'ajout de nouveaux organes importants pour sa toxicocinétique (tels que les muscles) ou dans lesquels la perméthrine pourrait avoir une action toxique (testicules). Les caractéristiques de la cinétique de la perméthrine ont été bien reproduites par notre modèle (distribution rapide dans les tissus, accumulation dans les graisses, élimination rapide du composé parent dans le sang, clairance hépatique de l'isomère cis plus lente que celle de la forme trans, proportion du métabolite DCCA plus importante que celle du 3-PBA). Le modèle PBPK de la perméthrine a ensuite été évalué sur des données complémentaires, à savoir sur la cinétique d'un mélange d'isomères cis/trans. Le modèle PBPK chez le rat ainsi établi caractérise *in vivo* la relation composé parent-métabolite pour la perméthrine [3].

Pour transposer le modèle développé chez le rat à l'humain, il est nécessaire de tenir compte des différences interspèces, notamment au niveau du métabolisme dans le cas de la perméthrine. Le métabolisme hépatique de la perméthrine chez l'homme a donc été caractérisé à l'aide d'expérimentations *in vitro* dans des conditions adéquates pour l'extrapolation *in vivo* [4]. Les



liaisons non spécifiques au sein du système de culture (adhésion aux parois, etc.) ainsi que l'activité enzymatique des hépatocytes ont été quantifiées. Nos résultats ont montré que la trans-perméthrine est métabolisée plus rapidement que la cis-perméthrine avec un facteur de 2,6 ( $25,7 \pm 0,6$  et  $10,1 \pm 0,3 \mu\text{L}/\text{min}/106$  cellules respectivement).

Pour les deux isomères, le taux de formation du métabolite DCCA était supérieur à celui de 3-PBA (d'un facteur 3 environ). L'incubation des deux isomères de la perméthrine simultanément a montré le faible potentiel inhibiteur des composés, les vitesses de métabolisme et de formation des métabolites en co-incubation étant estimées à des valeurs similaires à celles obtenues avec les isomères seuls. Ces résultats indiquent donc une absence d'interaction entre les deux isomères dans ces conditions. Les paramètres de métabolisme estimés par ces expérimentations peuvent ensuite être intégrés à un modèle PBPK de la perméthrine chez l'humain (**Fig2**).

## TRANSLATION

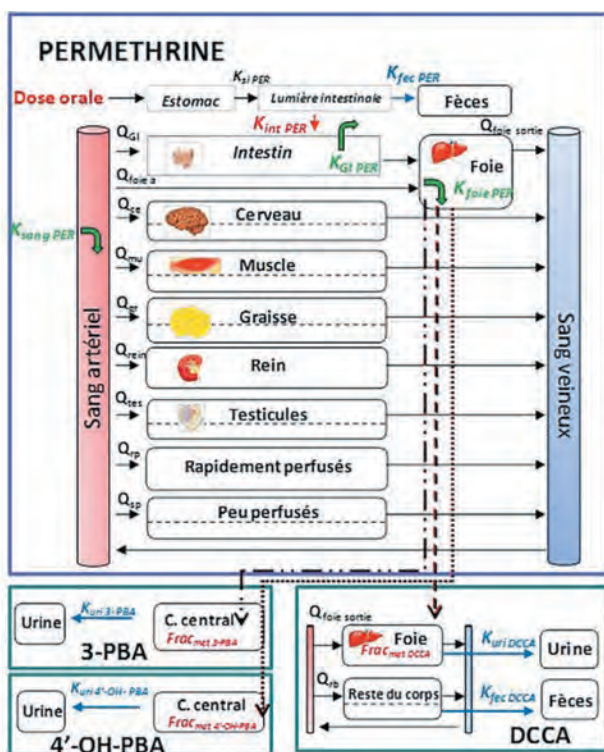
Humans are largely exposed to pyrethroids, an insecticide family. In this project, we aimed at developing a PBPK model to link exposure to permethrin to the concentrations of metabolites in urine, used as biomarkers of exposure. A three steps strategy was followed. First, an analytical method (GC-MS/MS) was developed to measure simultaneously these compounds in the several biological matrices. A PBPK of permethrin was then developed for each isomer to describe the fate of permethrin and metabolites in rat. The toxicokinetic parameters were estimated in a Bayesian framework using *in vivo* experiments in rats. The PBPK model of permethrin was then validated on the kinetic data of a mixture of permethrin. Hepatic metabolism was quantified in humans in primary hepatocytes in optimal conditions for *in vitro-in vivo* extrapolation, by incubating the isomers separately and as a mixture. This work underlines that a general PBPK model for pyrethroids could be considered. The lack of interaction between isomers observed in *in vitro* experiments could simplify the characterization of the exposure to mixtures of pyrethroids.

## Perspectives

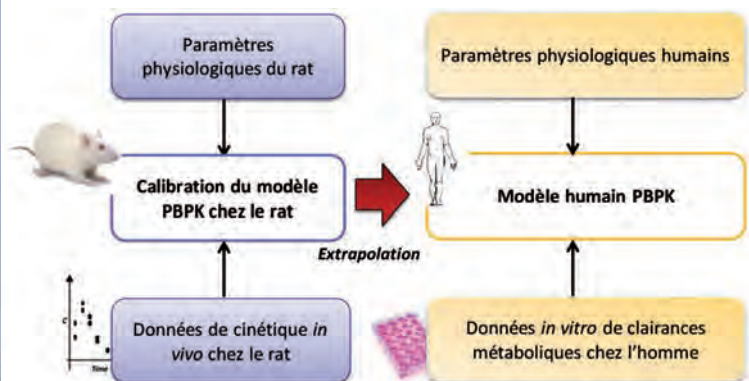
L'obtention du modèle PBPK de la perméthrine et de ses métabolites constitue une première étape dans l'exploration et la quantification de l'exposition et des risques associés à la perméthrine.

Les prochains travaux seront dédiés à la généralisation du modèle PBPK chez l'homme à l'ensemble de la famille des pyrèthroïdes et à son application à la reconstruction des expositions des populations en situations réelles, c'est-à-dire en présence de mélanges de pyrèthroïdes.

## FIGURES

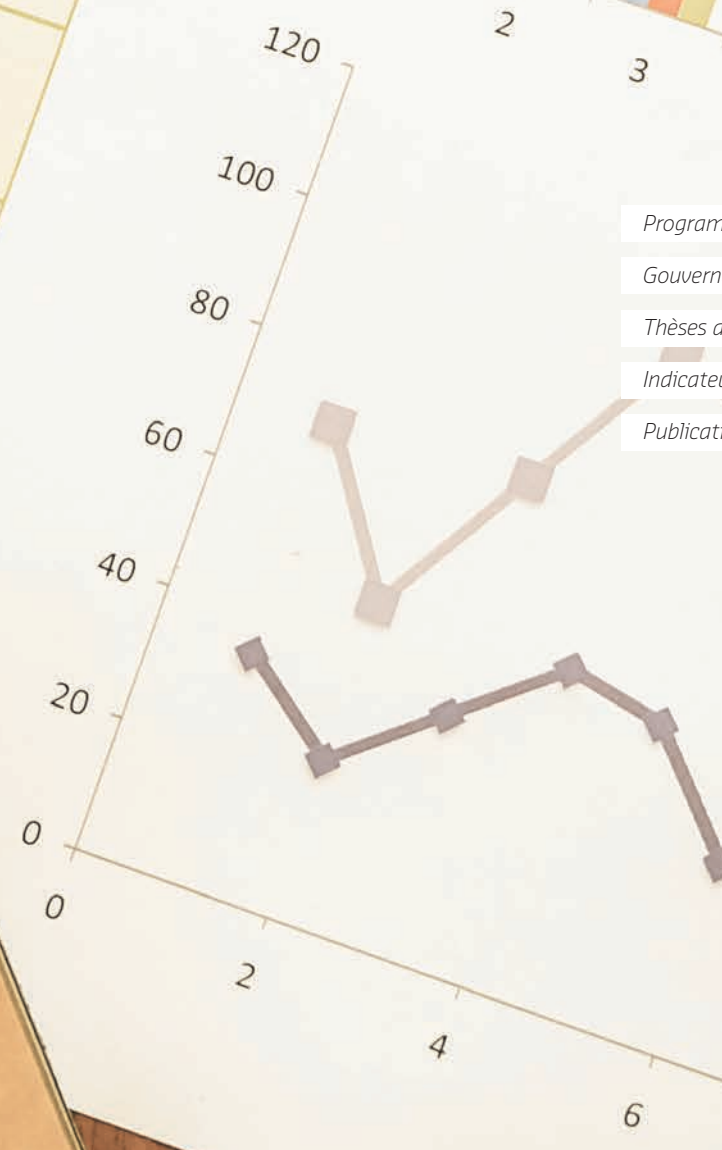
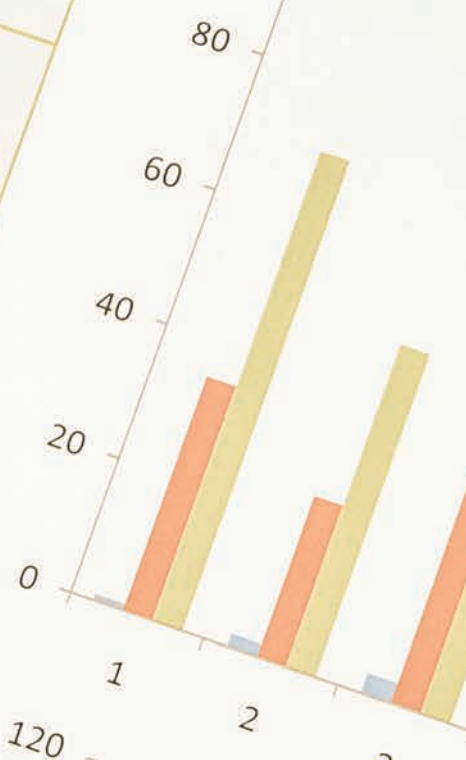


**Fig1** Modèle PBPK chez le rat pour la cis- et trans-perméthrine et les métabolites DCCA, 3-PBA and 4'-OH-PBA.



**Fig2** Stratégie utilisée pour le développement du modèle PBPK humain pour la perméthrine.

# ANNEXES



- Programmes de recherche en cours*
- Gouvernance scientifique*
- Thèses de doctorat en cours*
- Indicateurs de recherche 2015*
- Publications*

# L'INERIS PARTENAIRE DE 37 PROGRAMMES EUROPÉENS

en cours au 30 septembre 2016

<b>HELIX</b>	The Human Early-Life Exposome - Novel tools for integrating early-life environmental exposures and child health across Europe
<b>ASCENT</b>	Advanced solid cycles with efficient novel technologies
<b>SOLUTIONS</b>	Solution for present and future emerging pollutants in land and water resources management
<b>CascEff</b>	Modelling of dependencies and cascading effects for emergency management in crisis situations
<b>BASIS</b>	Blast actions on structures in steel
<b>NANO-REG</b>	A common European approach to the regulatory testing of nanomaterials
<b>NANOMILE</b>	Engineered nanomaterials mechanisms of interaction with living systems and the environment: an universal framework for safe technology
<b>EDEN</b>	End-user driven demo for cbrNE
<b>EXPRO</b>	Prediction and mitigation of methane explosion effects for improved protection of mine infrastructure and critical equipment
<b>HELIS</b>	High energy lithium sulphur cells and batteries
<b>NanoReg II</b>	A common European approach to the regulatory testing of nanomaterials
<b>NanoFase</b>	Accumulation and fate of engineered nanomaterials in fishes
<b>Euromix</b>	Assessing the health risks of combined human exposure to multiple food-related toxic substances
<b>IMPROVER</b>	Developing European resilience management guideline and demonstrating it through pilot implementation
<b>SLOPES</b>	Smarter lignite open engineering solutions
<b>STAMS</b>	Long-term stability assessment and monitoring of flooded shafts
<b>ETC/ACM 2016</b>	European topic center on air pollution and climate change mitigation
<b>HUGS</b>	Humins as green and sustainable precursors of eco-friendly building blocks and materials
<b>EPOS</b>	European plate observing system
<b>STEMBANCC</b>	Stem cells for biological assays of novel drugs and predictive toxicology
<b>SAPHEDRA</b>	Plateforme européenne d'évaluation des modèles de prédiction des effets des phénomènes dangereux générés par de nouveaux matériaux, procédés, technologies
<b>CALIBRATE</b>	Performance testing, calibration and implementation of a next generation system-of-systems risk governance framework for nanomaterials
<b>NANOTAS</b>	Integrated testing strategy for nanomaterial safety assessment
<b>EuToxRisk</b>	An Integrated European 'Flagship' Programme Driving Mechanism-based Toxicity Testing and Risk Assessment for the 21 <sup>st</sup> century
<b>CHEOPS</b>	Achieving low-cost highly efficient perovskite solar cells
<b>ZELCOR</b>	Zero Waste Ligno-Cellulosic Biorefineries by Integrated Lignin Valorisation
<b>HAZPRED</b>	Predictive methods for determining the decomposition properties of hazardous substances: from development to experimental verification
<b>MERIDA</b>	Management of Environmental Risks During and After mine closure
<b>VALSE</b>	Nouvelles ressources transfrontalières: vers une validation de <i>scenarii</i> de valorisation de sédiments et autres matériaux
<b>ActrisPPP</b>	European Research Infrastructure for the observation of Aerosol, Clouds, and Trace gases.
<b>EHBM4EU</b>	Méthodes de biomonitoring
<b>EC4SAFENANO</b>	European Centre for Risk Management and Safe Innovation in Nanomaterials Nanotechnologies
<b>OpenRiskNet</b>	Open e-infrastructure to support data sharing, knowledge integration and in silico analysis and modelling in risk assessment
<b>FLEDGED</b>	Flexible and highly intensified process for DME production from biomasse gasification
<b>DIADEM</b>	Développement d'une approche intégrée pour le diagnostic de la qualité des eaux de la Meuse
<b>GASDRAIN</b>	Development of improved methane drainage technologies by stimulating coal seams for major risks prevention and increased coal output
<b>STARS</b>	Sociotechnical safety assessment within risk regulation regimes

# PROGRAMMES DE RECHERCHE SOUTENUS par l'Agence nationale de la recherche (ANR)

**PROLONGE**

Propagation lointaine des ondes de grande énergie

**POLYSAFE**

Conduite en sécurité des réacteurs-échangeurs intensifiés continus en milieu polyphasique

**PHYTCHEM**

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

## AUTRES PROGRAMMES financements sur fonds publics



### PROGRAMMES DE RECHERCHE SOUTENUS PAR LE CONSEIL RÉGIONAL DE PICARDIE

**RADIAN**

Contribution du rayonnement thermique aux explosions de poussières métalliques

**BIOH2**

Mise au point d'un démonstrateur de production en continu d'hydrogène à partir de biomasse

**ECORBIO**

Evaluation of corrosion in biorefineries of the future

**DEMOSTHENE**

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



### PROGRAMMES DE RECHERCHE SOUTENUS PAR LE MINISTÈRE DE L'ENVIRONNEMENT, DE L'ÉNERGIE ET DE LA MER

**ANIMATION PRIMEQUAL EIAI**

Environnements intérieurs et approches innovantes



### PROGRAMMES DE RECHERCHE SOUTENUS PAR L'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

**AMI CYCLADE**

Recyclage des batteries pour véhicule électrique

**CORTEA 2011**

Émission matériaux

**SOURCES**

État des lieux sur les connaissances apportées par les études expérimentales des sources de particules fines en France

**CORTEA 2013 - IDENTECH**

Identification des technologies existantes permettant de réduire les émissions polluantes des foyers

**CORTEA 2014 - CARABLACK**

Caractérisation des sources de combustion vis-à-vis du black carbon 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

# CONSEIL SCIENTIFIQUE

au 22 septembre 2016

## PRÉSIDENTE

**Corinne GENDRON,**  
Avocate, MBA, Ph.D.

Titulaire, Chaire de responsabilité sociale et de développement durable  
École des sciences de la gestion  
Chaire de responsabilité sociale et de développement durable  
*Université du Québec à Montréal M. Maurice LEROY*

## VICE-PRÉSIDENT

**Philippe FREYSSINET**  
Directeur scientifique Énergie et Environnement  
*Qatar National Research Fund*

## MEMBRES

**Philippe CHALMIN**  
Responsable du master  
« Affaires Internationales »  
*Université Paris-Dauphine*

**Michel DE LARA**  
Professeur - CERMICS, Université Paris-Est,  
*Ecole des Ponts ParisTech*

**Isabelle MOMAS**  
Professeur  
*Université Paris-Descartes*  
*Faculté de pharmacie*

**Régis REAU**  
Directeur scientifique senior,  
*Air Liquide*

**Michel SARDIN**  
Professeur à l'ENSIC,  
Université de LORRAINE  
Membre du Laboratoire Réactions et Génie  
des Procédés - UMR 7274 CNRS-Université  
de Lorraine  
Directeur de l'Institut Carnot Énergie  
et Environnement en Lorraine

## INVITES PERMANENTS

**Nadine GABAS**  
Présidente de la commission scientifique  
spécialisée des risques accidentels

**Rémy MAXIMILIEN**  
Président de la commission scientifique  
spécialisée des risques chroniques

**Jacques PIRONON**  
Président de la commission scientifique  
spécialisée des risques du sol et du sous-sol

**Gérald HAYOTTE**  
Président de la commission d'orientation  
de la recherche et de l'expertise

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

Mandat 2015 /2017

## PERSONNALITÉS QUALIFIÉES DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR OU DE LA RECHERCHE

**M. Maurice LEROY** Professeur émérite Université de Strasbourg - CNE2

**M. Brice LAURENT** Chargé de recherche - CSI Mines ParisTech

## COLLÈGE INDUSTRIELS

**M. Jean-Charles BOUTONNET** Chef du département Toxicologie et Environnement - ARKEMA

**M. Henri MOLLERON** (vice-président) Directeur Environnement - COLAS

**M. Frédéric PERIE** Responsable développement durable et environnement - TOTAL SA

**Mme Sylvaine RONGA-PEZERET** Médecin toxicologue - SEM - EDF

## COLLÈGE ASSOCIATIONS

**Mme Solène DEMONET** Coordinatrice réseau risques industriels France Nature Environnement (FNE)

**M. Francis GLEMET** Porte-parole Coordination nationale médicale santé environnement (CNMSE)

**M. Jean-Yves LEBER** Porte-parole Ecologie sans frontière (ESF)

**M. Vincent PERROT** animateur du secteur santé Consommation, logement, cadre de vie (CLCV)

## COLLÈGE SYNDICATS

**M. Gérald HAYOTTE** (président) CFDT

**M. Pierre LAROCHE** CGT

## COLLÈGE ÉLUS

**M. Michel GUILLOUX** Adjoint au maire Mairie de Feyzin

**M. René DROUIN** Maire Mairie de Moyeuve-Grande

## COLLÈGE ÉTAT

**M. Cédric BOURILLET** Chef du service de la prévention des nuisances et de la qualité de l'environnement  
Ministère de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer

**M. Philippe COURTIER** Chef du service de la recherche (représenté par M. Lionel MOULIN, chef de la mission environnement, risques et santé)  
Ministère de l'Environnement, de l'Énergie et de la Mer



# COMMISSIONS SCIENTIFIQUES SPÉCIALISÉES

au 22 septembre 2016

## RISQUES ACCIDENTELS

### Nadine GABAS

#### Présidente

Professeur des universités  
Ecole nationale supérieure des  
ingénieurs en arts chimiques et  
technologiques

### Jean-François LECHAUDEL

#### Vice-Président

Coordinateur risques  
technologiques groupe  
Direction sécurité industrielle  
TOTAL SA

### Claude VALOT - DEDALE

### Alexis TSOUKIAS

#### Directeur de recherche

LAMSADE - UMR CNRS 7024  
Université Paris-Dauphine

### Guy MIGAULT

#### Corporate Process Manager SOLVAY

### Éric CHOJNACKI - IRSN

### Éric CLIMENT - IMFT

### Serge WALTER

Laboratoire propre intégré  
Groupe sécurité et écologies  
chimiques  
Université de Haute-Alsace

### Laurent JOUBERT

#### Professeur

Université de Rouen

### André PAUSS

#### Professeur

Département génie des procédés  
industriels  
Université de technologie de  
Compiègne

### Frédérique BATTIN LECLERC

#### Directrice de recherche

Laboratoire Réactions et Génie  
des procédés  
CNRS - ENSIC

### Thierry MEYER

#### Maître d'enseignement et de recherche

Groupe de sécurité chimique et  
physique - École polytechnique  
fédérale de Lausanne (EPFL)

### Murès ZAREA

#### Expert sécurité industrielle

Direction Recherche &  
Technologie - GDF SUEZ



## RISQUES CHRONIQUES

### Remy MAXIMILIEN

#### Président

Direction des sciences du vivant  
CEA

### Vincent-Henri PEUCH

#### Vice-Président

Responsable de la division  
chimie atmosphérique  
Centre européen pour les  
prévisions météorologiques  
à moyen terme

### Armelle BAEZA

#### Professeur

UFR Sciences du vivant  
Laboratoire de réponses  
moléculaires et cellulaires  
xénobiotiques  
Université Paris VII - Diderot

### Thierry CAQUET

Écologie et santé des  
écosystèmes - UMR INRA -  
Agrocampus ESE - INRA

### Agnès LEFRANC - INVS

### Jean-François DOUSSIN

Équipe MEREIA (Mesure et  
réactivité des espèces d'intérêt  
atmosphérique) Laboratoire  
interuniversitaire des systèmes  
atmosphériques  
Paris-Est-Créteil-Val-de-Marne  
(UPEC) - Institut Pierre-Simon-  
Laplace (IPSL)

### Pierre CELLIER

#### Directeur de recherche

UMR Environnement et grandes  
cultures - INRA

### George FAVRE

#### Chargé de programme R&D

Direction de la recherche  
scientifique et technologique  
LNE

### Jeanne GARRIC

#### Directeur de recherche

Centre de Lyon-Villeurbanne  
IRSTEA

### François GENSDARMES

#### Chef du laboratoire de physique et de métrologie des aérosols - IRSN

### Philippe GISLETTE

#### Directeur du CIRSEE

SUEZ Environnement

### Lucie LAMBOLEZ-MICHEL

Département du support  
scientifique

Direction des centres de recherche  
VEOLIA

### Christophe MINIER

#### Directeur adjoint de l'action scientifique et technique ONEMA

### Pierre LOIRET - MICHELIN

### Pascale ROBINEAU

#### Directrice des produits réglementaires

Direction du végétal et de  
l'environnement - ANSES

### Francis PETERS - MICHELIN

### Jérôme ROSE

Université de Marseille  
CEREGE UMR 7330 - CNRS

### Denis ZMIROU

Directeur du département  
santé-environnement-travail  
EHESP



## RISQUES DU SOL ET DU SOUS-SOL

### Jacques PIRONON

#### Président

Directeur UMR Géoressources  
7359 CNRS - Université de Lorraine

### Jean-Pierre RAJOT

#### Vice-Président

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

### Julien ALATERRE - Mairie de Paris

### Pascal BERNARD

#### Physicien - sismologue

Institut de physique du globe  
de Paris

### Robert CHARLIER

Département ArGenCo  
Université de Liège

### Hervé CUCHE - SOLVAY

### Guilhem DEVEZE

#### Chef division géologie- géotechnique - EDF

### Anne-Marie DUVAL - CEREMA

### Damien GOETZ

#### Directeur adjoint recherche Mines ParisTech

### Albin GUYON

Inspection générale des carrières  
Mairie de Paris

### Catherine JACQUARD

#### Directrice technique - FONDASOL

### François KALAYDJIAN

#### Directeur adjoint du centre de résultat ressources IFP Énergies nouvelles

### Véronique MERRIEN

#### SOUKATCHOF - CNAM

### Jacques MUDRY

### Frédéric PLAS

Directeur de recherche et  
développement - ANDRA



# 46 THÈSES DE DOCTORAT en cours à l'INERIS

## RISQUES CHRONIQUES

Prédiction des effets de substances chimiques sur la dynamique de population d'épinoches (2016-2019) – **Viviane DAVID**

MMSOA : Measurement and Modeling of Secondary Organic Aerosol Mesure et modélisation de l'aérosol organique secondaire. Sources et impact sur la qualité de l'air (2016-2019) – **Grazia-Maria LANZAFAME**

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

Évaluation de l'exposition fœtale aux substances chimiques grâce à la modélisation pharmacocinétique appliquée à la physiologie (PBPK). Applications aux données d'études de biosurveillance (2016-2019) – **Marc CODACCIONI**

Optimisation d'une approche d'évaluation des impacts environnementaux basée sur la mesure de biomarqueurs chez l'épinoche à trois épines (*Gasterosteus aculeatus*) (2016-2019) – **Audrey CATTEAU**

Pertinence écologique des biomarqueurs d'immunotoxicité en surveillance environnementale (2015-2018) – **Adrien MARCHAND**

Reconstruction de doses d'exposition pour des mélanges de substances chimiques ayant des métabolites communs : application à la famille des pyrèthrinoides (2015-2018) – **Paul QUINDROIT**

MAOCSA : Multi-site Aerosol Online Characterization and Source Apportionment (2016-2019) – **Yunjia ZHANG**

A computational model for predicting cellular barriers integrity (2014-2017) – **Nesrine GHARBI**

Étude de l'évolution des tumeurs astrocytaires sous l'effet des champs électromagnétiques radiofréquences (2014-2017) – **Nihal OUADAH**

Multistress et métabolisme énergétique chez l'épinoche : définition de biomarqueurs prédictifs des effets aux niveaux individuel et populationnel (2014-2017) – **Younes HANI**

Effets biologiques de ligands environnementaux du récepteur de la progestérone chez le poisson zèbre (2014-2017) – **Clémentine GAROCHE**

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

Le changement climatique : quels sont les processus les plus sensibles pour la composition atmosphérique particulière future en Europe ? (2014-2017) – **Vincent LEMAIRE**

Développement méthodologique pour l'analyse d'une large gamme de composés dans les milieux aquatiques (2014-2017) – **Daniel LEONCO**

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

Développement d'un outil intégré multi-échelle pour la construction d'indicateurs composites et la cartographie de l'exposition (2014-2017) – **Despoina IOANNIDOU**

Caractérisation de la réponse inflammatoire d'un poisson d'eau douce (*Rutilus rutilus*) : effet de stress chimiques et biologiques (2014-2017) – **Hakim SAMAI**

Modélisation de l'évolution multiphasique des composés organiques dans l'atmosphère : développement de schémas réduits pour les modèles de qualité de l'air (2014-2017) – **Victor LANNUQUE**

Phytostabilisation aidée d'un terrain de dépôt de sédiments et valorisation de la biomasse en bioénergie : comparaison de deux essais à grande échelle (2014-2017) – **Phonethip PHANTHAVONGSA**

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

Development and application of generic toxicokinetic models in fish to environmental risk assessment of chemicals / Développement de modèles toxicocinétiques pour des substances seules ou en mélange pour l'évaluation du risque environnemental (2015-2018) – **Audrey GRECH**

A model-based method to analyze ecotoxicology experiments in mesocosm (2013-2016) – **Charlène LELOUTRE**

Validation d'un système d'exposition des cellules aux aérosols de nanoparticules (2013-2016) – **Thomas LORET**

Intolérance environnementale idiopathique avec attribution aux champs électromagnétiques (IEI-CEM) : étude des systèmes endocrinien, nerveux autonome et immunitaire (2013-2016) – **Soafara ANDRIANOME**

Analyse d'aérosols par méthodes LIBS autocalibrée et LIBS couplée à une cellule radiofréquence utilisée comme piège à particules (2013-2016) – **Mohamed BOUDHIB**

Approche intégrée pour une évaluation multicritère des meilleures techniques disponibles (2013-2016) – **Damien EVRARD**

Compréhension des mécanismes d'émission et de transfert des CAP (composés aromatiques polycycliques) oxygénés des sols vers les eaux souterraines (2013-2016) – **Marine BOULANGE**

Étude des déterminants de l'adoption d'une innovation par les marchés en situation d'incertitude sur les risques santé/environnement : le cas des nanotechnologies (2014-2017) – **Mariia OSTAPCHUK**

Identification des principales sources de PM10 impactant le nord de la France : résultats pour le site urbain de Nogent-sur-Oise (2013-2016) – **Diogo OLIVEIRA**

## RISQUES ACCIDENTELS

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

Compréhension et prédiction des mécanismes d'incompatibilités chimiques à l'aide de la DFT (2016-2019) – **Eleonora MENICACCI**

Modélisation d'un jet gazeux chargé en nanoparticules issu d'une fuite sur une canalisation de transport (2014-2017) – **Hong Duc LE**

Développement d'une approche intégrée d'analyse des risques permettant de quantifier le degré de confiance (2015-2018) – **Houssein ABDO**

Positionnement et influence du service sécurité dans les industries à risques (2014-2017) – **Fanny GUENNOC**

Les signaux faibles : dépasser le problème de l'impossible prédictibilité (2012-2018) – **Jean ESCANDE**

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

Compréhension et modélisation de l'emballage thermique de batteries Li-ion neuves et vieilles (2013-2016) – **Sara ABADA**

Développement d'une approche prédictive pour la compréhension des propriétés amphiphiles des molécules issues de la bioraffinerie (2013-2016) – **Théophile GAUDIN**

Étude de l'influence de l'électrolyte sur la sécurité des batteries Li-ion (2014-2017) – **Coralie FORESTIER**

## RISQUES DU SOL ET DU SOUS-SOL

Modélisation explicite de l'initiation et la propagation de fractures (2014-2017) – **Jabrane HAMDJ**

Amélioration des outils de prévision du risque sismique dans les exploitations minières profondes (2015-2018) – **Francesca DE SANTIS**

Analyses expérimentale et numérique de la problématique multiphysique des fontis au voisinage d'un ouvrage hydraulique linéaire en terre (2016-2019) – **Jie YANG**

Renforcement de sol par géosynthétique dans les zones d'aléa fontis (2015-2018) – **Mouhamad HASSOUN**

Prédiction de l'effondrement localisé des cavités souterraines à l'aide de la modélisation numérique (2014-2017) – **Yaghkob IKEZOUHENE**

## LES INDICATEURS DE RECHERCHE DU CONTRAT D'OBJECTIFS 2011/2015

	2011	2012	2013	2014	2015	
	Réalisé	Réalisé	Réalisé	Réalisé	Cible	Réalisé
Part de l'activité de l'Institut consacrée à la recherche	19,4 %	20,3 %	19,6 %	20,3 %	> 20 %	19,60 %
Part des financements sur appel à projets de recherche dans les ressources publiques de la recherche (dont part des financements européens)	33,1 %	35,4 %	33,2 %	32,8 %	> 35 %	32,30 %
Nombre de titulaires d'une HDR	11	13	17	15	> 12	16
Nombre de publications dans des revues à comité de lecture référencées ISI	81	90	92	105	> 85	120
Part des contrats passés avec les industriels dans les ressources totales de la recherche	12,1 %	12,1 %	14,4 %	13 %	16 %	14,20 %
Nombre de doctorants	55	42	45	46	Sans cible	46
Nombre de démonstrateurs où l'INERIS intervient	4	4	5	7	6	7

# PUBLICATIONS

## RISQUES DU SOL ET DU SOUS-SOL

### 2015

**THORAVAL, Alain; LAHAIE, Franz; BROUARD, B.; BEREST, Pierre**

*A generic model for predicting long-term behavior of storage salt caverns after their abandonment as an aid to risk assessment*  
International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2015, 77 : p. 44-59

**LAGNY, Candice**

*Noxious gas emissions above former coal and iron mines in Lorraine due to the presence of iron sulphides*  
Environmental Earth Sciences, 2015, 74 (7) : p. 6303-6313

**GUO, Jianwei; QUINTARD, Michel; LAOUAFA, Farid**

*Dispersion in porous media with heterogeneous nonlinear reactions*  
Transport in Porous Media, 2015, 109 (3) : p. 541-570

**KINSCHER, Jannes**

*The analysis and interpretation of microseismicity induced by a collapsing solution mining cavity: A contribution for progress in hazard assessment of underground cavities*  
Thèse de doctorat. Université de Lorraine, 30/01/2015

**DE LANDRO, Grazia; AMOROSO, Ortensia; STABILE, Tony Alfredo; MATRULLO, Emanuela; LOMAX, Anthony; ZOLLO, Aldo**  
*High-precision differential earthquake location in 3-D models: evidence for a rheological barrier controlling the microseismicity at the Irpinia fault zone in southern Apennines*  
Geophysical Journal International, 2015, 203 (3) : p. 1821-1831

**NGHIEM, Luyen**

*Évaluation des dommages induits par des mouvements de terrain sur des structures en maçonnerie à l'aide de la modélisation physique*  
Thèse de doctorat. Université de Grenoble, 24/03/2015

**EDJOSSAN-SOSSOU, Abba-Mimi**

*Étude méthodologique de la prise en compte des incertitudes dans la gestion durable des risques naturels*  
Thèse de doctorat. Université de Lorraine, 14/12/2015

**OKHULKOVA, Tatiana**

*Insertion de l'incertitude et définition de seuils critiques pour l'analyse de risques du stockage du CO<sub>2</sub>*  
Thèse de doctorat. École centrale de Paris, 15/12/2015

### 2016

**DECK, Olivier; BALLAND, Cyrille; MOREL, Jacques; DE LA VAISSIERE, Rémi**

*Upper-bound and lower-bound solutions for the axisymmetric compression of a concrete plug*  
International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2016, 83 : p. 1-13

**SERHAL, Jamil; DECK, Olivier; AL HEIB, Marwan; HAGE CHEHADE, Fadi; YOUSSEF ABDEL MASSIH, Dalia**

*Damage of masonry structures relative to their properties: Development of ground movement fragility curves*  
Engineering Structures, 2016, 113 : p. 206-219

**GUO, Jianwei; LAOUAFA, Farid; QUINTARD, Michel**

*A theoretical and numerical framework for modeling gypsum cavity dissolution*  
International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2016, 40 (12) : p. 1662-1689

**AHMED, Samar S.; GUNZBURGER, Yann; RENAUD, Vincent; AL HEIB, Marwan**

*Initialization of highly heterogeneous virgin stress fields within the numerical modeling of large-scale mines*  
International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2016 : p. Accepted

**EDJOSSAN-SOSSOU, Abba-Mimi; AL HEIB, Marwan; DECK, Olivier; VERDEL, Thierry**

*Prise en compte des incertitudes dans l'évaluation de la durabilité des décisions de gestion des risques d'origine naturelle*  
MERAD, Myriam; DECHY, Nicolas; DEHOUCQ, Laurent; LASSAGNE, Marc - Risques majeurs, incertitudes et décisions. Approche pluridisciplinaire et multisectorielle. Paris : MA Éditions, 2016, p. 229-264

**KINSCHER, Jannes; CESCA, Simone; BERNARD, Pascal; CONTRUCCI, Isabelle; MANGENEY, Anne; PIGUET, Jack-Pierre; BIGARRE, Pascal**

*Resolving source mechanisms of microseismic swarms induced by solution mining*  
Geophysical Journal International, 2016, 206 (1) : p. 696-715

**LAFRANCE, Noémie; AUVRAY, Christophe; SOULEY, Mountaka; LABIOUSSE, Vincent**  
*Impact of weathering on macro-mechanical properties of chalk: Local pillar-scale study of two underground quarries in the Paris Basin*  
Engineering Geology, 2016, 213 (3-4) : p. 107-119

**YALCINKAYA, Esref; ALP, Hakan; OZEL, Oguz; GORGUN, Ethem; MARTINO, Salvatore; LENTI, Luca; BOURDEAU, Céline; BIGARRE, Pascal; COCCIA, Stella**  
*Near-surface geophysical methods for investigating the Buyukcekmece landslide in Istanbul, Turkey*  
Journal of Applied Geophysics, 2016, 134 : p. 23-35

**PORTER, Richard T.J.; MAHGEREFTEH, Haroun; BROWN, Solomon; MARTYNOV, Sergey; COLLARD, Alexander; WOOLLEY, Robert M.; FAIRWEATHER, Michael; FALLE, Samuel A.E.G.; WAREING, Christopher J.; NIKOLAIDIS, Ilias K.; BOULOUGOURIS, Georgios C.; PERISTERAS, Loukas D.; TSANGARIS, Dimitrios M.; ECONOMOU, Ioannis G.; SALVADOR, Carlos; ZANGANEH, Kourosh; WIGSTON, Andrew; NAJAFALI,**



John N.; SHAFEEN, Ahmed; BEIGZADEH, Ashkan; FARRET, Régis; GOMBERT, Philippe; HEBRARD, Jérôme; PROUST, Christophe; CERONI, Anthony; FLAUW, Yann; ZHANG, Yong Chun; CHEN, Shaoyun; YU, Jianliang;

TALEMI, Reza H.; BENSABAT, Jacob; LENNARD WOLF, Jan; REBSCHER, Dorothée; NIEMI, Auli; JUNG, Byeongju; MAC DOWELL, Niall; SHAH, Nilay; KOLSTER, Clea; MECHLERI, Eugenia; KREAVOR, Sam

*Techno-economic assessment of CO<sub>2</sub> quality effect on its storage and transport. CO<sub>2</sub>QUEST: An overview of aims, objectives and main findings* International Journal of Greenhouse Gas Control, 2016 : p. Accepted

## RISQUES CHRONIQUES

### 2015

TRUISI, Germaine L.; DI CONSIGLIO, Emma; PARMENTIER, Céline; SAVARY, Camille C.; POMPONIO, Giuliana; **BOIS, Frédéric Y.**; LAUER, Birthe; JOSSE, Rozenn; HEWITT, Philip G.; MUELLER, Stefan O.; RICHERT, L.; GUILLOUZO, André; TESTAI, Emanuela

*Understanding the biokinetics of ibuprofen after single and repeated treatments in rat and human in vitro liver cell systems* Toxicology Letters, 2015, 233 (2): p. 172-186

HAMON, Jeremy; RENNER, Maria; JAMEI, Masoud; LUKAS, Arno; KOPP-SCHNEIDER, Annette; **BOIS, Frédéric Y.**

*Quantitative in vitro to in vivo extrapolation of tissues toxicity*

Toxicology in Vitro, 2015, 30 (1): p. 203-216

WILLEMIN, Marie-Émilie; KADAR, Ali; DE SOUSA, Georges; LECLERC, E.; RAHMANI, Roger; **BROCHOT, Céline**

*In vitro human metabolism of permethrin isomers alone or as a mixture and the formation of the major metabolites in cryopreserved primary hepatocytes*

Toxicology in Vitro, 2015, 29 (4): p. 803-812

QUIGNOT, Nadia; HAMON, Jeremy; **BOIS, Frédéric Y.**

*Extrapolating in vitro results to predict human toxicity*

BAL-PRICE, Anna; JENNINGS, Paul - In vitro toxicology systems. New York: Springer, 2014, p. 531-550 (Methods in Pharmacology and Toxicology)

TENG, Sophie; BARCELLINI-COUGET, Sylvie; **BEAUDOUIN, Rémy**; **BROCHOT, Céline**; DESOUSA, G.; RHAMANI, R.; **PERY, Alexandre**

*BK/TD models for analyzing in vitro impedance data on cytotoxicity*

Toxicology Letters, 2015, 235 (2): p. 96-106

DUTILLEUL, Morgan; GOUSSEN, Benoît; BONZOM, Jean-Marc; GALAS, Simon; REALE, Denis

*Pollution breaks down the genetic architecture of life history traits in caenorhabditis elegans* PLoS One, 2015, 10 (2): p. art. e0116214

**BEAUDOUIN, Rémy**; GOUSSEN, Benoît; **PICCINI, Benjamin**; AUGUSTINE, Starlight; DEVILLERS, James; **BRION, François**; **PERY, Alexandre**

*An individual-based model of zebrafish population dynamics accounting for energy dynamics* PLoS One, 2015, 10 (5): p. art. e0125841

ELGRABLI, Dan; **BEAUDOUIN, Rémy**; JBILOU, Nawel; FLORIANI, Magali; **PERY, Alexandre**; ROGERIEUX, Françoise; **LACROIX, Ghislaine**

*Biodistribution and clearance of TiO<sub>2</sub> nanoparticles in rats after intravenous injection* PLoS One, 2015, 10 (4): p. art. e0124490

ROVIDA, Costanza; ALEPEE, Nathalie; API, Anne M.; BASKETTER, David; **BOIS, Frédéric Y.**; CALONI, Francesca; CORSINI, Emanuela; DANESHIAN, Mardas; ESKES, Chantra;

EZENDAM, Janine; FUCHS, Horst; HAYDEN, Patrick; HEGELE-HARTUNG, Christa; *ET AL.* *Integrated testing strategies (ITS) for safety assessment*

ALTEX - Alternatives to Animal Experimentations, 2015, 32 (1): p. 25-40

WILKS, M.F.; ROTH, N.; AICHER, L.; FAUST, M.; PAPADAKI, P.; MARCHIS, A.; CALLIERA, M.; GINEBREDI, A.; **ANDRES, Sandrine**; KUHNE, R.; SCHUURMANN, G.

*White paper on the promotion of an integrated risk assessment concept in European regulatory frameworks for chemicals* Science of the Total Environment, 2015, 521: p. 211-218

LIKHVAR, Victoria N.; PASCAL, Mathilde; MARKAKIS, Konstantinos; **COLETTE, Augustin**; HAUGLUSTAINE, Didier; VALARI, Myrto; KLIMONT, Zbigniew; MEDINA, Sylvia; KINNEY, Patrick

*A multi-scale health impact assessment of air pollution over the 21<sup>st</sup> century* Science of the Total Environment, 2015, 514: p. 439-449

KIESEWETTER, G.; BORKEN-KLEEFELD, J.; SCHOPP, W.; HEYES, C.; THUNIS, Philippe; **BESSAGNET, Bertrand**; TERRENOIRE, Étienne; FAGERLI, H.; NYIRI, Agnès; AMANN, Markus

*Modelling street level PM10 concentrations across Europe: source apportionment and possible futures* Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15 (3): p. 1539-1553

TERRENOIRE, Étienne; **BESSAGNET, Bertrand**; **ROUIL, Laurence**; **TOGNET, Frédéric**; PIROVANO, Guido; **LETINOIS, Laurent**; **BEAUCHAMP, Maxime**; **COLETTE, Augustin**; THUNIS, Philippe; AMANN, Markus; **MENUT, Laurent**

*High resolution air quality simulation over Europe with the chemistry transport model CHIMERE* Geoscientific Model Development, 2015, 8 (1): p. 21-42

KATRAGKOU, Eleni; GARCIA-DIEZ, Markel; VAUTARD, Robert; SOBOLOWSKI, Stefan; ZANIS, P.; ALEXANDRI, G.; CARDOSO,

Rita Margarida; **COLETTE, Augustin**;  
**FERNANDEZ, J.**; **Gobiet, Andreas**;  
**GOERGEN, Klaus**; **KARACOSTAS, Theodore**;  
**KNIST, Sebastian**; **MAYER, Stephanie**;  
**SOARES, P.M.M.**; **PYTHAROULIS, I.**;  
**TEGOULIAS, I.**; **TSIKERDEKIS, A.**; **JACOB, D.**  
*Regional climate hindcast simulations within  
EURO-CORDEX: evaluation of a WRF mul-  
ti-physics ensemble*  
Geoscientific Model Development, 2015, 8 (3):  
p. 603-618

**MIFFRE, A.**; **ANSELMO, Christophe**;  
**GEFFROY, Sylvain**; **FREJAFON, Émeric**;  
**RAIROUX, Pierre**

*Lidar remote sensing of laser-induced  
incandescence on light absorbing particles in  
the atmosphere*

Optics Express, 2015, 23 (3): p. 2347-2360

**LE BIHAN, Olivier**; **USTACHE, Aurélien**;  
**BERNARD, Daniel**; **AGUERRE-CHARIOL,  
Olivier**; **MORGENEYER, Martin**

*Experimental study of the aerosolization from  
a carbon nanotube bulk by a vortex shaker*  
Journal of Nanomaterials, 2014 : p. Art. 193154

**CARVALHO, Raquel N.**; **ARUKWE,  
Augustine**; **AIT-AISSA, Selim**; **BADO-  
NILLES, Anne**; **BALZAMO, Stefania**; **BAUN,  
Anders**; **BELKIN, Shimshon**; **BLAHA,  
Ludek**; **BRION, François**; **CONTI, Daniela**;  
**CREUSOT, Nicolas**; **ESSIG, Yona**; **FERRERO,  
Valentina E.V.**; **FLANDER-PUTRLE, Vesna**;  
**FURHACKER, Maria**; **GRILLARI-VOGLAUER,  
Regina**; **HOGSTRAND, Christer**; **JONAS,  
Adam**; **KHARLYNGDOH, Joubert B.**; **LOOS,  
Robert**; **LUNGBYE, Anne-Katrine**; **MODIG,  
Carina**; **OLSSON Per-Erik**; **PILLAI, Smitha**;  
**POLAK, Natasa**; **POTALIVO, Monica**;  
**SANCHEZ, Wilfried**; **ET AL.**

*Mixtures of Chemical Pollutants at European  
Legislation Safety Concentrations: How Safe  
Are They?*

Toxicological Sciences, 2014, 141 (1): p. 218-233

**KAH, Olivier**; **PELLEGRINI, Élisabeth**;  
**VAILLANT, Colette**; **BRION, François**

*Estrogènes, xénoestrogènes et neurogenèse  
chez le poisson zèbre: un modèle sentinelle  
pertinent en santé humaine?*

Correspondances en métabolisme, hormones,  
diabète et nutrition, 2014, 18 (9): p. 258-261

**BEYLOT, Antoine**; **VAXELAIRE, Stéphane**;  
**ZDANEVITCH, Isabelle**; **AUVINET, Nicolas**;  
**VILLENEUVE, Jacques**

*Life cycle assessment of mechanical biological  
pre-treatment of municipal solid waste: a case study*  
Waste Management, 2015, 39: p. 287-294

**NGO, Viet V.**; **MICHEL, Julien**; **LUCAS, Lise**;  
**LATIFI, Abderrazak**; **SIMONNOT, Marie-Odile**  
*Sensitivity, estimability and correlation of  
parameters describing equilibrium and none-  
equilibrium transports of bromide tracer in the  
field lysimeter*

European Journal of Environmental and Civil  
Engineering, 2015, 19 (4): p. 445-466

**VIGNET, Caroline**; **JOASSARD, Lucette**;  
**LYPHOUT, Laura**; **GUIONNET, Tiphaine**;  
**GOUBEAU, Manon**; **LE MENACH, Karyn**;  
**BRION, François**; **KAH, Olivier**; **CHUNG,  
Bon-Chu**; **BUDZINSKI, Hèleène**; **BEGOUT,  
Marie-Laure**; **COUSIN, Xavier**

*Exposures of zebrafish through diet to three  
environmentally relevant mixtures of PAHs  
produce behavioral disruptions in unexposed  
F1 and F2 descendant*

Environmental Science and Pollution Research,  
2015, 22 (21): p. 16371-16383

**LE FOL, Vincent**; **AIT-AISSA, Selim**;  
**CABATON, Nicolas**; **DOLO, Laurence**;  
**GRIMALDI, Marina**; **BALAGUER, Patrick**;  
**PERDU, Elisabeth**; **DEBRAUWER, Laurent**;  
**BRION, François**; **ZALCO, Daniel**

*Cell-specific biotransformation of benzophe-  
none-2 and bisphenol-s in zebrafish and  
human in vitro models used for toxicity and  
estrogenicity screening*

Environmental Science & Technology, 2015,  
49 (6): p. 3860-3868

**HUGUIER, Pierre**; **MANIER, Nicolas**;  
**CHABOT, Laure**; **BAUDA, Pascale**;  
**PANDARD, Pascal**

*Ecotoxicological assessment of organic wastes  
spread on land: Towards a proposal of a sui-  
table test battery*

Ecotoxicology and Environmental Safety,  
2015, 113: p. 103-111

**BRACK, Werner**; **ALTENBURGER, Rolf**;  
**SCHUURMANN, Gerrit**; **KRAUSS, Martin**;  
**HERRAEZ, David Lopez**; **VAN GILS, Jos**;  
**SLOBODNIK, Jaroslav**; **MUNTHE, John**;  
**GAWLIK, Bernd Manfred**; **VAN WEZEL,  
Annemarie**; **SCHRIKS, Merijn**; **HOLLENDER,  
Juliane**; **TOLLEFSEN, Knut Erik**; **MEKENYAN,  
Ovanes**; **DIMITROV, Saby**; **BUNKE, Dirk**;  
**COUSINS, Ian**; **POSTHUMA, Leo**; **DULIO,  
Valeria**; **ET AL.**

*The SOLUTIONS project: Challenges and res-  
ponses for present and future emerging pollu-  
tants in land and water resources management*  
Science of the Total Environment, 2015, 503  
(Special issue): p. 22-31

**BOSSA, Nathan**; **CHAURAND, Perrine**;  
**VICENTE, Jérôme**; **BORSCHNECK, Daniel**;  
**LEVARD, Clément**; **AGUERRE-CHARIOL,  
Olivier**; **ROSE, Jérôme**

*Micro- and nano-X-ray computed-tomogra-  
phy: A step forward in the characterization of  
the pore network of a leached cement paste*  
Cement & Concrete Composites, 2015, 67: p.  
138-147

**OUNOUGHENE, Ghania**; **LE BIHAN,  
Olivier**; **CHIVAS-JOLY, Carine**; **MOTZKUS, C.**;  
**LONGUET, C.**; **DEBRAY, Bruno**; **JOUBERT, A.**;  
**LE COQ, Laurence**; **LOPEZ-CUESTA, José-Marie**  
*Behavior and fate of halloysite nanotubes (HNTs)  
when incinerating PA6 / HNTs nanocomposite*  
Environmental Science & Technology, 2015,  
49 (9): p. 5450-5457

**SCHAAP, M.**; **CUVELIER, C.**; **HENDRIKS, C.**;  
**BESSAGNET, Bertrand**; **BALDASANO, J.M.**;  
**COLETTE, Augustin**; **THUNIS, P.**; **KARAM,  
D.**; **FAGERLI, H.**; **GRAFF, A.**; **KRANENBURG,  
R.**; **NYIRI, A.**; **PAY, M.T.**; **ROUIL, Laurence**;  
**SCHULZ, M.**; **SIMPSON, D.**; **STERN, R.**;  
**TERRENOIRE, Étienne**; **WIND, P.**

*Performance of European chemistry transport  
models as function of horizontal resolution*  
Atmospheric Environment, 2015, 112: p. 90-105

**MENUT, Laurent**; **MAILLER, S.**; **SIOUR,  
Guillaume**; **BESSAGNET, Bertrand**;  
**TURQUETY, Solène**; **REA, G.**; **BRIANT, R.**;  
**MALLET, M.**; **SCIARE, Jean**; **FORMENTI, P.**;  
**MELEUX, Frédéric**

*Ozone and aerosol tropospheric concentrations  
variability analyzed using the ADRIMED mea-  
surements and the WRF and CHIMERE models*  
Atmospheric Chemistry and Physics, 2015,  
15 (11): p. 6159-6182

**BRICKS, Thibault**; **HAMON, Jeremy**; **FLEURY,  
Marie-José**; **JELLALI, Rachid**; **MERLIER,  
Franck**; **HERPE, Yves Édouard**; **SEYER,  
Alexandre**; **REGIMBEAU, Jean-Marc**; **BOIS,  
Frédéric Y.**; **LECLERC, Éric**

*Investigation of omeprazole and phenacetin first-  
pass metabolism in humans using a microscale  
bioreactor and pharmacokinetic models*  
Biopharmaceutics & Drug Disposition, 2015,  
36 (5): p. 275-293

LECLERC, Éric; HAMON, Jeremy; CLAUDE, Isabelle; JELLALI, Rachid; NAUDOT, Marie; **BOIS, Frédéric Y.**

*Investigation of acetaminophen toxicity in HepG2/ C3a microscale cultures using a system biology model of glutathione depletion*  
Cell Biology and Toxicology, 2015, 31 (3): p. 173-185

**GOUSSEN, Benoît; BEAUDOUIN, Rémy; DUTILLEUL, Morgan; BUISSET-GOUSSEN, Adeline; BONZOM, Jean-Marc; PERY, Alexandre**

*Energy-based modelling to assess effects of chemicals on Caenorhabditis elegans: A case study on uranium*  
Chemosphere, 2015, 120: p. 507-514

**BADO-NILLES, Anne; JOLLY, Sabrina; LAMAND, Florent; GEFFARD, Alain; GAGNAIRE, Béatrice; TURIÉS, Cyril; PORCHER, Jean-Marc; SANCHEZ, Wilfried; BETOULLE, Stéphane**

*Involvement of fish immunomarkers in environmental biomonitoring approach: Urban and agri-viticultural context*  
Ecotoxicology and Environmental Safety, 2015, 120: p. 35-40

**CAULIER, Morgane; BRION, François; CHADILI, Edith; TURIÉS, Cyril; PICCINI, Benjamin; PORCHER, Jean-Marc; GUIGUEN, Yann; HINFRAY, Nathalie**

*Localization of steroidogenic enzymes and Foxl2a in the gonads of mature zebrafish (Danio rerio)*  
Comparative Biochemistry and Physiology. Part A- Molecular & Integrative Physiology, 2015, 188: p. 96-106

**BEAUCHAMP, Maxime; MALHERBE, Laure; DE FOUQUET, Chantal**

*A pragmatic approach to estimate the number of days in exceedance of PM10 limit value*  
Atmospheric Environment, 2015, 111: p. 79-93

**MEYER-MONATH, Marie; CHATELLIER, Claudine; CABOOTER, Deirdre; ROUGET, Florence; MOREL, Isabelle; LESTREMAU, François**

*Development of liquid chromatography methods coupled to mass spectrometry for the analysis of substances with a wide variety of polarity in meconium*  
Talanta, 2015, 138: p. 231-239

**DUTOUQUET, Christophe**

*LIBS detection of nanomaterials for process control and in the workplace*  
Spectroscopy, 2015, 30 (4): p. 24-33

FROHLICH, Roman; CRENN, Vincent; SETYAN, Ari; BELIS, Claudio A.; CANONACO, Francesco; **FAVEZ, Olivier; ET AL.**

*ACTRIS ACSM intercomparison - Part 2: Intercomparison of ME-2 organic source apportionment results from 15 individual, co-located aerosol mass spectrometers*  
Atmospheric Measurement Techniques, 2015, 8 (6): p. 2555-2576

**SHANDILYA, Neeraj; MORGENEYER, Martin; LE BIHAN, Olivier**

*First development to model aerosol emission from solid surfaces subjected to mechanical stresses: II. Experiment - theory comparison, simulation and sensibility analysis*  
Journal of Aerosol Science, 2015, 89: p. 1-17

**PAGET, Vincent; DEKALI, Samir; KORTULEWSKI, Thierry; GRALL, Romain; GAMEZ, Christelle; BLAZY, Kelly; AGUERRE-CHARIOL, Olivier; CHEVILLARD, Sylvie; BRAUN, Anne; RAT, Patrice; LACROIX, Ghislaine**

*Specific uptake and genotoxicity induced by polystyrene nanobeads with distinct surface chemistry on human lung epithelial cells and macrophages*  
PLoS One, 2015, 10 (4): p. art. e0123297

**HETTELINGH, Jean-Paul; POSCH, Maximilian; SLOOTWEG, Jaap; REINDS, Gert Jan; DE WRIES, Wim; LE GALL, Anne-Christine; MAAS, Rob**

*Effects-based integrated assessment modelling for the support of european air pollution abatement policies*  
DE VRIES, Wim; HETTELINGH, Jean-Paul; POSCH, Maximilian - Critical Loads and Dynamic Risk Assessments: Nitrogen, Acidity and Metals in Terrestrial and Aquatic Ecosystems. Dordrecht: Springer, 2015, p. 613-635

**CHEVALIER, Julie; HARSCOET, Élodie; KELLER, Merlin; PANDARD, Pascal; CACHOT, Jérôme; GROTE, Matthias**

*Exploration of Daphnia behavioral effect profiles induced by a broad range of toxicants with different modes of action*  
Environmental Toxicology and Chemistry, 2015, 34 (8): p. 17601769

**SOFIEV, Mikhail; BERGER, U.; PRANK, Marje; VIRA, Julius; ARTETA, J.; BELMONTE, J.; BERGMANN, Karl-Christian; CHEROUX, F.; ELBERN, H.; FRIESE, E.; GALAN, C.; GEHRIG, Robert; KHVOROSTYANOV, Dmitry;**

**KRANENBURG, R.; KUMAR, U.; MARECAL, V.; MELEUX, Frédéric; MENUT, Laurent; PESSI, A.M.; ROBERTSON, L.; RITENBERGA, O.; RODINKOVA, V.; SAARTO, A.; SEGERS, A.; SEVEROVA, E.; SAULIENE, I.; SILJAMO, P.; STEENSEN, B.M.; TEINEMAA, E.; THIBAUDON, Michel; PEUCH, Vincent-Henri**

*MACC regional multi-model ensemble simulations of birch pollen dispersion in Europe*  
Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15 (4): p. 8115-8130

**BOUTIN, Marion; LAMAZE, Thierry; COUVIDAT, Florian; PORNON, André**  
*Subalpine Pyrenees received higher nitrogen deposition than predicted by EMEP and CHIMERE chemistry-transport models*  
Scientific Reports, 2015, 5: p. art. 12942

**MONKS, P.; ARCHIBALD, A.T.; COLETTE, Augustin; COOPER, O.; COYLE, M.; DERWENT, R.; FOWLER, D.; GRANIER, C.; LAW, K.S.; MILLS, G.E.; STEVENSON, D.S.; TARASOVA, O.; THOURET, V.; VON SCHNEIDEMESSER, E.; SOMMARIVA, R.; WILD, O.; WILLIAMS, M.L.**

*Tropospheric ozone and its precursors from the urban to the global scale from air quality to short-lived climate forcer*  
Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15 (15): p. 8889-8973

**PETERSEN, Elijah J.; DIAMOND, Stephen A.; KENNEDY, Alan J.; GOSS, Greg G.; HO, Kay; LEAD, Jamie; HANNA, Shannon K.; HARTMANN, Nanna B.; HUND-RINKE, Kerstin; MADER, Brian; MANIER, Nicolas; PANDARD, Pascal; SALINAS, Edward R.; SAYRE, Phil**  
*Adapting OECD aquatic toxicity tests for use with manufactured nanomaterials: key issues and consensus recommendations*  
Environmental Science & Technology, 2015, 49 (16): p. 9532-9547

**LAFOREST, Valérie; GAUCHER, Rodolphe**  
*Directive sur les émissions industrielles (IED) et meilleures techniques disponibles*  
Techniques de l'ingénieur. Paris: Éditions Techniques de l'ingénieur, 2015, p. G4097

**PETITDANT, Nicolas**  
*Exploration des effets neuro-toxicologiques des ondes radiofréquences du téléphone portable au cours du développement sain et pathologique chez le rat*  
Thèse de doctorat. Institut des sciences et industries du vivant et de l'environnement, 10/03/2015

- NOGUEIRA, Eugénia; MANGIALAVORI, Irene C.; LOUREIRO, Ana; AZOIA, Nuno G.; SAARRIA, Marisa P.; NOGUEIRA, Patricia; FREITAS, Jaime; HARMARK, Johan; SHIMANOVICH, Ulyana; ROLLETT, Alexandra; **LACROIX, Ghislaine**; BERNARDES, Goncalo J.L.; GUEBITZ, Georg; HEBERT, Hans; MOREIRA, Alexandra; CARMO, Alexandre M.; ROSSI, Juan Pablo; GOMES, Andreia C.; PRETO, Ana; CAVACO-PAULO, Artur  
*Peptide Anchor for Folate-Targeted Liposomal Delivery*  
Biomacromolecules, 2015, 16 (9): p. 2904-2910
- TOURNIER, Mikael; POUÉCH, Charline; **QUIGNOT, Nadia**; LAFAY, Florent; WIEST, Laure; **LEMAZURIER, Emmanuel**; CREN-OLIVE, Cécile; VULLIET, Emmanuelle  
*Determination of endocrine disruptors and endogenous androgens and estrogens in rat serum by high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry*  
Steroids, 2015, 104: p. 252-262
- SEWELL, Fiona; RAGAN, Ian; MARCZYLO, Tim; ANDERSON, Brian; **BRAUN, Anne**; CASEY, Warren; DENNISON, Ngaire; GRIFFITHS, David; GUEST, Robert; HOLMES, Tom; VAN HUYGEVOORT, Ton; INDANS, Ian; KENNY, Terry; KOJIMA, Hajime; LEE, Kyuhong; PRIETO, Pilar; SMITH, Paul; SMEDLEY, Jason; STOKES, William S.; WNOROWSKI, Gary; HORGAN, Graham  
*A global initiative to refine acute inhalation studies through the use of 'evident toxicity' as an endpoint: Towards adoption of the fixed concentration procedure*  
Regulatory Toxicology and Pharmacology, 2015, 73 (3): p. 770-779
- COTEL, Solenn; SCHAFFER, Gerhard; TRAVERSE, Sylvie; MARZOUGUI-JAAFAR, Salsabil; **GAY, Guillaume**; RAZAKARISOA, Olivier  
*Evaluation of VOC fluxes at the soil-air interface using different flux chambers and a quasi-analytical approach*  
Water Air and Soil Pollution, 2015, 226 (11): p. Art. 356
- SAIB, Mahdi-Salim**; CAUDEVILLE, Julien; **BEAUCHAMP, Maxime**; CARRE, Florence; GANRY, Olivier; TRUGEON, Alain; CICOLELLA, André  
*Building spatial composite indicators to analyze environmental health inequalities on a regional scale*  
Environmental Health, 2015, 14: p. Art. 68
- HUGUET, Stéphanie; ISAURE, Marie-Pierre; **BERT, Valérie**; LABOUDIGUE, Agnès; PROUX, Olivier; FLANK, Anne-Marie; VANTELON, Delphine; SARRET, Géraldine  
*Fate of cadmium in the rhizosphere of Arabidopsis halleri grown in a contaminated dredged sediment*  
Science of the Total Environment, 2015, 536: p. 468-480
- KIDD, Petra; MENCH, Michel; ALVAREZ-LOPEZ, Vanessa; **BERT, Valérie**; DIMITRIOU, Ioannis; FRIESL-HANL, Wolfgang; HERZIG, Rolf; JANSSEN, Jolien Olga; KOLBAS, Aliaksandr; MULLER, Ingo; NEU, Silke; RENELLA, Giancarlo; RUTTENS, Ann; VANGRONSVELD, Jaco; PUSCHENREITER, Markus  
*Agronomic practices for improving gentle remediation of trace element-contaminated soils*  
International Journal of Phytoremediation, 2015, 17 (11): p. 1005-1037
- MARCHAND, Lilian; LAMY, Pierre; **BERT, Valérie**; QUINTELAS-SABARIS, Celestino; MENCH, Michel  
*Potential of Ranunculus acris L. for biomonitoring trace element contamination of riverbank soils: photosystem II activity and phenotypic responses for two soil series*  
Environmental Science and Pollution Research, 2016, 23 (4): p. 3104-3119
- BELIS, Claudio A.; KARAGULIAN, F.; AMATO, Fulvio; ALMEIDA, M.; ARTAXO, P.; BEDDOWS, D.C.S.; BERNARDONI, V.; BOVE, M.C.; CARBONE, S.; CESARI, D.; CONTINI, D.; CUCCIA, E.; DIAPOULI, E.; ELEFTHERIADIS, K.; **FAVEZ, Olivier**; EL HADDAD, Imad; HARRISON, Roy M.; HELLEBUST, S.; HOVORKA, J.; JANG, E.; JORQUERA, H.; KAMMERMEIER, T.; KARL, M.; LUCARELLI, F.; MOOIBROEK, D.; NAVA, S.; NOJGAARD, J.K.; PAATERO, P.; PANDOLFI, M.; PERRONE, M.G.; **PETIT, Jean-Eudes**; PIETRODANGELO, A.; POKOMA, P.; PRATI, P.; PREVOT, A.S.H.; QUASS, U.; QUEROL, Xavier; SARAGA, D.; SCIARE, Jean; SFETSOS, A.; VALLI, G.; VECCHI, Roberta  
*A new methodology to assess the performance and uncertainty of source apportionment models II: The results of two European intercomparison exercises*  
Atmospheric Environment, 2015, 123 (A): p. 240-250
- PERE, Jean-Christophe; **BESSAGNET, Bertrand**; PONT, Véronique; MALLET, Marc; MINVIELLE, F.  
*Influence of the aerosol solar extinction on photochemistry during the 2010 Russian wildfires episode*  
Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15 (19): p. 10983-10998
- MARECAL, V.; PEUCH, Vincent-Henri; ANDERSSON, C.; ANDERSSON, S.; ARTETA, J.; BEEKMANN, Matthias; BENEDICTOW, A.; BERGSTROM, R.; **BESSAGNET, Bertrand**; CANSADO, A.; CHEROUX, F.; **COLETTE, Augustin**; COMAN, Adriana; CURIER, R.L.; DENIER VAN DER GON, Hugo; DROUIN, A.; ELBERN, H.; EMILI, E.; ENGELEN, R.J.; ESKE, H.; FORET, Gilles; FRIESE, E.; GAUSS, Michael; GIANNAROS, C.; GUTH, J.; JOLY, M.; JAUMOUILLE, E.; JOSSE, B.; KADYGROV, N.; KAISER, J.W.; KRAJSEK, K.; KUENEN, J.; KUMAR, U.; LIORA, N.; LOPEZ, E.; **MALHERBE, Laure**; MARTINEZ, I.; MELAS, D.; **MELEUX, Frédéric**; MENUT, Laurent; MOINAT, P.; MORALES, T.; PARMENTIER, J.; PIACENTINI, A.; PLU, M.; POUPKOU, A.; QUEGUINER, S.; ROBERTSON, L.; **ROUIL, Laurence**; SCHAAP, M.; SEGERS, A.; SOFIEV, Mikhail; TARASSON, L.; THOMAS, M.; TIMMERMANS, R.; VALDEBENITO, A.; VAN VELTHOVEN, Peter; VAN VERSEDAAL, R.; VIRA, J.; UNG, Anthony  
*A regional air quality forecasting system over Europe: the MACC-II daily ensemble production*  
Geoscientific Model Development, 2015, 8: p. 2777-2813
- SHANDILYA, Neeraj**; MORGENEYER, Martin; **LE BIHAN, Olivier**  
*First development to model aerosol emission from solid surfaces subjected to mechanical stresses: I. Development and results*  
Journal of Aerosol Science, 2015, 89: p. 43-57
- BRESSOT, Christophe**; **SHANDILYA, Neeraj**; NOGUEIRA, Eugénia; CAVACO-PAULO, Artur; MORGENEYER, Martin; **LE BIHAN, Olivier**; **AGUERRE-CHARIOL, Olivier**  
*Exposure assessment based recommendations to improve nanosafety at nanoliposome production sites*  
Journal of Nanomaterials, 2015: p. Art. 931405
- GOUSSEN, Benoît; **PERY, Alexandre**; BONZOM, Jean-Marc; **BEAUDOUIN, Remy**  
*Transgenerational adaptation to pollution changes energy allocation in populations of nematodes*

Environmental Science & Technology, 2015, 49 (20): p. 12500-12508

**SLOBODNIK, Jaroslav; DULIO, Valeria**  
NORMAN Association: A network approach to scientific collaboration on emerging contaminants and their transformation products in Europe  
LAMBROPOULOU, Dimitra A.; NOLLET, Leo M. - Transformation Products of Emerging Contaminants in the Environment: Analysis, Processes, Occurrence, Effects and Risks. NC: Wiley, 2014, p. 915-926

**BOTTA, Fabrizio**

À la recherche de micropolluants dans les cours d'eau: l'échantillonnage  
EUZEN, Agathe; JEANDEL, Catherine; MOSSERI, Rémy - L'Eau à découvert. Paris: CNRS, 2015, p. 214-215

**POHL, Korinna; DULIO, Valeria; BOTTA, Fabrizio; SCHWARZBAUER, Jan; RUDEL, Heinz**  
Environmental monitoring of biocides in Europe - compartment-specific strategies. Workshop report  
Schmallenberg: Fraunhofer IME, 2015

**BOIS, Frédéric Y.; GAYRAUD, Ghislaine**  
Probabilistic generation of random networks taking into account information on motifs occurrence  
Journal of Computational Biology, 2015, 22 (1): p. 25-36

**CREAN, Daniel; BELLWON, Patricia; ASCHAUER, Lydia; LIMONCIEL, Alice; MOENKS, Konrad; HEWITT, Philip; SCHMIDT, Tobias; HERRGEN, Karin; DEKANT, Wolfgang; LUKAS, Arno; BOIS, Frédéric Y.; WILMES, Anja; JENNINGS, Paul; LEONARD, Martin O.**  
Development of an in vitro renal epithelial disease state model for xenobiotic toxicity testing  
Toxicology in Vitro, 2015, 30 (1): p. 128-137

**WILMES, Anja; BIELOW, Chris; RANNINGER, Christina; BELLWON, Patricia; ASCHAUER, Lydia; LIMONCIEL, Alice; CHASSAIGNE, Hubert; KRISTL, Theresa; AICHE, Stephan; HUBER, Christian G.; GUILLLOU, Claude; HEWITT, Philip; LEONARD, Martin O.; DEKANT, Wolfgang; BOIS, Frédéric Y.; JENNINGS, Paul**  
Mechanism of cisplatin proximal tubule toxicity revealed by integrating transcriptomics, proteomics, metabolomics and biokinetics  
Toxicology in Vitro, 2015, 30 (1): p. 117-127

**POMPONIO, Giuliana; SAVARY, Camille C.; PARMENTIER, Céline; BOIS, Frédéric Y.; GUILLLOUZO, André; ROMANELLI, Luca; RICHERT, Lysiane; DI CONSIGLIO, Emma; TESTAI, Emanuela**

In vitro kinetics of amiodarone and its major metabolite in two human liver cell models after acute and repeated treatments  
Toxicology in Vitro, 2015, 30 (1): p. 36-51

**SELMAOUI, Brahim; SACKETT-LUNDEEN, Linda; HAUS, Erhard; TOUITOU, Yvan**  
Large intra-individual variability of plasma cytokines in healthy young men: a two 24-h study over a month  
Biological Rhythm Research, 2016, 47 (2): p. 267-273

**LE GUERNIC, Antoine**

Effets sublétaux d'une contamination métallique liée à des rejets miniers uranifères sur l'épinoche à trois épines (*Gasterosteus aculeatus* L.). Implication dans la susceptibilité envers un stress biologique  
Thèse de doctorat. Université de Reims Champagne-Ardenne, 24/11/2015

**SONAVANE, Manoj**

Intérêt d'une approche combinant bioessais in vitro et in vivo chez le poisson zèbre pour l'identification de perturbateurs endocriniens dans l'environnement aquatique  
Thèse de doctorat. Institut des sciences et industries du vivant et de l'environnement (AgroParisTech), 07/12/2015

**TOMAZ, Sophie**

Étude des composés polyaromatiques dans l'atmosphère. Caractérisation moléculaire et processus réactionnels en lien avec l'aérosol organique  
Thèse de doctorat. Université de Bordeaux 1, 17/12/2015

**LE FOL, Vincent**

Approche in vivo / in vitro du métabolisme de perturbateurs endocriniens chez le poisson zèbre (*Danio rerio*)  
Thèse de doctorat. Université de Toulouse, 17/12/2015

**SHANDILYA, Neeraj**

Study of the (nano) particles emission during mechanical solicitation and environmental weathering of the products  
Thèse de doctorat. Université de technologie de Compiègne, 15/01/2015

**BOSSA, Nathan**

Nanotechnologies et matériaux de construction: mécanismes de relargage des nanomatériaux durant l'utilisation et la dégradation des ciments photocatalytiques  
Thèse de doctorat. Université d'Aix-Marseille 3, 22/05/2015

**CARDOSO, Olivier**

Vers un suivi des effluents industriels basé sur la mesure des effets induits chez le poisson: cas de l'industrie du médicament  
Thèse de doctorat. Université de Reims Champagne-Ardenne, 24/09/2015

**CAULIER, Morgane**

Localisation et expression d'enzymes de la stéroïdogenèse et de régulateurs transcriptionnels dans les gonades du poisson zèbre: intérêt d'une approche basée sur l'imagerie en microscopie  
Thèse de doctorat. Université de Namur, 13/05/2015

**CARRIOT, Paul; MERAD, Myriam**

Évaluer la concertation dans le domaine des risques et de l'environnement. Éléments méthodologiques  
Paris: AFITE, 2015

**CRENN, Vincent; SCIARE, Jean;**

**CROTEAU, Philip; VERLHAC, Stéphane; FROHLICH, Roman; BELIS, Claudio A.; AAS, W.; AIJALA, M.; ALASTUEY, Andres; ARTINANO, B.; BAISNEE, Dominique; BONNAIRE, Nicolas; BRESSI, M.; CANAGARATNA, Manjula; CANONACO, Francesco; CARBONE, C.; CAVALLI, F.; COZ, E.; CUBISON, M.J.; ESSER-GIETL, J.K.; GREEN, D.C.; GROS, Valérie; HEIKKINEN, L.; HERRMANN, H.; LUNDER, C.; MINGUILLON, M.C.; MOCNIK, Grisa; O'DOWD, C.D.; OVADNEVAITE, J.; PETIT, Jean-Eudes; PETRALIA, E.; POULAIN, L.; PRIESTMAN, M.; RIFFAULT, Véronique; RIPOLL, A.; SARDA-ESTEVE, Roland; SLOWIK, Jay G.; SETYAN, Ari; WIEDENSOHLER, A.; BALTENSPERGER, U.; PREVOT, André S.H.; JAYNE, J.T.; FAVEZ, Olivier**

ACTRIS ACSM intercomparison - Part 1: Reproducibility of concentration and fragment results from 13 individual Quadrupole Aerosol Chemical Speciation Monitors (Q-ACSM) and consistency with co-located instruments  
Atmospheric Measurement Techniques, 2015, 8 (12): p. 5063-5087



## 2016

WILLEMEN, Marie-Émilie; DESMOTS, Sophie; LE GRAND, Rozenn; LESTREMAU, François; ZEMAN, Florence Anna; LECLERC, Eric; MOESCH, Christian; BROCHOT, Céline

*PBPK modeling of the cis- and trans-permethrin isomers and their major urinary metabolites in rats*  
Toxicology and Applied Pharmacology, 2016, 294: p. 65-77

WIGH, Adriana; DEVAUX, Alain; BROSSELIN, Vanessa; GONZALEZ-OSPINA, Adriana; DOMENJOU, Bruno; AIT-AISSA, Selim; CREUSOT, Nicolas; GOSSET, Antoine; BAZIN, Christine; BONY, Sylvie

*Proposal to optimize ecotoxicological evaluation of wastewater treated by conventional biological and ozonation processes*  
Environmental Science and Pollution Research, 2016, 23 (4): p. 3008-3017

BELLWON, Patricia; TRUISI, Germaine L.; BOIS, Frédéric Y.; WILMES, Anja; SCHMIDT, Tobias; SAVARY, Camille C.; PARMENIER, Céline; HEWITT, Philip G.; SCHMAL, Olga; JOSSE, Rozenn; RICHERT, Lysiane; GUILLOUZO, André; MUELLER, Stefan O.; JENNINGS, Paul; TESTAI, Emanuela; DEKANT, Wolfgang

*Kinetics and dynamics of cyclosporine A in three hepatic cell culture systems*  
Toxicology in Vitro, 2015, 30 (1): p. 62-78

LECLERC, Éric; HAMON, Jeremy; BOIS, Frédéric Y.  
*Investigation of ifosfamide and chloroacetaldehyde renal toxicity through integration of in vitro liver-kidney microfluidic data and pharmacokinetic-system biology models*  
Journal of Applied Toxicology, 2016, 36 (2): p. 330-339

JAFFAL, Ali; BÉTOULLE, Stéphane; BIAGIANTI-RISBOURG, Sylvie; TERREAU, Alexandre; SANCHEZ, Wilfried; PARIS-PALACIOS, Séverine

*Heavy metal contamination and hepatic toxicological responses in brown trout (Salmo trutta) from the Kerguelen Islands*  
Polar Research, 2015, 34: p. Art. 22784

NEALE, Peta A.; AIT-AISSA, Selim; BRACK, Werner; CREUSOT, Nicolas; DENISON, Michael S.; DEUTSCHMANN, Bjorn; HILSCHEROVA, K.; HOLLERT, Henner; KRAUSS, Martin; NOVAK, Jiri; SCHULZE, Tobias; SEILER, Thomas B.; SERRA, Hélène; SHAO, Ying; ESCHER, Beate I.

*Linking in vitro effects and detected organic micropollutants in surface water using mixture-toxicity modeling*  
Environmental Science & Technology, 2015, 49 (24): p. 14614-14624

BRACK, Werner; AIT-AISSA, Selim; BURGESS, Robert M.; BUSCH, Wibke; CREUSOT, Nicolas; DI PAOLO, Carolina; ET AL.

*Effect-directed analysis supporting monitoring of aquatic environments. An in-depth overview*  
Science of the Total Environment, 2016, 544: p. 1073-1118

HERMANN, Joerg; LORUSSO, Antonella; PERRONE, Alessio; STRAFELLA, Francesco; DUTOUQUET, Christophe; TORRALBA, Béatrice

*Simulation of emission spectra from nonuniform reactive laser-induced plasmas*  
Physical Review E, 2015, 92 (5): p. art. 053103

GUSEVA CANU, I.; DUCAMP, S.; DELABRE, L.; AUDIGNON-DURAND, S.; DUCROS, C.; DURAND, C.; IWATSUBO, Y.; JEZEWSKI-SERRA, D.; LE BIHAN, Olivier; MALARD, S.; RADAUCEANU, A.; REYNIER, M.; RICAUD, M.; WITSCHGER, Olivier

*Proposition d'une méthode de repérage des postes de travail potentiellement exposant aux nano-objets, leurs agrégats ou agglomérats dans les entreprises mettant en œuvre des nanomatériaux manufacturés*  
Archives des maladies professionnelles et de l'environnement, 2015, 76: p. 329-336

JEREZ, Sandra; TOBIN, Isabelle; VAUTARD, Robert; MONTAVEZ, Juan Pedro; LOPEZ-ROMERO, Jose Maria; THAIS, Françoise; BARTOK, Blanka; CHRISTENSEN, Ole Bossing; COLETTE, Augustin; DEQUE, Michel; NIKULIN, Grigory; KOTLARSKI, Sven; VAN MEIJGAARD, Erik; TEICHMANN, Claas; WILD, Martin

*The impact of climate change on photovoltaic power generation in Europe*  
Nature Communications, 2015, 6: p. art. 10014

CASANUEVA, A.; KOTLARSKI, Sven; HERRERA, S.; FERNANDEZ, J.; GUTIERREZ, J.M.; BOBERG, F.; COLETTE, Augustin;

CHRISTENSEN, Ole Bossing; GOERGEN, Klaus; JACOB, D.; KEULER, Klaus; NIKULIN, Grigory; TEICHMANN, Claas; VAUTARD, Robert

*Daily precipitation statistics in a EURO-CORDEX RCM ensemble: added value of raw and bias-corrected high-resolution simulations*  
Climate Dynamics, 2016, 47 (3): p. 719-737

PREIN, A.F.; GOBIET, Andreas; TRUHETZ, H.; KEULER, Klaus; GOERGEN, Klaus; TEICHMANN, Claas; FOX MAULE, C.; VAN MEIJGAARD, Erik; DEQUE, Michel; NIKULIN, Grigory; VAUTARD, Robert; COLETTE, Augustin; KJELLSTROM, E.; JACOB, D.  
*Precipitation in the EURO-CORDEX 0.11° and 0.44° simulations: high resolution, high benefits?*  
Climate Dynamics, 2016, 46: p. 383-412

DUFOUR, G.; EREMENKO, Maxime; CUESTA, J.; DOCHE, C.; FORET, G.; BEEKMANN, Matthias; CHEINEY, Audrey; WANG, Y.; CAI, Z.; LIU, Y.; TAKIGAWA, M.; KANAYA, Y.; FLAUD, Jean-Marie  
*Springtime daily variations in lower-tropospheric ozone over east Asia: the role of cyclonic activity and pollution as observed from space with IASI*

Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15 (18): p. 10839-10856

COLETTE, Augustin; ANDERSSON, Camilla; BAKLANOV, Alexander; BESSAGNET, Bertrand; BRANDT, Jorgen; CHRISTENSEN, Jesper H.; DOHERTY, Ruth; ENGARDT, Magnuz; GEELS, Camilla; GIANNAKOPOULOS, Christos; HEDEGAARD, Gitte B.; KATRAGKOU, Eleni; LANGNER, Joakim; LEI, Hang; MANDERS, Astrid; MELAS, Dimitri; MELEUX, Frédéric; ROUIL, Laurence; SOFIEV, Mikhail; SOARES, Joana; STEVENSON, David S.; TOMBROU-TZELLA, Maria; VAROTSOS, Konstantinos V.; YOUNG, Paul

*Is the ozone climate penalty robust in Europe?*  
Environmental Research Letters, 2015, 10 (8): p. art. 084015

LANIER, Caroline; MANIER, Nicolas; CUNY, Damien; DERAM, Annabelle

*The comet assay in higher terrestrial plant model: Review and evolutionary trends*  
Environmental Pollution, 2015, 207: p. 6-20

FOURNIER, K.; TEBBY, Cléo; ZEMAN, Florence Anna; GLORENNEC, Philippe; ZMIROU-NAVIER, Denis; BONVALLOT, Nathalie  
*Multiple exposures to indoor contaminants: Derivation of benchmark doses and relative potency factors based on male reprotoxic effects*

Regulatory Toxicology and Pharmacology, 2016, 74: p. 23-30

HENNEBERT, Pierre; HUMEZ, Nicolas; CONCHE, Isabelle; REBISCHUNG, Flore

*Assessment of four calculation methods proposed by the EC for waste hazardous property HP 14 "Ecotoxic"*

Waste Management, 2016, 48: p. 24-33

**SONAVANE, Manoj; CREUSOT, Nicolas; MAILLOT-MARECHAL, Emmanuelle; PERY, Alexandre; BRION, François; AIT-AISSA, Selim**  
*Zebrafish-based reporter gene assays reveal different estrogenic activities in river waters compared to a conventional human-derived assay*

Science of the Total Environment, 2016, 550: p. 934-939

**CAVALHEIRO, Joana; SOLA, Cristina; BALDANZA, Julie; TESSIER, Emmanuel; LESTREMAU, François; BOTTA, Fabrizio; PREUD'HOMME, Hugues; MONPERRUS, Mathilde; AMOUROUX, David**

*Assessment of background concentrations of organometallic compounds (methylmercury, ethyllead and butyl- and phenyltin) in French aquatic environments*

Water Research, 2016, 94: p. 32-41

**MUNOZ, Gabriel; VO DUY, Sung; LABADIE, Pierre; BOTTA, Fabrizio; BUDZINSKI, Hélène; LESTREMAU, François; LIU, Jinxia; SAUVE, Sébastien**

*Analysis of zwitterionic, cationic, and anionic poly- and perfluoroalkyl surfactants in sediments by liquid chromatography polarity-switching electrospray ionization coupled to high resolution mass spectrometry*

Talanta, 2016, 152: p. 447-456

**DE SOUSA, Georges; TENG, Sophie; SALLE-SIRI, Romain; PERY, Alexandre; RAHMANI, Roger**

*Prediction of the metabolic clearance of benzophenone-2, and its interaction with isoeugenol and coumarin using cryopreserved human hepatocytes in primary culture*

Food and Chemical Toxicology, 2016, 90: p. 55-63

**CHOUCHE, Lina; PELLEGRINI, Élisabeth; GUEGUEN, Marie-Madeleine; HINFRAY, Nathalie; BRION, François; PICCINI, Benjamin; KAH, Olivier; SAID, Khaled; MESSAOUDI, Imed; PAKDEL, Farzad**

*Inhibitory effect of cadmium on estrogen signaling in zebrafish brain and protection by zinc*

Journal of Applied Toxicology, 2016, 36 (6): p. 863-871

**HANOT-ROY, Maité; TUBEUF, Émilie; GUILBERT, Ariane; BADO-NILLES,**

**Anne; VIGNERON, Pascale; TROUILLER, Bénédicte; BRAUN, Anne; LACROIX, Ghislaine**

*Oxidative stress pathways involved in cytotoxicity and genotoxicity of titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) nanoparticles on cells constitutive of alveolo-capillary barrier in vitro*

Toxicology in Vitro, 2016, 33: p. 125-135

**KINANI, Saïd; SOUISSI, Yasmine; KINANI, Aziz; VUJOVIC, Svetlana; AIT-AISSA, Selim; BOUCHONNET, Stéphane**

*Photodegradation of fluorene in aqueous solution: Identification and biological activity testing of degradation products*

Journal of Chromatography A, 2016, 1442: p. 118-128

**EVARD, Damien; LAFOREST, Valérie; VILLOT, Jonathan; GAUCHER, Rodolphe**

*Best Available Technique assessment methods: a literature review from sector to installation level*

Journal of Cleaner Production, 2016, 121: p. 72-83

**LE GUERNIC, Antoine; SANCHEZ, Wilfried; PALLUEL, Olivier; BADO-NILLES, Anne;**

**TURIES, Cyril; CHADILI, Edith; CAVALIE, Isabelle; ADAM-GUILLERMIN, Christelle;**

**PORCHER, Jean-Marc; GEFFARD, Alain; BETOULLE, Stéphane; GAGNAIRE, Béatrice**

*In situ experiments to assess effects of constraints linked to caging on ecotoxicity biomarkers of the three-spined stickleback (*Gasterosteus aculeatus* L.)*

Fish Physiology and Biochemistry, 2016, 42: p. 643-657

**ROSSIGNOL, Stéphanie; COUVIDAT, Florian; RIO, Caroline; FABLE, Sébastien;**

**GRIGNION, Guillaume; SAVELLI, Jean-Luc; PAILLY, Olivier; LEOZ-GARZIANDIA, Eva;**

**DOUSSIN, Jean-François; CHIAPPINI, Laura**

*Organic aerosol molecular composition and gas-particle partitioning coefficients at a Mediterranean site (Corsica)*

Journal of Environmental Sciences, 2016, 40: p. 92-104

**CREUSOT, Nicolas; DEVIER, Marie-Hélène; BUDZINSKI, Hélène; AIT-AISSA, Selim**

*Evaluation of an extraction method for a mixture of endocrine disrupters in sediment using chemical and in vitro biological analyses*

Environmental Science and Pollution Research, 2016, 23 (11): p. 10349-10360

**MAILLER, S.; MENUT, Laurent; DI SARRA, A.G.; BECAGLI, S.; DI IORIO, T.; BESSAGNET, Bertrand; BRIANT, R.; FORMENTI, P.; DOUSSIN, Jean-François; GOMEZ-AMO, J.L.; MALLET, M.; REA, G.; SIOUR, Guillaume; SFERLAZZO, D.M.; TRAVERSI, R.; UDISTI, R.; TURQUETY, Solène**

*On the radiative impact of aerosols on photolysis rates: comparison of simulations and observations in the Lampedusa island during the ChArMEx/ADRIMED campaign*

Atmospheric Chemistry and Physics, 2016, 16: p. 1219-1244

**ANDRIANOME, Soafara; HUGUEVILLE, Laurent; DE SEZE, René; HANOT-ROY, Maité; BLAZY, Kelly; GAMEZ, Christelle;**

**SELMAOUI, Brahim**

*Disturbed sleep in individuals with idiopathic environmental intolerance attributed to electromagnetic fields (IEI-EMF): Melatonin assessment as a biological marker*

Bioelectromagnetics, 2016, 37: p. 175-182

**LEMAIRE, Vincent; COLETTE, Augustin; MENUT, Laurent**

*Using statistical models to explore ensemble uncertainty in climate impact studies: the example of air pollution in Europe*

Atmospheric Chemistry and Physics, 2016, 16: p. 2559-2574

**THUNIS, Philippe; MIRANDA, Ana Isabel; BALDASANO, J.M.; BLOND, N.; DOUROS, J.; GRAFF, A.; JANSSEN, Sarah; JUDA-**

**REZLER, K.; KARVOSENOJA, N.; MAFFEIS, G.; MARTILLI, A.; RASOLOHARIMAHEFA, M.;**

**REAL, Elsa; VIAENE, P.; VOLTA, M.; WHITE, L.**

*Overview of current regional and local scale air quality modelling practices: Assessment and planning tools in the EU*

Environmental Science & Policy, 2016, 65: p. 13-21

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

*Impacts of regional climate change on air quality projections and associated uncertainties*

Climatic Change, 2016, 136 (2): p. 309-324

**AMATO, Fulvio; FAVEZ, Olivier; PANDOLFI, M.; ALASTUEY, Andres; QUEROL, Xavier; MOUKHTAR, Sophie; BRUGE, B.; VERLHAC,**

- Stéphane; ORZA, J.A.G.; BONNAIRE, Nicolas; LE PRIOL, Tiphaine; PETIT, Jean-François; SCIARE, Jean  
*Traffic induced particle resuspension in Paris: Emission factors and source contributions* Atmospheric Environment, 2016, 129: p. 114-124
- MANIER, Nicolas; LE MANACH, Séverine; BADO-NILLES, Anne; PANDARD, Pascal  
*Effect of two TiO<sub>2</sub> nanoparticles on the growth of unicellular green algae using the OECD 201 test guideline: influence of the exposure system* Toxicological and Environmental Chemistry, 2016, 98 (8): p. 860-876
- NASEEMA BEEGUM, S.; GHERBOUDJ, Imen; CHAOUCH, Naira; COUVIDAT, Florian; MENUT, Laurent; GHEDIRA, Hosni  
*Simulating aerosols over Arabian Peninsula with CHIMERE: Sensitivity to soil, surface parameters and anthropogenic emission inventories* Atmospheric Environment, 2016, 128: p. 185-197
- CARNEVALE, C.; DOUROS, J.; FINZI, G.; GRAFF, A.; GUARISO, G.; NAHORSKI, Z.; PISONI, E.; PONCHE, J.L.; REAL, Elsa; TURRINI, E.; VLACHOKOSTAS, C.  
*Uncertainty evaluation in air quality planning decisions: a case study for Northern Italy* Environmental Science & Policy, 2016, 65: p. 39-47
- CIFFROY, Philippe; ALFONSO, Boris; ALTENPOHL, A.; BANJAC, Zoran; BIERKENS, J.; BROCHOT, Céline; CRITTO, Andrea; DE WILDE, Tineke; FAIT, Gabriella; FIERENS, Tine; GARRATT, James; GIUBILATO, Elisa; GRANGE, E.; JOHANSSON, Erik; RADOMYSKI, Artur; RESCHWANN, K.; SUCIU, Nicoleta; TANAKA, Taku; TEDIOSI, Alice; VAN HOLDERBEKE, Mirja; VERDONCK, Frederik  
*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: p. 770-784
- GIUBILATO, Elisa; RADOMYSKI, Artur; CRITTO, Andrea; CIFFROY, Philippe; BROCHOT, Céline; PIZZOL, Lisa; MARCOMINI, Antonio  
*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: p. 961-976
- VAN HOLDERBEKE, Mirja; FIERENS, Tine; STANDAERT, Arnout; CORNELIS, Christa; BROCHOT, Céline; CIFFROY, Philippe; JOHANSSON, Erik; BIERKENS, Johan  
*Assessing multimedia/multipathway exposures to inorganic arsenic at population and individual level using MERLIN-Expo* Science of the Total Environment, 2016, 568: p. 794-802
- FIERENS, Tine; VAN HOLDERBEKE, Mirja; STANDAERT, Arnout; CORNELIS, Christa; BROCHOT, Céline; CIFFROY, Philippe; JOHANSSON, Erik; BIERKENS, Johan  
*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: p. 785-793
- SUCIU, Nicoleta; TEDIOSI, Alice; CIFFROY, Philippe; ALTENPOHL, Annette; BROCHOT, Céline; VERDONCK, Frederik; FERRARI, Federico; GIUBILATO, Elisa; CAPRI, Ettore; FAIT, Gabriella  
*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: p. 474-479
- DANIELE, Gaëlle; FIEU, Maëva; JOACHIM, Sandrine; BADO-NILLES, Anne; BAUDOIN, Patrick; TURIES, Cyril; PORCHER, Jean-Marc; ANDRES, Sandrine; VULLIET, Emmanuelle  
*Rapid analysis of diclofenac and some of its transformation products in the three-spined stickleback, Gasterosteus aculeatus, by liquid chromatography-tandem mass spectrometry* Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2016, 408 (16): p. 4435-4444
- DANIELE, Gaëlle; FIEU, Maëva; JOACHIM, Sandrine; JAMES-CASAS, Alice; ANDRES, Sandrine; BAUDOIN, Patrick; BONNARD, Marc; BONNARD, Isabelle; GEFFARD, Alain; VULLIET, Emmanuelle  
*Development of a multi-residue analysis of diclofenac and some transformation products in bivalves using QuEChERS extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry. Application to samples from mesocosm studies* Talanta, 2016, 155: p. 1-7
- MARCHAND, Lilian; PELOSI, Céline; GONZALEZ-CENTENO, Maria Reyes; MAILLARD, Anne; OURRY, Alain; GALLAND, William; TEISSEDE, Pierre-Louis; BESSOULE, Jean-Jacques; MONGRAND, Sébastien; MORVAN-BERTRAND, Annette; ZHANG, Qinzong; GROSBELLET, Claire; BERT, Valérie; OUSTRIERE, Nadège; MENCH, Michel; BRUNEL-MUGUET, Sophie  
*Trace element bioavailability, yield and seed quality of rapeseed (Brassica napus L.) modulated by biochar incorporation into a contaminated technosol* Chemosphere, 2016, 156: p. 150-162
- CUNDY, A.B.; BARDOS, R.P.; PUSCHENREITER, Markus; MENCH, Michel; BERT, Valérie; FRIESL-HANL, Wolfgang; MULLER, Ingo; LI, Xiaojun; WEYENS, Nele; WITTERS, Nele; VANGRONSVELD, Jaco  
*Brownfields to green fields: Realising wider benefits from practical contaminant phyto-management strategies* Journal of Environmental Management, 2016: p. Accepté
- GUERREIRO, Cristina; HORALEK, J.; DE LEEUW, Frank; COUVIDAT, Florian  
*Benzo(a)pyrene in Europe: Ambient air concentrations, population exposure and health effects* Environmental Pollution, 2016, 214: p. 657-667
- BOUDHIB, Mohamed; HERMANN, Jorg; DUTOUQUET, Christophe  
*Compositional analysis of aerosols using calibration-free laser-induced breakdown spectroscopy* Analytical Chemistry, 2016, 88 (7): p. 4029-4035
- LOUIZ, Ibtissem; BEN HASSINE, Oum Kalthoum; PALLUEL, Olivier; BEN-ATTIA, Mossadok; AIT-AISSA, Selim  
*Spatial and temporal variation of biochemical biomarkers in Gobioidae (Gobiidae) from a southern Mediterranean lagoon (Bizerta lagoon, Tunisia): Influence of biotic and abiotic factors* Marine Pollution Bulletin, 2016, 107 (1): p. 305-314
- MAES, Virginie; BETOULLE, Stéphane; JAFFAL, Ali; DEDOURGE-GEFFARD, Odile; DELAHAUT, Laurence; GEFFARD, Alain; PALLUEL, Olivier; SANCHEZ, Wilfried; PARIS-PALACIOS, Séverine; VETTIER, Aurélie; DAVID, Élise  
*Juvenile roach (Rutilus rutilus) increase their anaerobic metabolism in response to copper exposure in laboratory conditions* Ecotoxicology, 2016, 25 (5): p. 900-913

- TANVIR, Shazia; THUROCZY, Gyorgy; SELMAOUI, Brahim; SILVA PIRES-ANTONIETTI, Viviane; SONNET, Pascal; ARNAUD-CORMOS, Delia; LEVEQUE, Philippe; PULCIN, Sylviane; **DE SEZE, René** *Effects of 3G cell phone exposure on the structure and function of the human cytochrome P450 reductase* Bioelectrochemistry, 2016, 111 : p. 62-69
- FORTEMS-CHEINEY, A.; DUFOUR, G.; HAMAOU-LAGUEL, Lynda; FORET, G.; **SIOUR, Guillaume**; VAN DAMME, M.; **MELEUX, Frédéric**; COHEUR, Pierre-François; CLERBAUX, Cathy; CLARISSE, L.; **FAVEZ, Olivier**; WALLASCH, M.; **BEEKMANN, Matthias** *Unaccounted variability in NH3 agricultural sources detected by IASI contributing to European spring haze episode* Geophysical Research Letters, 2016, 43 (10): p. 5475-5482
- BENFENATI, Emilio; BELLI, Maria; BORGES, T.; CASIMIRO, E.; CESTER, Josep; FERNANDEZ, Alberto; GINI, G.; HONMA, M.; KINZL, M.; KNAUF, R.; MANGANARO, A.; **MOMBELLI, Enrico**; PETOUMENOU, M.I.; PAPARELLA, M.; PARIS, P.; RAITANO, Giuseppa *Results of a round-robin exercise on read-across SAR and QSAR in Environmental Research*, 2016, 27 (5): p. 371-384
- LEMAIRE, Vincent**; COLL, Isabelle; **COUVIDAT, Florian**; MOUCHEL-VALLON, Camille; **SEIGNEUR, Christian**; **SIOUR, Guillaume** *Oligomer formation in the troposphere: from experimental knowledge to 3-D modeling* Geoscientific Model Development, 2016, 9: p. 1361-1382
- MERAD, Myriam**; DECHY, Nicolas; DEHOUCQ, Laurent; LASSAGNE, Marc *Risques majeurs, incertitudes et décisions. Approche pluridisciplinaire et multisectorielle* Paris: MA Éditions, 2016
- BOUCARD, Pierre** *Le Principe de précaution comme réponse institutionnelle au choix collectif en incertain et non comme produit de la rationalité ou de la morale* MERAD, Myriam; DECHY, Nicolas; DEHOUCQ, Laurent; LASSAGNE, Marc - Risques majeurs, incertitudes et décisions. Approche pluridisciplinaire et multisectorielle. Paris: MA Éditions, 2016, p. 121-160
- MERAD, Myriam**; DECHY, Nicolas; DEHOUCQ, Laurent; LASSAGNE, Marc *Les décisions face aux risques majeurs. Retours d'expériences et pistes d'amélioration* MERAD, Myriam; DECHY, Nicolas; DEHOUCQ, Laurent; LASSAGNE, Marc - Risques majeurs, incertitudes et décisions. Approche pluridisciplinaire et multisectorielle. Paris: MA Éditions, 2016, p. 391-415
- HAMAOU-LAGUEL, Lynda; VAUTARD, Robert; LIU, Li; SOLMON, Fabien; VIOVY, Nicolas; KHVOROSTYANOV, Dmitry; ESSL, Franz; CHUINE, Isabelle; **COLETTE, Augustin**; SEMENOV, Mikhail A.; SCHAFFHAUSER, Alice; STORKEY, Jonathan; THIBAUDON, Michel; EPSTEIN, Michelle M. *Effects of climate change and seed dispersal on airborne ragweed pollen loads in Europe* Nature Climate Change, 2015, 5 (8): p. 766-771
- PETITDANT, Nicolas; **LECOMTE, Anthony**; **ROBIDEL, Franck**; GAMEZ, Christelle; BLAZY, Kelly; **VILLEGIER, Anne-Sophie** *Cerebral radiofrequency exposures during adolescence: Impact on astrocytes and brain functions in healthy and pathologic rat models* Bioelectromagnetics, 2016, 37: p. 338-350
- GOLBAMAKI, Azadi; BENFENATI, Emilio; GOLBAMAKI, Nazanin; MANGANARO, Alberto; MERDIVAN, Eric; RONCAGLIONI, Alessandra; GINI, Giuseppina *New clues on carcinogenicity-related substructures derived from mining two large datasets of chemical compounds* Journal of environmental Science and Health, Part C, 2016, 34 (2): p. 97-113
- BOIS, Frédéric Y.**; **BROCHOT, Céline** *Modeling Pharmacokinetics* BENFENATI, Emilio - In Silico Methods for Predicting Drug Toxicity. New York: Springer, 2016, p. 37-62 (Methods in Molecular Biology, 1425)
- MOMBELLI, Enrico**; RAITANO, Giuseppa; BENFENATI, Emilio *In silico prediction of chemically induced mutagenicity: How to use QSAR models and interpret their results* BENFENATI, Emilio - In Silico Methods for Predicting Drug Toxicity. New York: Springer, 2016, p. 87-105 (Methods in Molecular Biology, 1425)
- BOUJI, Marc; **LECOMTE, Anthony**; GAMEZ, Christelle; BLAZY, Kelly; **VILLEGIER, Anne-Sophie** *Neurobiological effects of repeated radiofrequency exposures in male senescent rats* Biogerontology, 2016 : p. Accepté
- CANO-NICOLAU, Joel; GAROCHE, Clémentine; **HINFRAY, Nathalie**; PELLEGRINI, Elisabeth; BOUJRAD, Noureddine; PAKDEL, Farzad; KAH, Olivier; **BRION, François** *Several synthetic progestins disrupt the glial cell specific-brain aromatase expression in developing zebra fish* Toxicology and Applied Pharmacology, 2016, 305: p. 12-21
- TENG, Sophie; **TEBBY, Cléo**; BARCELLINI-COUGET, Sylvie; DE SOUSA, Georges; **BROCHOT, Céline**; RAHMANI, Roger; **PERY, Alexandre** *Analysis of real-time mixture cytotoxicity data following repeated exposure using BK/TD models* Toxicology and Applied Pharmacology, 2016, 305: p. 118-126
- NICOULAUD-GOUIN, V.; GARCIA-SANCHEZ, L.; GIACALONE, M.; ATTARD, J.C.; MARTIN-GARIN, A.; **BOIS, Frédéric Y.** *Identifiability of sorption parameters in stirred flow-through reactor experiments and their identification with a Bayesian approach* Journal of Environmental Radioactivity, 2016, 162-163: p. 328-339
- LIU, Li; SOLMON, Fabien; VAUTARD, Robert; HAMAOU-LAGUEL, Lynda; TORMA, Csaba Zsolt; GIORGI, Filippo *Ragweed pollen production and dispersion modelling within a regional climate system, calibration and application over Europe* Biogeosciences, 2016, 13: p. 2769-2786
- TOMAZ, Sophie; SHAHPOURY, Pourya; JAFFREZO, Jean-Luc; LAMMEL, Gerhard; PERRAUDIN, Émilie; VILLENAVE, Éric; **ALBINET, Alexandre** *One-year study of polycyclic aromatic compounds at an urban site in Grenoble (France): Seasonal variations, gas/particle partitioning and cancer risk estimation* Science of the Total Environment, 2016, 565: p. 1071-1083

KEYTE, Ian J.; ALBINET, Alexandre;  
HARRISON, Roy M.

*On-road traffic emissions of polycyclic aromatic hydrocarbons and their oxy- and nitro- derivative compounds measured in road tunnel environments*

Science of the Total Environment, 2016, 566 : p. 1131-1142

DUPONT, J.C.; HAEFFELIN, Martial;  
BADOSA, J.; ELIAS, T.; FAVEZ, Olivier;  
PETIT, Jean-Eudes; MELEUX, Frédéric;  
SCIARE, Jean; CRENN, Vincent; BONNE, J.L.

*Role of the boundary layer dynamics effects on an extreme air pollution event in Paris*

Atmospheric Environment, 2016, 141 : p. 571-579

CANTUARIAS, Carmen; WEINBERGER, Benno; ROSES, Leonardo; VIGNES, Alexis; BRIGNON, Jean-Marc

*Social cost-benefit analysis of hydrogen mobility in Europe*

International Journal of Hydrogen Energy, 2016 : p. Accepted

LE GUERNIC, Antoine; SANCHEZ, Wilfried; BADO-NILLES, Anne; PALLUEL, Olivier; TURIES, Cyril; CHADILI, Edith; CAVALIE, Isabelle; DELAHAUT, Laurence; ADAM-GUILLERMIN, Christelle; PORCHER, Jean-Marc; GEFFARD, Alain; BETOULLE, Stéphane; GAGNAIRE, Béatrice

*In situ effects of metal contamination from former uranium mining sites on the health of the three-spined stickleback (Gasterosteus aculeatus, L.)*

Ecotoxicology, 2016, 25 (6) : p. 1234-1259

## RISQUES ACCIDENTELS

### 2015

DAUBECH, Jérôme; HEBRARD, Jérôme;  
JALLAIS, Simon; VYAZMINA, Elena; JAMOIS, Didier; VERBECKE, Franck

*Un-ignited and ignited high pressure hydrogen releases: Concentration - turbulence mapping and overpressure effects*

Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2015, 36 : p. 439-446

GAUDIN, Théophile; ROTUREAU, Patricia; FAYET, Guillaume

*Combining mixing rules with QSPR models for pure chemicals to predict the flash points of binary organic liquid mixtures*

Fire Safety Journal, 2015, 74 : p. 61-70

JAMOIS, Didier; PROUST, Christophe; HEBRARD, Jérôme

*Hardware and instrumentation to investigate massive releases of dense phase CO<sub>2</sub>*

Canadian Journal of Chemical Engineering, 2015, 93 (2) : p. 234-240

GAUDIN, Théophile; ROTUREAU, Patricia; FAYET, Guillaume

*Mixture descriptors toward the development of Quantitative Structure-Property Relationship models for the flash points of organic mixtures*

Industrial & Engineering Chemistry Research, 2015, 54 (25) : p. 6596-6604

SOARES, F.J.; CARVALHO, L.; COSTA, I.C.; IRIA, J.P.; BODET, J.M.; JACINTO, G.; LECOCQ, Amandine; ROESSNER; CAILLARD, Bastien; SALVI, Olivier

*The STABALID project: Risk analysis of stationary Li-ion batteries for power system applications*

Reliability Engineering and System Safety, 2015, 140 : p. 142-175

PROUST, Christophe

*Gas flame acceleration in long ducts*

Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2015, 36 : p. 387-393

LE COZE, Jean-Christophe

*1984-2014. Normal Accidents. Was Charles Perrow Right for the Wrong Reasons ?*

Journal of Contingencies and Crisis Management, 2015, 23 (4) : p. 275-286

DUPRE, Michel; LE-COZE, Jean Christophe

*Réactions à risque: regards croisés sur la sécurité dans la chimie*

Paris: Lavoisier, Tec & Doc, 2014 (SRD: SCIENCES DU RISQUE ET DU DANGER, 1988)

BUSTAMANTE VALENCIA, L.; BLANC-VANNET, P.; DOMERGUE, D.; HEUDIER, Laure; JAMOIS, Didier

*Thermal history resulting in the failure of lightweight fully-wrapped composite pressure vessel for hydrogen in a fire experimental facility*

Fire Technology, 2016, 52 (2) : p. 421-442

LE COZE, Jean-Christophe

*Reflecting on Jens Rasmussen's legacy (2) behind and beyond, a "constructivist turn"*

Applied Ergonomics, 2015 : p. Accepted

FORESTIER, Coralie; JANKOWSKI, Piotr; COSER, Laura; GACHOT, Grégory; SANNIER, Lucas; JOHANSSON, Patrik; ARMAND, Michel; GRUGEON, Sylvie; LARUELLE, Stéphane

*Facile reduction of pseudo-carbonates:*

*Promoting solid electrolyte interphases with dicyanoketene alkylene acetals in lithium-ion batteries*

Journal of Power Sources, 2016, 303 : p. 1-9

DEL CORSO, Frédérique; METTLACH, Horst; MORCLETTE, Mathieu; KOEHLER, Uwe; GOUSSET, Cédric; SARRAZIN, Christian; BINOTTO, Ghislain; PORCELLATO, Denis; VEST, Matthias

*HELIO-S-High energy lithium ion storage solutions: comparative assessment of 4 chemistries of cathode for EV and PHEV applications*

BRIEC, Emma; MULLER, Beate - Electric Vehicle Batteries: Moving from Research towards Innovation. Reports of the PPP European Green Vehicles Initiative. NC: Springer, 2015, p. 1-17 (Lecture Notes in Mobility)

NIETO-DRAGHI, Carlos; FAYET, Guillaume; CRETON, Benoît; ROZANSKA, Xavier; ROTUREAU, Patricia; DE HEMPTINNE, Jean-Charles; UNGERER, Philippe; ROUSSEAU, Bernard; ADAMO, Carlo

*A general guidebook for the theoretical prediction of physicochemical properties of chemicals for regulatory purposes*

Chemical Reviews, 2015, 115 (24) : p. 13093-13164



**GUILLAUME, Éric; MARLAIR, Guy; DELACROIX, Alain; DRYSDALE, Dougal**  
*Considerations on combustion and fire behaviour of materials: A change of mind during the 18<sup>th</sup> century*

Journal of Fire Sciences, 2016, 34 (1): p. 69-84

**ABADA, Sara; MARLAIR, Guy; LECOQ, Amandine; PETIT, M. ; SAUVANT-MOYNOT, Valérie; HUET, F.**

*Safety focused modeling of lithium-ion batteries: A review*

Journal of Power Sources, 2016, 306: p. 178-192

**SALVI, Olivier; ROCHE, Christian; EVANNO, Sébastien; CAILLARD, Bastien**

*Summary report of the international workshop for biogas safety*

Stuttgart: EU-VRI, 2015

**OUNOUGHENE, Ghania**

*Étude des émissions liées à l'incinération de matériaux nanostructurés et incidence éventuelle sur les procédés industriels*

Thèse de doctorat. École des mines de Nantes, 23/11/2015

**DELATOUR, Guillaume**

*L'Écosystème décisionnel du manager: une contribution au défi d'anticipation de la crise*

Thèse de doctorat. Université de technologie de Troyes, 30/06/2015

**DAUDIN, Kevin**

*Contribution à la prédiction des effets des réactions Na-H<sub>2</sub>O-air dans les réacteurs électronucléaires type RNR de IV<sup>e</sup> génération: application au programme ASTRID*

Thèse de doctorat. Université de technologie de Compiègne, 23/09/2015

## 2016

**JANES, Agnès; MARLAIR, Guy; CARSON, Douglas**

*Testing of gas flow measurement methods to characterize substances which emit flammable or toxic gases in contact with water*

Process Safety and Environmental Protection, 2016, 100: p. 232-241

**LECOQ, Amandine; ESHETU, Gebrekidan G.; GRUGEON, Sylvie; MARTIN, Nelly; LARUELLE, Stéphane; MARLAIR, Guy**

*Scenario-based prediction of Li-ion batteries fire-induced toxicity*

Journal of Power Sources, 2016, 316: p. 197-206

**PIQUE, Sylvaine; WEINBERGER, Benno; DE DIANOUS, Valérie; DEBRAY, Bruno**

*Comparative study of regulations, codes and standards and practices on hydrogen fuelling stations*

International Journal of Hydrogen Energy, 2016 : p. Accepted

**LE COZE, Jean-Christophe**

*Vive la diversité ! High Reliability Organisation (HRO) and Resilience Engineering (RE)*

Safety Science, 2016 : p. Accepted

**ESCANDE, Jean; PROUST, Christophe; LE COZE, Jean-Christophe**

*Limitations of current risk assessment methods to foresee emerging risks: Towards a new methodology ?*

Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2016, 43: p. 730-735

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

*Pressure response and phase transition in supercritical CO<sub>2</sub> releases from a large-scale pipeline*

Applied Energy, 2016, 178: p. 189-197

**BLANC, Ludovic; HANUS, Jean-Luc; WILLIAM-LOUIS, Mame; LE ROUX, Benjamin**

*Experimental and numerical investigations of the characterisation of reflected overpressures around a complex structure*

Journal of Applied Fluid Mechanics, 2016, 9 (Special Issue1): p. 121-129

**FORESTIER, Coralie; GRUGEON, Sylvie; DAVOISNE, Carine; LECOQ, Amandine; MARLAIR, Guy; ARMAND, Michel; SANNIER, Lucas; LARUELLE, Stéphane**

*Graphite electrode thermal behavior and solid electrolyte interphase investigations: Role of state-of-the-art binders, carbonate additives and lithium bis(fluorosulfonyl)imide salt*

Journal of Power Sources, 2016, 330: p. 186-194

## 2015

**BOUILLARD, Jacques**

*Fire and explosion of nanopowders*

DOLEZ, Patricia - Nanoengineering: Global Approaches to Health and Safety Issues. Amsterdam: Elsevier, 2015, p. 111-148

**SAIB, Mahdi-Salim**

*Construction d'une méthode de caractérisation des inégalités territoriales, environnementales et sociales de santé*

Thèse de doctorat. Université de Picardie Jules Verne Amiens, 30/01/2015

Conception et réalisation : Corporate Fiction

Crédits photos : ©INERIS

Couverture : ©Kateryna\_Kon/Fotolia.com

Actualités : ©Kurhan/Shutterstock.com

Avant-propos : ©motorolka/Shutterstock.com

p.6 : © pixelparticle/Shutterstock.com

P.24 : ©Lostry7/Shutterstock.com

P.46 : © Alex\_Traksel/Shutterstock.com

P.56 : ©Tinydevil/Shutterstock.com

Pictos : ©Sally Bornot • ©TheNounProject



*maîtriser le risque  
pour un développement durable*

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 - Fax : +33 (0)3 44 55 66 99  
E-mail : [ineris@ineris.fr](mailto:ineris@ineris.fr) - Internet : [www.ineris.fr](http://www.ineris.fr)