POLYPUBLIE

Conception d'un dispositif de traitement d'eau captée depuis l'atmosphère

Arnaud Hugues Paul Louis Guibert

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

Date	2024
Type	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis Mémoire de maîtrise/Master's thesis
URL de PolyPublie PolyPublie URL	https://publications.polymtl.ca/57566/
Conditions d'utilisation Terms of use	© Tous droits réservés / All rights reserved
Référence Citation	Guibert, A. H. P. L. (2024). Conception d'un dispositif de traitement d'eau captée depuis l'atmosphère [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/57566/

Détails de la thèse
Thesis details

Directeurs de recherche Advisors	Jason Robert Tavares, Émilie Bédard, & Françoise Bichai
Programme Program	Génie des matériaux

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal
https://publications.polymtl.ca

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Conception d'un dispositif de traitement d'eau captée depuis l'atmosphère

ARNAUD HUGUES PAUL LOUIS GUIBERT
Département de génie chimique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie des matériaux

Février 2024

© Arnaud Hugues Paul Louis Guibert, 2024.

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Conception d'un dispositif de traitement d'eau captée depuis l'atmosphère

présenté par **Arnaud Hugues Paul Louis GUIBERT**
en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Abdellah AJJI, président
Jason Robert TAVARES, membre et directeur de recherche
Émilie BÉDARD, membre et codirectrice de recherche
Françoise BICHAI, membre et codirectrice de recherche
Sarah DORNER, membre

DÉDICACE

À mes parents,
qui m'ont encouragé dans cette voie

REMERCIEMENTS

À mes parents, Jacky et Isabelle Guibert, pour m'avoir encouragé tout au long de mes études.
À David Brassard pour les conseils et l'aide qu'il m'a prodigués tout au long de ce projet ainsi qu'au cours de la rédaction de ce mémoire et pour m'avoir aidé à m'acclimater à la vie à Montréal.
À Wendell Raphael pour les conseils offerts durant mes expériences et les discussions que nous avons eues ensemble.
À mes collègues de PhotoSEL, Emad, Mélanie, Cristina, Adya, Darius, Wissal, Ayesha, Clémence, William, Simon, Tifenn, Andrés pour les discussions et le bon temps passé ensemble.
Au Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG) et Prima Québec pour le financement apporté à ce projet ainsi que AWN Nanotech pour le financement et Richard Boudreault pour son apport lors des discussions sur le projet.
Au jury pour la lecture et l'évaluation du présent mémoire.
À mes co-directrices, Émilie Bédard et Françoise Bichai, pour m'avoir aiguillé sur tous les aspects liés au génie civil de ce projet et m'avoir aidé lors de la rédaction du présent mémoire.
À mon directeur de recherche, Jason Robert Tavares, sans qui rien de ceci n'aurait été possible. Merci pour tes conseils et ton suivi de mon travail tout au long de ces deux années, pour tes félicitations comme pour tes remontrances qui m'auront beaucoup aidé à progresser et à m'habituer à la vie en laboratoire.

RÉSUMÉ

La pénurie d'eau dans le monde a incité la communauté scientifique à rechercher de nouvelles méthodes de production d'eau potable pour les populations qui y ont un accès restreint. C'est ainsi que la génération d'eau atmosphérique a été suggérée, permettant d'extraire l'eau vapeur présente dans l'air environnant pour y donner accès aux populations des régions reculées. Les éponges nanoporeuses sont un des matériaux développés dans ce but et sont le matériau considéré dans la suite du mémoire.

Cependant, il n'y a pas encore eu de recherche sur la qualité minéralogique ou biologique de l'eau ainsi produite, ni de suggestions pour un système de désinfection adapté pour des populations vivant dans des régions reculées et ayant ainsi un accès limité à l'électricité. Des tests sur la teneur en minéraux de l'eau récupérée en utilisant ces éponges nanoporeuses trempées dans l'eau ont été réalisés et ont permis de détecter la présence de carbonate de sodium dans des fortes proportions affectant le goût et les propriétés de l'eau augmentant son pH au-delà de 11, ainsi que l'absence quasi-totale de tout autre minéral. Ceci a mené à la mise en place d'un protocole de rinçage des éponges nanoporeuses afin d'éliminer cette contamination due à un agent de contrôle du pH utilisé lors de leur synthèse. Les résultats ont confirmé la pureté de l'eau obtenue après ce rinçage, tous les minéraux testés étant en quantités très faibles de l'ordre des seuils de détection.

Enfin, pour le processus de désinfection, il a été déterminé que l'utilisation de diodes électroluminescentes (DELs) émettant dans l'ultraviolet est la plus adaptée à l'emploi dans des zones reculées du fait de leur faible consommation énergétique, l'absence de consommables et leur simplicité de maintenance. Des simulations ont été réalisées sur COMSOL afin de déterminer les paramètres idéaux du système de désinfection utilisant ces diodes, permettant de décrire une fenêtre d'opération du dispositif dans le cadre d'un écoulement piston de l'eau. Il en est ressorti qu'il existe un rayon, un débit et une configuration de diodes idéaux permettant d'optimiser la désinfection tout en consommant aussi peu d'énergie que possible. Pour des DELs émettant à 11,5mW, le rayon optimal est de 6cm - non affecté par la valeur de débit - avec un flux d'eau maximal de l'ordre du litre par heure pour respecter les normes de potabilité et une configuration de deux bagues de trois DELs. Les résultats obtenus par ces simulations restent à être confirmés expérimentalement et pour obtenir un système complet rendant l'eau produite potable il faut encore concevoir un système de reminéralisation.

ABSTRACT

The worldwide water shortage currently experienced has led researchers to develop new ways to provide drinking water to the populations in need. This is how atmospheric water harvesting process came to life, enabling people to have access to water even in remote areas. Nanoporous sponges are one of the materials designed for this purpose and are the material considered here.

However, no research has been made relative to the mineral content or the bacteriological contamination of the produced water. A disinfection system has to be designed, specifically for populations living in remote areas with little access to electricity. The mineral content of nanoporous sponges soaked in water has been measured, raising an alarm on exceptionally high sodium carbonate content in the water, at levels impacting its taste and properties - the pH rises over 11. To limit this occurrence, a washing protocol has been devised to remove most of the contamination which is caused by a pH control agent during the sponges' synthesis. The results have also confirmed that once this agent has been removed, the water is nearly pure, all minerals being either at or below detection range.

Finally, using ultraviolet light emitting diodes (LEDs) was elected to be the most effective disinfection method in remote areas due to low power consumption, absence of consumables and easiness of the maintenance. Simulations have been run on COMSOL to design a disinfection system and determine the ideal values of its parameters in the case of a plug flow modelling of the water. It has been established there are ideal values for the radius, water flow and number of diodes that promote both biocidal effectiveness and energy economies. For LEDs emitting at 11,5mW, an optimal radius is 6cm in a configuration made up of 2 rings of 3 LEDs each. This is not affected by the value of the water flow but, for the system to be respectful of the laws regulating potable water, this flow has to be limited to 1 L/h. Lab experiments have yet to be realized to confirm those simulations results and for a complete system to make the water drinkable, a remineralization setup must be designed as well.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iii

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vi

TABLE DES MATIÈRES vii

LISTE DES TABLEAUX x

LISTE DES FIGURES xi

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1
1.1 Mise en contexte 1
1.2 Définitions et concepts de base 2
1.2.1 Éponges nanoporeuses 2
1.2.2 Désinfection 2
1.3 Plan du mémoire 3

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE 4
2.1 Génération d'eau atmosphérique 4
2.2 Teneur en minéraux dans l'eau 5
2.2.1 Équilibre des minéraux 5
2.2.2 Standards de minéralité 6
2.3 Méthodes de désinfection de l'eau 7
2.3.1 Efficacité de désinfection 7
2.3.2 Chloration 8
2.3.3 Irradiation UV 9
2.3.4 Ozonation 11
2.3.5 Comparaison des coûts 12
2.3.6 Paramètres des ultraviolets 13
2.4 Systèmes de désinfection de l'eau 15
2.4.1 Systèmes développés précédemment 15

2.4.2 Disposition des DELs dans le système 16
2.4.3 Production d'eau liquide par adsorbants 16
2.5 Simulations numériques pour le système de désinfection 17
2.5.1 Choix du logiciel de simulation 17
2.5.2 Écoulement piston dans le système de désinfection 17

CHAPITRE 3 ÉLÉMENTS DE LA PROBLÉMATIQUE ET OBJECTIFS 19
3.1 Étude de l'eau fournie par condensation capillaire 19
3.2 Désinfection 19
3.3 Éléments à préciser 19
3.4 Objectifs spécifiques de recherche 20

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE 21
4.1 Alcalinité 21
4.1.1 Définition et utilité 21
4.1.2 Protocole de mesure 21
4.2 Mesures de concentrations 23
4.3 Méthode de gravimétrie d'adsorption d'eau (Dynamic vapor sorption (DVS)) 23
4.4 Diodes électroluminescentes 24
4.4.1 Caractéristiques des diodes 24
4.4.2 Mesures d'intensité lumineuse dans les ultraviolets (UV) 25
4.5 Paramétrisation du modèle de système de désinfection 25

CHAPITRE 5 TENEUR EN MINÉRAUX 26
5.1 Tests physico-chimiques 26
5.1.1 Tests préliminaires 26
5.1.2 Ajout de NPS 27
5.2 Identification du contaminant 31
5.2.1 Rinçage des NPS 31
5.2.2 Mesure de concentration des ions 33
5.2.3 Protocole établi 34

CHAPITRE 6 DÉSINFECTION 35
6.1 Désinfection aux ultraviolets : paramètres des diodes 35
6.2 Simulations COMSOL 35
6.2.1 Modélisation du réacteur 35
6.2.2 Matériaux du réacteur 36

6.2.3 Rayon du réacteur 40
6.2.4 Répartition de l'intensité 41
6.3 Fenêtre d'opérations 46
6.3.1 Choix des paramètres 46
6.3.2 Fenêtre générale d'opération 46

CHAPITRE 7 CONCLUSION 47
7.1 Synthèse des travaux 47
7.2 Limitations de la solution proposée 47
7.3 Améliorations futures 48

RÉFÉRENCES 49

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1 Concentrations dans l'eau des principaux minéraux pour assurer sa potabilité telles que recommandées par Rosborg et al 6

Tableau 2.2 Comparaison des concentrations maximales (en mg/L) dans l'eau de quelques éléments selon les recommandations de l'OMS, Santé Canada, la loi québécoise quand disponible et l'USEPA 6

Tableau 2.3 Comparaison du coût de l'eau désinfectée selon les trois méthodes . . 12

Tableau 2.4 Comparaison de l'amélioration du log d'inactivation de *E. Coli* pour différents revêtements et longueurs d'onde, entre parenthèses l'incertitude 14

Tableau 5.1 Concentrations ioniques dans l'eau après ajout de différentes quantités de NPS et filtration 33

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Irradiance normalisée d'une DEL UV d'après l'équation (2.2) 10
Figure 4.1 Tirage pHmétrique d'eau très alcaline par de l'acide sulfurique à 0.02N 22
Figure 4.2 Profil d'intensité des DELs UV utilisées (bleu) et approximations avec des cosinus (rouge), un polynôme de degré six (vert) et un polynôme de degré quatre (jaune) 24
Figure 5.1 Évolution du pH au cours du titrage d'eau du robinet à l'acide sulfurique à 0,2N 27
Figure 5.2 Évolution du pH au cours du titrage de 100mL d'eau déionisée avec ajout de 20g de NPS à l'acide sulfurique à 0,2N 28
Figure 5.3 Évolution du pH au cours du titrage de 200mL d'eau déionisée avec ajout de 3,4g de NPS à l'acide sulfurique à 0,2N 29
Figure 5.4 Alcalinité de la solution selon la masse de NPS ajoutée dans 100mL d'eau 29
Figure 5.5 Conductivité de la solution selon la masse de NPS ajoutée dans 200mL d'eau 30
Figure 5.6 COT de la solution selon la masse de NPS ajoutée dans 200mL d'eau 30
Figure 5.7 Alcalinité de la solution en fonction du temps pour une masse de 1.7g de NPS ajoutée pour un volume d'eau de 100mL 32
Figure 5.8 Alcalinité de la solution après plusieurs rinçages pour deux échantillons différents en échelle logarithmique 32
Figure 5.9 Concentrations mesurées de sodium dans l'eau après ajout de différentes quantités de NPS dans 200mL d'eau et filtration à 70µm . . . 33
Figure 6.1 Aperçu de la simulation du premier modèle de réacteur, avec lampe UV au mercure au lieu de DELs et la fluence perçue à l'intérieur . . . 36
Figure 6.2 Aperçu de la simulation du second modèle de réacteur, 5 DELs au-dessus d'un réservoir cylindrique avec entrée d'eau par le tuyau rectangulaire en bas et sortie d'eau par le tuyau rectangulaire en haut . . . 37
Figure 6.3 Schéma du réacteur de désinfection et des principaux paramètres associés 38
Figure 6.4 Réacteur en forme de tuyau avec la région à profil de vitesse variable sur la gauche et 3 bagues de DELs dans la partie droite dans la région d'écoulement piston avec visualisation du taux de fluence associé en mW/cm^2, les DELs étant représentées par des cercles 38

Figure 6.5 Fluence pour un débit de 1 L/s et différentes configurations de DELs pour un rayon de réacteur variable. La ligne rouge correspond à la fluence minimale requise pour une désinfection efficace, soit 200 mJ/cm². 40
Figure 6.6 Fluence pour un débit de 0,36 L/s et différentes configurations de DELs pour un rayon de réacteur variable 41
Figure 6.7 Aperçu de la simulation de la répartition du taux de fluence respectivement pour 2, 3, 4, 5 et 6 DELs par bague pour un réacteur de 1cm de rayon 42
Figure 6.8 Aperçu de la simulation de la répartition en échelle logarithmique du taux de fluence respectivement pour 2, 3, 4 et 5 DELs par bague pour un réacteur de 5cm de rayon 43
Figure 6.9 Aperçu de la simulation de la répartition du taux de fluence pour une conformation décalée 2x3 DELs 44
Figure 6.10 Fluence perçue à différentes distances du centre du réacteur à divers angles par rapport à l'axe Ox pour deux bagues de 3 DELs 44
Figure 6.11 Fluence perçue à différentes distances du centre du réacteur à divers angles par rapport à l'axe Ox pour deux bagues de 5 DELs 45
Figure 6.12 Schéma de principe pour les figures 6.10 et 6.11 45

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

En mars 2023 a eu lieu une conférence mondiale sur l'eau sous l'égide des Nations Unies, pour la première fois depuis 1977, afin de trouver des solutions aux pénuries d'eau potable qui, en 2020, touchaient plus de 2 milliards d'êtres humains dans le monde [1, 2]. L'eau potable est une ressource qui doit être protégée et qui se fait rare dans certaines régions du monde. Les changements climatiques en cours accélèrent cette problématique et des sources alternatives sont recherchées. Idéalement, ces sources peuvent être employées dans des régions reculées et pauvres, qui n'ont pas accès aux grands réseaux d'eau potable métropolitains.

Il est donc important de développer des systèmes qui puissent fournir de l'eau potable à ces populations et qui puissent subvenir à leurs propres besoins notamment énergétiques. Différentes techniques ont été développées à cette fin, la plus connue étant la désalinisation de l'eau de mer par osmose inverse [3]. Cette technique requiert cependant l'utilisation de ressources énergétiques importantes et un accès à l'eau de mer, étant de ce fait inapplicable dans les régions désertiques au cœur des terres. Diverses autres techniques ont été développées pour fournir de l'eau potable en absence de sources d'eau douce, telles que la capture de brouillard et la réfrigération de l'air. Ces techniques requièrent néanmoins la présence locale de brouillard ou l'utilisation de ressources énergétiques importantes, ce qui n'est pas adapté aux régions isolées.

Il a été suggéré récemment d'utiliser des éponges nanoporeuses, structures carbonées qui permettent la condensation capillaire de l'eau atmosphérique fournissant ainsi une source d'eau accessible dans n'importe quelle région du monde [4]. La condensation capillaire consiste en une condensation de la vapeur d'eau présente dans l'atmosphère dans un mésopore pour une pression locale inférieure à la pression de vapeur saturante de l'eau [5], et qui est affectée par des paramètres tels que la température, l'humidité relative, le type d'adsorbant et la taille des pores. Cependant, si les propriétés de ce matériau en termes d'adsorption de la vapeur d'eau ont été étudiées, il n'y a pas eu d'étude sur la qualité de l'eau fournie par cette méthode.

Il est estimé que cette eau sera en effet équivalente à une eau déminéralisée, puisque extraite directement de l'atmosphère. De plus, divers micro-organismes peuvent avoir été transportés par l'air entrant dans le dispositif et se développer dans les composantes du système. Pour créer un système efficace de production d'eau potable à partir de ce matériau, il faut donc également concevoir un système de désinfection de cette eau et identifier les besoins en termes

de minéralisation.

1.2 Définitions et concepts de base

1.2.1 Éponges nanoporeuses

Les éponges nanoporeuses (nanoporous sponges, NPS) sont des structures carbonées synthétisées par la pyrolyse de résine résorcinol-formaldéhyde [4]. Le processus consiste à mélanger résorcinol, formaldéhyde et un catalyseur carbonate de sodium (rapports de masse 2 : 3 : 0,01) à dissoudre dans un mélange d'eau-éthanol de rapport 1 : 1. Le mélange est chauffé 24 heures à 80°C afin de permettre la polymérisation de la résine et l'évaporation du solvant. La pyrolyse est ensuite effectuée à 700°C en présence d'un gaz, dioxyde de carbone (CO_2) dans le cadre étudié dans ce mémoire, qui permettra la fonctionnalisation des NPS.
Les NPS sont des macromolécules organiques caractérisées par des pores nanométriques sur la paroi desquels l'air humide va condenser pour former une couche d'eau liquide adsorbée sur une surface comprenant des fonctions hydrophiles. Les propriétés du matériau vont varier en fonction de la distribution de taille des pores. Pour des humidités ambiantes élevées, une atmosphère humide va permettre la condensation capillaire de la vapeur d'eau sur des sites hydrophiles et va permettre de remplir les pores d'eau liquide [4, 5]. Si l'humidité est plus faible, le remplissage ne sera que partiel. En présence d'air froid, la vapeur d'eau adsorbée condense et peut être récupérée sous forme liquide. Cette eau peut ensuite être désinfectée et minéralisée pour devenir potable.

1.2.2 Désinfection

La désinfection est généralement quantifiée à l'aide des logarithmes (logs) de la fraction restante de colonies de bactéries ou microbes ou logs d'enlèvement [6]. Par exemple, un log d'enlèvement de 1 correspond à un enlèvement de 90% des micro-organismes considérés. D'après Santé Canada [7], la plupart du temps un log 3, c'est-à-dire un enlèvement de 99,9%, suffit pour considérer l'eau comme désinfectée pour des micro-organismes spécifiés tels que *Escherichia coli*, *Giardia* et *Cryptosporidium*. Comme il est impossible de tester l'efficacité de désinfection pour tous les micro-organismes, seuls ces derniers sont utilisés comme indicateurs pour concevoir les procédés en fonction de la qualité de l'eau à traiter et valider l'efficacité de la désinfection dans les usines de traitement d'eau potable.
Il existe plusieurs méthodes de désinfection disponibles qui seront décrites en détail dans la revue de littérature, mais en l'occurrence il faut pouvoir adapter ces méthodes à un usage dans des zones reculées. Les principales contraintes dans ce contexte sont un usage parci-

monieux de l'énergie afin de faciliter l'auto-suffisance énergétique du système qui ne pourra probablement pas être relié à un réseau électrique. Il faut également réduire au maximum l'ajout de consommables dans le système, car il sera souvent difficile pour l'utilisateur de se les procurer et ils engendrent des coûts supplémentaires. La taille totale du système devrait aussi être considérée, afin de faciliter le transport initial vers sa zone d'utilisation, ainsi que l'espace requis une fois installé. Enfin, ce système devrait être aussi neutre que possible vis-à-vis de l'environnement où il sera utilisé.

1.3 Plan du mémoire

Après avoir revu l'état des connaissances en termes de teneur en minéraux des eaux, de désinfection et des approches de modélisation, les méthodes utilisées pour répondre aux questions sur les protocoles à utiliser, ainsi que lors des simulations réalisées, seront décrites. L'étude de la teneur en minéraux de l'eau en contact avec les NPS qui suit permettra d'étudier la présence d'un contaminant et de déterminer une méthode permettant d'en éliminer les aspects négatifs pour la potabilité. Une fois l'étude de l'eau issue des NPS achevée, la conception du système de désinfection sera discutée via les simulations réalisées. Enfin, les conclusions tirées de ces simulations et expériences permettront de formuler des recommandations pour la construction du système de désinfection.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 Génération d'eau atmosphérique

La génération d'eau potable dans les endroits dépourvus d'eaux souterraines ou de surface repose généralement sur des méthodes telles que la désalinisation de l'eau de mer ou la récolte de brouillard, dépendant des conditions hydrologiques ou climatiques locales [8]. Cependant, il existe une source d'eau douce peu ou pas exploitée : l'atmosphère. Il est estimé que les réserves d'eau douce ainsi disponible partout dans le monde sont de l'ordre de 10 000 km^3 au total [8]. Si l'eau atmosphérique est disponible en grandes quantités dans les régions tropicales très humides, les taux d'humidité sont très faibles dans le grand Nord et notamment chez les premières nations. Cependant, l'humidité générée par ces populations dans leur maison l'hiver est suffisante pour être exploitée de cette manière.

Un système approprié à ce contexte d'usage doit disposer des qualités suivantes : bonne capacité de récolte de l'eau atmosphérique (dont condensation efficace de la vapeur d'eau et collecte efficace de l'eau liquide), faible consommation énergétique, adaptation à de nombreux climats différents, stabilité et robustesse. Les systèmes envisageables peuvent être passifs ou actifs, ces derniers permettant généralement un meilleur rendement au prix de coûts plus élevés du fait de la nécessité d'un apport en énergie. Pour ce qui est des systèmes de génération d'air depuis l'atmosphère (air water generation en anglais, AWH) passifs, en dehors des systèmes de collecte de rosée et de brouillard qui sont très dépendants des conditions climatiques, des méthodes ont été développées selon trois axes : le développement de nouveaux matériaux dont la surface favorise la condensation de la vapeur d'eau, le refroidissement du substrat pour faciliter la condensation et enfin la concentration de l'humidité atmosphérique pour s'affranchir des limitations climatiques. Ces trois axes peuvent être associés aux paramètres-clef des systèmes AWH : dynamique des surfaces, température et humidité relative [8].

Parmi les matériaux développés dans ce but, les principaux sont les réseaux métallo-organiques (Metal-organic frameworks, MOFs), la silice mésoporeuse et les NPS. Une comparaison d'efficacité en termes d'absorption d'eau montre que les MOFs ont les meilleures capacités à la date de rédaction de cet article, mais ont tendance à perdre de cette efficacité après plusieurs cycles, en plus d'avoir une température de désorption bien plus élevée (de 75 à 150°C) que celle des NPS à 55°C, de même que la silice à 225°C [4]. L'usage des NPS réduit le besoin en chauffage pour la phase de désorption ce qui est un gain énergétique non-négligeable. Qui plus est, il est actuellement impossible de produire de grandes quantités de MOFs à un coût raisonnable en conservant toutes leurs propriétés [9].

2.2 Teneur en minéraux dans l'eau

2.2.1 Équilibre des minéraux

De manière générale, il est indiqué par Rosborg et al [10] que les minéraux doivent être présents de manière équilibrée du fait d'interactions entre eux. Ainsi, le calcium est le minéral le plus présent dans le corps humain et est essentiel aux os et aux dents ; cependant s'il est présent en quantités trop importantes il empêche l'assimilation du magnésium qui participe à la santé cardiaque. Les macroéléments, présents en grandes quantités dans le corps (de l'ordre du mg/L), sont le calcium, le magnésium, les bicarbonates, le sodium, le potassium et les sulphates qui ont les conséquences les plus importantes sur la santé humaine. Les éléments présents à l'état de traces, en quantités bien plus faibles (de l'ordre du µg/L), comptent le zinc, le sélénium, le lithium ou encore le bore. Bien que moins étudiés, un déficit de ces minéraux peut mener à des troubles physiologiques, augmentant le risque de cancer pour un manque de sélénium par exemple, ou encore causant des problèmes mentaux dans le cas d'un déficit en zinc [10].

On peut aussi mentionner qu'en-dehors même des considérations sanitaires, un excès d'un ou plusieurs éléments peut aussi se traduire par un goût ou une odeur désagréable pour l'utilisateur comme le fer ou le chlore ainsi que le souligne Santé Canada [11]. De manière similaire, les eaux dures (haute concentration en carbonate de calcium) ont tendance à causer de l'entartrage tandis que les eaux douces (faible concentration en carbonate de calcium) peuvent être corrosives [12].

Dans le cas d'eaux peu minéralisées, leur ingestion en quantités importantes entraîne des troubles de santé graves, qui commencent par de la fatigue ainsi que des maux de tête et qui peuvent causer des délires voire un coma dans les cas les plus graves [10]. De ce fait, toute eau déminéralisée doit impérativement être reminéralisée, dans les tranches de concentrations en mg/L suggérées dans le tableau 2.1 tiré de Rosborg et al [10], qui mentionne également une fourchette de valeurs pour le pH.

Tableau 2.1 Concentrations dans l'eau des principaux minéraux pour assurer sa potabilité telles que recommandées par Rosborg et al

Paramètre	Tranche
pH	7 - 8,5
Calcium	30 - 80
Magnésium	10 - 50
Bicarbonate	100 - 300
Sulphates	25 - 100
Fluor	0,5 - 1,0
Chlore	20 - 50
Total des solides dissous	100 - 500

2.2.2 Standards de minéralité

Des organismes, tant internationaux (Organisation mondiale de la Santé, OMS), que nationaux (Agence canadienne de l'eau au niveau fédéral, ministère de l'Environnement, de la lutte contre le changement climatique, de la faune et des parcs à l'échelle du Québec, United States Environmental Protection Agency, USEPA aux États-Unis) surveillent et établissent des standards pour les principaux minéraux, métaux et polluants afin de garantir l'apparence et la potabilité de l'eau. Ces valeurs obéissent le plus souvent à des critères esthétiques, notamment de goût, cependant des considérations en termes de santé ont mené notamment à l'introduction de la CMA (concentration maximale acceptable) par Santé Canada qui fixe la valeur de concentration au-delà de laquelle l'organisme recommande une enquête sur la source de contamination et sa correction. Le tableau 2.2 recense les valeurs considérées comme sûres par Santé Canada [13], l'USEPA [14] et l'OMS [15] pour quelques-uns de ces ions les plus communément répandus, ainsi que les quantités maximales fixées par la loi québécoise [16].

Tableau 2.2 Comparaison des concentrations maximales (en mg/L) dans l'eau de quelques éléments selon les recommandations de l'OMS, Santé Canada, la loi québécoise quand disponible et l'USEPA

Espèce	Fer	Zinc	Cuivre	Fluorure	Sodium	Chlorure
OMS	0,3	3,0	2,0	1,5	200	250
Santé Canada	0,3	5,0	1,0	1,5	200	250
Loi québécoise	N/A	N/A	1,0	1,50	N/A	N/A
USEPA	0,3	5	1,3	2,0	N/A	250

Il n'y a pas de recommandations relatives à la reminéralisation d'eau atmosphérique qui est

encore une activité très rare – on peut trouver des informations sur l'eau de pluie qui est également naturellement déminéralisée, cependant le ruissellement apporte divers minéraux et polluants tels que des plastiques, du papier, divers métaux, des nitrates qui sont le point de focalisation des règlements associés [17]. Certains brevets [18] mentionnent les techniques de reminéralisation, qui est nécessaire du fait de la pureté de l'eau récoltée.

2.3 Méthodes de désinfection de l'eau

La désinfection de l'eau est une question vitale pour la santé publique, de nombreuses méthodes ont été développées pour garantir une bonne qualité. Les principales méthodes utilisées de nos jours consistent en la chloration, l'ozonation, la désinfection par UV, la pasteurisation et la filtration [19]. Cependant, la pasteurisation requiert une grande quantité d'énergie et la filtration requiert un entretien régulier du système pour éviter tout encrassement, ce qui n'est pas adapté à une utilisation autonome dans des régions reculées. Les filtres fonctionnent par adsorption, sédimentation ou coagulation dans un milieu poreux (sable) ou par exclusion stérique éliminant les micro-organismes selon leur taille grâce à une membrane, ces derniers requérant également un apport énergétique conséquent. Ces systèmes sont dans l'ensemble considérés compliqués à opérer ou à entretenir. Dans le cadre de ce projet, chloration, ozonation et désinfection par UV seront les seuls systèmes étudiés. Cette section portera d'abord sur l'efficacité de la désinfection avant d'étudier les principaux avantages et inconvénients de la chloration, l'ozonation et la désinfection par UV.

2.3.1 Efficacité de désinfection

L'efficacité de la désinfection est caractérisée par la quantité de micro-organismes éliminés durant le processus, comme vu précédemment en introduction. Ces valeurs vont changer selon les micro-organismes en question mais aussi en fonction de la méthode utilisée, des caractéristiques de l'eau et du temps de contact. De manière générale, l'efficacité de désinfection est mesurée à l'aide du Ct (concentration du désinfectant $\times$ temps de contact), ce qui implique que la durée d'exposition joue un rôle tout aussi important que la concentration dans l'efficacité de la désinfection. Dans le cas de l'utilisation d'ultraviolets, on parle plutôt de fluence qui correspond à la dose d'UV reçue.
Il a été vu plus tôt que les crédits de désinfection accordés par le gouvernement du Canada ne permettent une validation de la méthode de désinfection que si la réduction du nombre de micro-organismes correspond à 3 log d'enlèvement pour *Giardia* et *Cryptosporidium*, et 4 log pour les virus. Ceci correspond à une fluence de $20 mJ/cm^2$ au maximum pour *E. Coli*, $25 mJ/cm^2$ au maximum pour *Cryptosporidium*, et $28 mJ/cm^2$ au maximum pour *Giardia*

d'après Malayeri et al [20]. La majorité des virus requièrent $200mJ/cm^2$ ou moins pour une désinfection de 4 log, mais l'espèce la plus résistante requiert $325mJ/cm^2$ d'après Malayeri et al [20]. La plupart des exigences légales s'appliquent aux eaux de surface, il n'en existe pas pour le cas des eaux issues directement de l'atmosphère. Dans ce dernier cas qui nous intéresse, les contaminants seraient aéroportés et correspondent à des micro-organismes des genres *Cladosporium*, *Penicillium*, *Aspergillus* [21] qui requièrent des doses similaires, par exemple $15mJ/cm^2$ pour *Cladosporium cladosporioides* [22]. Nous conserverons de ce fait les doses recommandées dans la littérature.

2.3.2 Chloration

La désinfection au chlore, répandue notamment en Amérique du Nord, peut être réalisée à partir de diverses formes du chlore, notamment dioxyde de chlore gazeux (ClO_2), dioxyde de chlore liquide et hypochlorite de sodium ($Na(OCl)_2$) [23]. Ce dernier est moins efficace que les deux premiers [24] mais moins cher (environ 650 CAD/tonne contre 2 000 CAD/tonne) et ne présente pas de risques d'explosion [25]. Lors de la désinfection, ces composés réagissent avec l'eau pour former de l'acide hypochloreux HOCl [26], un acide faible qui peut se dissocier en H^+ et OCl^-, qui est un oxydant très puissant et le principal désinfectant, tandis que pour le dioxyde de chlore l'espèce métastable O_2^- est la source de la désinfection [23]. Le pH de l'eau est important, puisqu'il va favoriser l'une ou l'autre des formes HOCl ou OCl^- dont le pKa est de 7,5. HOCl est électriquement neutre et permet une meilleure désinfection des biofilms et bactéries en suspension en passant au travers des membranes tandis que OCl^- est chargé et ne pénètre pas aussi bien la membrane électriquement neutre des biofilms [23]. Le chlore est utilisé pour la désinfection dans les systèmes de traitement des eaux potables du fait de sa présence résiduelle qui permet de fournir une désinfection continue dans le système et éviter une nouvelle contamination par des micro-organismes introduits après la désinfection initiale. Le principal inconvénient de cette méthode est la création de sous-produits durant la désinfection (DBPs, disinfection by-products) qui sont cancérigènes [27]. Enfin, le chlore est connu pour donner mauvais goût à l'eau consommée [19]. Si la désinfection s'effectue en point d'usage (Point of use, POU), utiliser du chlore n'est plus aussi utile car la désinfection a lieu immédiatement avant la consommation éliminant le besoin de résiduel et il n'y aura donc pas de présence de biofilms, de plus l'odeur dégagée par le chlore peut être dérangeante pour l'utilisateur. Ne pas utiliser de chlore permettrait aussi de s'affranchir d'une régulation stricte du pH.

2.3.3 Irradiation UV

L'utilisation des UV pour la désinfection remonte à 1910, mais avait un coût trop élevé à l'époque par rapport aux composés chlorés. Ce n'est que dans les années 1980 que cette méthode a commencé à être réellement développée, avant que son efficacité supérieure au chlore contre les micro-organismes plus résistants ne soit reconnue dans les années 2000. Les spores, virus et adénovirus requièrent néanmoins des doses plus importantes pour être désinfectés efficacement.

L'efficacité de la désinfection UV est mesurée via l'irradiance, ou taux de fluence. La fluence, qui permet de quantifier l'efficacité de désinfection, est donnée par la formule (2.1) et correspond au taux de fluence multiplié par le temps d'exposition, notant f le taux de fluence (ou irradiance), t le temps d'exposition, N le nombre de micro-organismes initial, N_t le nombre de micro-organismes après un temps t d'exposition et k le taux d'inactivation.

$$^{10}log(\frac{N_t}{N}) = -k \times f \times t \tag{2.1}$$

Dans l'ensemble, le taux d'inactivation des micro-organismes est linéaire avec la fluence jusqu'à un certain palier qui correspond à la saturation par les UV. Si pour la plupart des micro-organismes les dégâts causés par les UV sont irréparables et l'inactivation définitive, certains tels que *Giardia* ont développé des méthodes de réparation et peuvent survivre à la désinfection UV [28]. Une conséquence de l'utilisation des UV est l'absence de résidus contrairement au chlore.

Pour inactiver la plupart des bactéries, une dose de $20mJ/cm^2$ permet d'obtenir 3 log d'inactivation i.e. 99,9% d'inactivation de pathogènes, mais pour les virus cette valeur doit être augmentée à $100mJ/cm^2$ et $200mJ/cm^2$ pour les adénovirus pour une longueur d'onde UV fixée à 253,7nm [28]. Pour *Cryptosporidium*, une dose de $12,5mJ/cm^2$ permet une inactivation de 2 log [29]. Les traditionnelles lampes au mercure utilisées pour la désinfection émettent au niveau du pic du mercure à 253,7nm. Cependant, elles ont besoin de plusieurs minutes pour démarrer et atteindre une intensité stable, ont une forte consommation énergétique (au moins 40W, généralement plus de 100W) et peuvent présenter des dangers en cas d'incidents du fait de la présence de mercure [30].
Des diodes électro-luminescentes (DEL) émettant dans les UV ont été développées récemment et peuvent émettre à des longueurs d'onde au choix entre 250 et 280nm et sont de taille bien plus réduite et plus économiques énergétiquement, la puissance requise étant de l'ordre de 100mW. Elles ne sont cependant utilisables que pour des systèmes plus petits du fait de leur intensité d'émission plus faible : on peut voir qu'une lampe au mercure requérant

une puissance de 40W a une efficacité similaire à 8 DELs de 0,5W [31]. L'équation (2.2) est suggérée par [32] pour modéliser l'irradiance I d'une DEL UV selon l'angle de vue α à une distance r de la source, pour une puissance P : il y a peu d'irradiance perçue à des angles plus élevés qu'une dizaine de degré comme la figure 2.1 le montre.

$$I = \frac{P}{2\pi r^2(1 - cos(\alpha))} \tag{2.2}$$

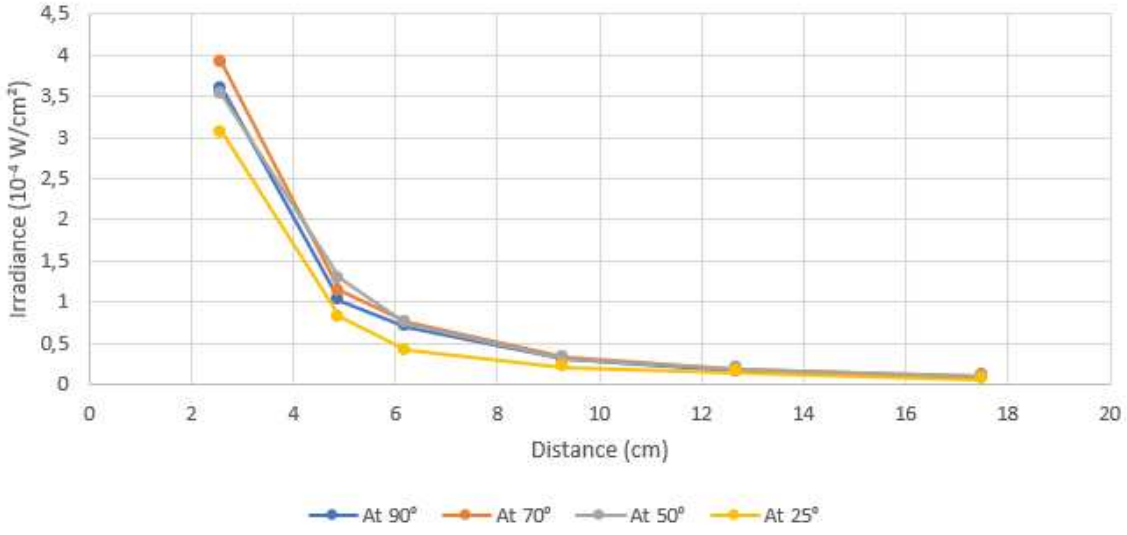

FIGURE 2.1 Irradiance normalisée d'une DEL UV d'après l'équation (2.2)

Il a été rapporté que le pH et la concentration en bactéries n'influent pas sur le log d'inactivation. Combiner des DELs de longueurs d'onde différentes pourrait améliorer l'efficacité de désinfection [33]. Il faut aussi rappeler que ceci n'est valable que pour des eaux claires, i.e. à basse turbidité. La présence de particules augmente l'absorption des UV et réduit d'autant l'efficacité de la désinfection [34].

Le taux de fluence émis par une source lumineuse décroît très rapidement avec la distance à la source et selon l'angle du fait de la faiblesse de la puissance émise. De ce fait, une exposition trop limitée peut permettre à certains micro-organismes de commencer à se réparer et mener à une diminution de l'efficacité de la désinfection [28]. Une réserve importante sur les mesures d'efficacité de désinfection est qu'il a été observé que les souches issues d'un laboratoire semblent avoir une résistance amoindrie aux UV par rapport aux spécimens naturels [28].

2.3.4 Ozonation

L'ozone (O_3) est un gaz, instable à température et pression ambiantes, connu notamment pour ses propriétés oxydantes qui en font un excellent désinfectant. Il se décompose dans l'eau et forme des radicaux, notamment peroxyde d'hydrogène (H_2O_2) et hydroxyl (HO) qui rompent les liaisons chimiques des pathogènes et les rendent inertes.

De manière générale, l'ozone est très efficace en termes de désinfection, tuant très efficacement les micro-organismes, bactéries, virus et spores par oxydation en attaquant la membrane et la rendant perméable, mais détruisant aussi directement le matériel génétique et ne laissant aucun résidu [35]. Un temps de contact très réduit est requis et la génération de l'ozone peut être faite sur site [36].

Cependant, les principaux inconvénients sont la faible efficacité des bas dosages en ozone (Penru et al [37] montre qu'en-dessous de 1 mg/L, l'efficacité chute considérablement), la complexité de l'équipement requis pour en produire et le coût énergétique de la production, la production d'ozone requérant au moins 100W [38]. Il faut également un personnel hautement qualifié pour l'entretien du système de production du fait notamment de la dangerosité liée à l'utilisation de plasma [19]. En tant qu'espèce instable, l'ozone a également un temps de demi-vie qui est influencé par la température mais aussi le pH, rendant l'utilisation d'ozone dépendante des conditions climatiques (sauf à contrôler la température interne du dispositif, utilisant plus d'énergie) et des propriétés de l'eau : il est notamment de l'ordre de 5,5 minutes à 25°C [38]. Le temps de demi-vie diminue lorsque la température et le pH augmentent [38]. Du fait de l'instabilité des radicaux formés, l'ozone n'est utilisable qu'en POU et n'a pas de présence résiduelle contrairement au chlore. Malgré son efficacité, il peut toujours y avoir des souches qui survivent et qui peuvent, par la suite, se multiplier en l'absence de désinfection suivie [36].

L'ozone est généralement généré par la création d'un plasma ce qui requiert une importante source d'énergie ainsi qu'un équipement de taille conséquente. Cependant il a été rapporté qu'il est désormais possible de créer des plasmas par micro-cavités, de taille inférieure à 1mm, à pression atmosphérique et faible température. Le contrôle de la taille des cavités permet de choisir une énergie précise sous forme de photons UV [39]. Un dispositif a été ainsi conçu utilisant entre 4 et 6 puces de 5cm de long produisant de l'ozone à partir de bouteilles d'oxygène ou d'air ambiant au prix de l'efficacité de la production d'ozone. Ce système permet de produire autant d'ozone que les systèmes traditionnels mesurant plusieurs mètres de long, la production étant de l'ordre de 5g/h. Un tel système a été mis en œuvre au Kenya pour désinfecter de l'eau de rivière extrêmement polluée – turbidité supérieure à $1000 NTU$, concentration en *E. coli* et coliformes au-delà de ce que les auteurs pouvaient mesurer [40].

Le système fonctionne en POU, sachant qu'une puce à microplasma ne requiert pour son fonctionnement qu'un panneau solaire de 15W assisté de batteries pour usage nocturne. Il consiste en un réservoir d'ozonation de 1 000L où de l'eau de la rivière polluée arrive après filtration et pendant 3 heures l'ozone est ajouté. A cette fin, 4 puces à microplasma ont été installées avec une pompe à air (2L/min) fournissant 0,2 à 0,35g d'ozone par heure dépendant de l'humidité ambiante et pour une consommation énergétique de 10 à 14W par unité. Afin d'éviter la corrosion, la plomberie a été réalisée en Téflon et polychlorure de vinyle (PVC) [40]. Les résultats ont permis un log d'enlèvement entre 2 et 3 des coliformes, principaux micro-organismes présents, respectant les critères Kényan et de l'OMS – aucun coliforme ni *E. coli* n'a été détecté dans l'eau testée de manière indépendante. En réalisant deux désinfections par jour, il serait possible de traiter jusqu'à 2 000L d'eau par jour de cette manière.

2.3.5 Comparaison des coûts

Si on considère les trois techniques de désinfection présentées ci-avant, on peut réaliser une table des coûts énergétiques et financiers de chaque technique. Le tableau 2.3 a été réalisé à partir des informations de [40, 41] et en comparant les prix du marché pour les tablettes de désinfection au chlore, à l'ozone et pour la lampe au mercure ; et par rapport au prix des DELs UV de modèle Standard POB series TUD7MF1B de Seoul Viosys.

Tableau 2.3 Comparaison du coût de l'eau désinfectée selon les trois méthodes

Méthode de désinfection	Lampe Hg	DELs UV (10 DELs)	Ozonation	Microplasma (1 module)	Chlore (1000 pilules)
Coût d'achat	40CAD	300CAD	100CAD	300CAD	150CAD
Puissance requise	25W	10W	120W	15W	0W
Durée de vie	1 an	2,5 ans	2 ans	4,5 ans	N/A
Volume d'eau traité	1 000L	1 000L	4 000L ou plus	4 000L ou plus	1 000L
Traitement quotidien	15-30min	Quelques minutes	Environ 1h	3h répétables	Quelques minutes
Coût énergétique au litre	12,5 mWh/L	1 mWh/L	3 mWh/L	11,3 mWh/L	N/A
Coût de l'eau	0,04 CAD/L	0,30 CAD/L	Moins de 0,03 CAD/L	Moins de 0,08 CAD/L	0,15 CAD/L

La désinfection par l'ozone apparaît comme la méthode la moins chère a priori, mais seuls les coûts d'acquisition ont été pris en compte, hors coûts de maintenance. Il faut également ajouter que ces coûts ne reflètent pas les mesures de sécurité à ajouter dans le cas de l'ozone ou des lampes à mercure, ni du fait que, selon la méthode choisie, les matériaux sont différents (quartz pour les UV, PVC pour l'ozone). Ceux-ci sont inexistants dans le cas du chlore, mais celui-ci est un consommable à recharger régulièrement et il a été vu précédemment qu'il y a des risques pour la santé ainsi que des risques de corrosion selon les matériaux utilisés pour la construction du système [42]. Dans le cas des DELs UV, le prix au litre est plus élevé, mais il va sans doute baisser au fur et à mesure que la technologie des DELs UV va se développer. Qui plus est, les DELs UV ne nécessitent un remplacement en moyenne que tous les 2 ans

et demi et consomment moins que le générateur d'ozone tout en ne présentant aucun danger pour la santé humaine, du moment où les DELs demeurent à l'intérieur du dispositif.
A l'inverse, l'ozonation semble la meilleure méthode du point de vue du prix au litre de l'eau, mais il s'agit encore d'une méthode expérimentale qui n'est pas disponible sur le marché. Si, dans le futur, la technologie se développe, sa plus grande disponibilité ainsi que les coûts réduits la rendraient plus intéressante. Enfin, lampe au mercure et ozonateur requièrent une puissance fournie bien plus élevée que les DELs ou même le microplasma. Le prix de l'expérience au Kenya décrite plus haut a été de 24 000 USD, lié au coût de fabrication et d'installation [40].
Malgré le prix plus élevé, les DELs UV semblent être la meilleure option pour une région reculée puisqu'elles sont adaptées à un usage POU tout en étant commercialement disponibles en grandes quantités. Leur durée de vie dans les conditions opératoires étant de plusieurs années, il n'y a également pas de problèmes liés à une maintenance trop fréquente.

2.3.6 Paramètres des ultraviolets

La désinfection par UV traditionnelle s'appuie sur des lampes au mercure émettant à 253,7nm. Ceci cependant est remis en question de par les limitations des lampes au mercure mentionnées plus tôt et l'impossibilité de choisir la longueur d'onde d'émission, liée au pic d'émission du mercure. De ce fait, il faut se tourner vers les DELs pour pouvoir considérer d'autres longueurs d'onde peut-être plus appropriées, tout en prêtant attention aux risques associés et en gardant à l'esprit que la longueur d'onde d'absorption maximale varie légèrement d'un micro-organisme à l'autre [43].
Pour un usage près des humains notamment, il est dangereux d'utiliser des longueurs d'onde comprises entre 250 et 290nm du fait de leurs capacités mutagènes, alors qu'à l'inverse les longueurs d'onde inférieures à 230nm sont absorbées par l'épiderme et sont de ce fait compatibles avec la peau humaine, ce qui crée des opportunités pour la désinfection de surface, notamment via l'usage de certaines lampes à 222nm [39]. Les photons à plus haute énergie de l'UV lointain (longueur d'onde inférieure à 200nm) peuvent rompre les liaisons chimiques et sont de ce fait très efficaces en termes d'élimination des micro-organismes avec des lampes au Xe_2 notamment. Cependant ils ne conviennent qu'à des traitements de surface du fait de leur très forte absorption par l'eau [44].

Une DEL émettant à 275nm consomme deux fois moins d'énergie qu'une DEL à 260nm ce qui signifie qu'une longueur d'onde plus élevée sera moins chère à utiliser et perdra peu en efficacité, la fluence requise pour obtenir un log de désinfection donné étant pratiquement inchangée tandis qu'elle augmente fortement au-delà de 280nm, rendant les longueurs d'onde

plus élevées bien moins efficaces. Dans le domaine de la désinfection UV, il est désormais possible grâce au développement des DELs de choisir une longueur d'onde d'émission. La longueur d'onde idéale semble être de 260nm, qui est le niveau du maximum de l'absorbance de l'ADN [28], confirmé par Oguma et al [45] où les meilleurs résultats sont obtenus à 265nm. Toutefois, une longueur d'onde de 275nm, bien que légèrement moins germicide, sera dans l'ensemble plus efficace énergétiquement pour la désinfection comme montré par Pramanik et al [46]. Utiliser les DELs en mode pulsé, c'est-à-dire en exposant brièvement aux UV de manière répétée, semble aussi une méthode prometteuse pour améliorer l'efficacité du traitement comme discuté par Wengraitis et al [47]. La plupart des études sur la désinfection UV considèrent les paramètres relatifs à 253,7nm du fait de l'utilisation majoritaire des lampes à mercure.

S'il est établi que la désinfection dans l'eau autour de 270nm est plus efficace, la fluence requise est différente de même que nombre de paramètres du système [48]. Pour réduire encore plus les pertes d'intensité via les parois du réacteur, différents matériaux ont été utilisés par Hajimalayeri [32] pour étudier leur capacité de réflexion et son effet sur la désinfection. Une culture bactérienne liquide de *E. Coli* est placée dans une boîte de Pétri ouverte constituée du matériau d'intérêt, puis illuminée par des lampes UV à 265nm, 275nm et 285nm indépendamment donnant les résultats résumés dans le tableau 2.4 pour une fluence de $4mJ/cm^2$.

Tableau 2.4 Comparaison de l'amélioration du log d'inactivation de *E. Coli* pour différents revêtements et longueurs d'onde, entre parenthèses l'incertitude

Matériau	265nm	275nm	285nm
Quartz	1,3 (0,1)	1,2 (0,3)	0,40 (0,05)
Acier inoxydable	1,35 (0,30)	1,75 (0,10)	0,55 (0,20)
Aluminium	1,8 (0,1)	2,7 (0,5)	0,6 (0,2)
Téflon	2,4 (0,1)	N/A	1,2 (0,3)

L'objectif était de respecter les critères de l'USEPA (United States Environmental Protection Agency) de 2006 pour une désinfection de 3 log pour Cryptosporidium et Giardia.

En conclusion, la longueur d'onde la plus adaptée est 275nm, sachant que des DELs UV émettant entre 260 et 285nm permettent dans l'ensemble une désinfection efficace de l'eau selon la disponibilité des DELs commerciales.

2.4 Systèmes de désinfection de l'eau

2.4.1 Systèmes développés précédemment

Divers systèmes ont été conçus pour la désinfection par les DELs UV, essentiellement protégés par des brevets. La plupart considèrent un réservoir d'eau à traiter, dans lequel ou à l'extrémité duquel des lampes ou DELs UV sont fixées, irradiant l'ensemble du réservoir pour permettre la désinfection. On peut trouver parmi les brevets [49] et même à la vente [50] une suggestion de système fonctionnant avec une lampe UV à mercure qui est installée à l'intérieur du réservoir émettant dans toutes les directions, mais d'autres systèmes récents se sont adaptés aux DELs UV comme le montre le brevet [51] qui envisage une plaque sur laquelle des DELs sont installées pour illuminer le réservoir depuis une extrémité, également suggéré par Hessling et al [44]. Plus récemment a été breveté un système proposant de multiples positions pour un système de désinfection aux DELs UV, plaçant ce dernier dans le réservoir, à l'entrée et à la sortie ou seulement à la sortie, voire le long du réservoir [52]. Un aspect important de ces systèmes est que les réflexions et réfractions internes mènent à une baisse de l'efficacité de désinfection du réacteur lorsque la transmittance est très élevée, c'est-à-dire dans le cas d'un système de désinfection de l'eau potable notamment [53]. Enfin, Oguma et al [54] suggèrent l'utilisation de DELs équidistantes sur des cylindres ou bagues circulaires placés autour du réservoir de désinfection.

On peut enfin parler d'un guide de l'USEPA pour la conception d'un système de désinfection par UV [55], qui mentionne comme points importants de la préparation d'un tel projet :

1. définir l'objectif de la désinfection et identifier les micro-organismes cibles
2. déterminer les paramètres du système (qualité de l'eau, débit de l'eau, puissance des lampes UV)
3. évaluer l'équipement de désinfection potentiel
4. évaluer les options de certification de l'équipement
5. évaluer les stratégies opérationnelles et de contrôle
6. identifier des sources d'UV alternatives par l'étude de l'infrastructure existante
7. comparer les options et leurs coûts

D'autres recommandations sont faites pour la construction d'un site de désinfection, mais elles ne s'appliquent pas au contexte d'un dispositif AWH. On en retiendra que, pour ce projet et en l'absence de prototype, la détermination des paramètres d'usage est l'aspect le plus important, les autres points ayant été évalués dans cette revue de littérature.

2.4.2 Disposition des DELs dans le système

Outre leur simple présence dans le système, la disposition des DELs au sein du système a une influence sur l'efficacité finale de la désinfection. En effet, il a été montré par Oguma et al [54] que la distance entre les DELs influe sur l'efficacité de désinfection en créant des régions surexposées et sous-exposées. Un faible écartement entre les DELs, typiquement deux DELs collées l'une à l'autre, crée une zone très fortement désinfectée mais d'étendue limitée tandis qu'un écartement plus important répartit la désinfection dans toute la région entre les groupes de DELs. Une configuration collée réduit l'efficacité énergétique car les micro-organismes traités et inactivés dans la région fortement désinfectée reçoivent une dose plus élevée que nécessaire. Pour un débit de 800mL/min et des DELs UV à 285nm émettant à 1,3mW unitairement, la désinfection passe de 4,0 log d'enlèvement de *E. Coli* en configuration collée à 5,5 log si les DELs sont écartées de 20mm et à 4,5 log d'enlèvement pour un écartement de 40mm entre les DELs [54].

Par ailleurs, il y a été montré qu'en utilisant un écoulement Poiseuille, l'efficacité de la désinfection est plus importante car l'écoulement est plus stable, donc la fluence est mieux répartie. En effet, le log de désinfection de *E. Coli* est passé de 1,1 à 2,6 puis à 6,0 en éloignant la zone de désinfection de l'entrée d'eau de 100mm à chaque mesure pour un flux de 600mL/min [54].

2.4.3 Production d'eau liquide par adsorbants

Les NPS, comme les autres adsorbants, commencent par adsorber la vapeur d'eau amenée par l'air extérieur au système chargé d'humidité. Par la suite, l'air sec est chauffé et envoyé de nouveau dans le système afin de désorber l'eau des NPS en circuit fermé. En effet, augmenter la température de l'air diminue son humidité relative et de ce fait facilite le processus de désorption. L'eau liquide est obtenue par condensation de cette vapeur d'eau sur une surface plus froide du fait de la saturation de l'air en eau [56]. Ce système fonctionne aussi dans les climats arides, en utilisant l'accroissement de l'humidité atmosphérique durant la nuit. Cette eau peut ensuite être stockée dans un réservoir et subir des étapes de reminéralisation et désinfection afin d'être rendue potable pour l'utilisateur final.

2.5 Simulations numériques pour le système de désinfection

2.5.1 Choix du logiciel de simulation

La modélisation d'un système de désinfection reposant sur l'utilisation des ultraviolets a souvent été effectuée à l'aide de calculs mathématiques [57,58], permettant de prédire la fluence en divers points du système et de l'efficacité de désinfection. Cependant ce modèle théorique ne convient plus pour des systèmes plus complexes où la simulation numérique offre bien plus de possibilités. Parmi ces logiciels de simulation numérique 3D, on peut noter l'utilisation dans le cadre d'études sur des systèmes de désinfection de MATLAB [59] mais aussi d'OpenFOAM [60], d'ANSYS [60,61] et de COMSOL [60,62]. Dans l'ensemble, OpenFOAM a pour avantage sa gratuité et le fait que l'utilisateur rentre personnellement les données et équations, assurant ainsi un contrôle complet du processus.

Le revers de la médaille est la complexité d'utilisation du logiciel qui ne fonctionne que sous système Linux et qui n'a pas d'interface utilisateur propre le rendant plus complexe à utiliser notamment pour un novice [63]. MATLAB fonctionne essentiellement grâce à des formules de codes et une multitude de fonctions préprogrammées, mais demeure dans l'ensemble un logiciel dédié à la postproduction des résultats de simulation, notamment les graphiques. ANSYS et COMSOL sont des logiciels de simulation très similaires [46] qui permettent de prendre en compte plusieurs modèles physiques et de les intégrer dans un modèle final.

En général, la littérature semble indiquer que les résultats obtenus via COMSOL sont plus précis que ceux obtenus par ANSYS [64, 65]. Pour obtenir rapidement des résultats précis, l'utilisation de COMSOL pour les simulations permettra donc un gain de temps par rapport à OpenFOAM et de précision par rapport à ANSYS. Le logiciel est également plus adapté et simple d'utilisation que MATLAB en ce qui concerne la modélisation d'un système 3D de désinfection. De ce fait, le principal logiciel utilisé pour les simulations présentées est COMSOL, utilisé en version 6.1 pour faire fonctionner la simulation de la fluence avec les modules Ray Optics et Laminar flow.

2.5.2 Écoulement piston dans le système de désinfection

L'écoulement piston (plug-flow en anglais) est un écoulement dans un cylindre où la vitesse du fluide est constante tout le long de la portion étudiée. Le profil de vitesse ainsi formé est de forme parabolique présentant un maximum situé au centre du cylindre. Il faut généralement une certaine longueur de cylindre pour qu'un tel écoulement se produise. Dans le cadre de cette étude, l'hypothèse d'un écoulement piston a permis de simplifier les simulations par rapport à des écoulements turbulents. De ce fait, une partie du système de désinfection est

dédiée à créer cet écoulement.

CHAPITRE 3 ÉLÉMENTS DE LA PROBLÉMATIQUE ET OBJECTIFS

Les NPS peuvent fournir de l'eau par condensation de l'eau atmosphérique, cependant sa qualité en termes de teneur minérale et microbiologique n'a pas été déterminée jusqu'à présent.

3.1 Étude de l'eau fournie par condensation capillaire

L'eau fournie par un système de génération d'eau atmosphérique est a priori déminéralisée. Cependant, avant d'être obtenue sous forme liquide elle a été en contact avec les NPS. Déterminer la qualité physico-chimique de l'eau obtenue permet de s'assurer que les NPS ne contaminent pas l'eau générée avec des ions et sont ainsi une source fiable d'eau atmosphérique destinée à la consommation humaine. La présence d'une potentielle contamination de l'eau générée demanderait d'en identifier la source et de l'éliminer si elle est dommageable à l'utilisateur du système.

3.2 Désinfection

Fabriquer un prototype de génération d'eau atmosphérique requiert notamment d'en concevoir le système de désinfection. Ce dernier doit obéir aux réglementations relatives au traitement des eaux, mais aussi permettre d'utiliser le système dans des régions isolées et doit donc si possible éviter la présence de tout consommable, tout en ayant une consommation énergétique aussi faible que possible par rapport à son efficacité. Un tel système devrait aussi avoir une taille limitée afin de faciliter la fabrication et le transport jusqu'à la région d'utilisation.

3.3 Éléments à préciser

En l'absence de données expérimentales, il est important de tester les NPS en laboratoire et vérifier l'effet de leur contact avec l'eau sur le contenu minéral de cette dernière. Pour ce faire, un protocole devra être conçu pour tester l'eau en question et remédier à toute situation qui aurait un effet négatif sur le contenu voire les propriétés des NPS ou de l'eau produite. Enfin, si des systèmes de désinfection par DELs UV ont été conçus, il n'y a pas de méthode de conception d'un tel système permettant notamment de modifier ses paramètres pour répondre aux besoins de l'utilisateur et adapté à l'usage des NPS.

3.4 Objectifs spécifiques de recherche

L'objectif général du présent travail est d'une part de s'assurer que l'eau produite par les NPS soit bien déminéralisée et sera propre à la consommation après des étapes de reminéralisation et de désinfection et d'autre part de réaliser des simulations informatiques pour concevoir un tel système de désinfection efficace de l'eau produite. Les objectifs spécifiques de ce mémoire sont donc :

1. Établir un protocole pour vérifier la teneur en minéraux de l'eau générée par un prototype de génération d'eau atmosphérique
2. Confirmer l'absence de minéraux dans l'eau générée ou, à défaut, déterminer leur source et établir un protocole pour traiter l'eau ou les NPS de manière à respecter les normes relatives à l'eau potable
3. Établir par simulations COMSOL une méthode de conception d'un système de désinfection utilisant un procédé économique pour un environnement isolé.

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE

Dans cette section, les différentes méthodes utilisées dans le cadre de cette maîtrise sont décrites. Dans un premier temps, les méthodes de mesure de la qualité de l'eau sont couvertes : alcalinité et mesure des concentration en ions. Ensuite, la gravimétrie d'adsorption de vapeur d'eau (dynamic vapor sorption, DVS) et la méthodologie pour réaliser les simulations réalisées sur COMSOL sont présentées.

4.1 Alcalinité

4.1.1 Définition et utilité

L'alcalinité est une propriété de l'eau qui traduit sa capacité à neutraliser les acides. Elle mesure la somme des concentrations en certains anions, nommément les carbonates (CO_3^{2-}), bicarbonates (HCO_3^-) et hydroxyles (HO^-) qui réagissent tous en présence d'ions hydronium H^+ et contribuent donc à la neutralisation des acides.

4.1.2 Protocole de mesure

La mesure de l'alcalinité dite totale (ions carbonates sous la forme CO_3^{2-} et bicarbonates sous la forme de HCO_3^-) a été réalisée à l'aide d'un titrage à l'acide sulfurique via le protocole suivant :

1. Prélever avec une pipette jaugée 50mL d'échantillon d'eau (V_{eau}) et les verser dans un bécher préalablement lavé et sec.
2. Mesurer le pH de l'eau dans l'état initial à l'aide d'un pH-mètre Accumet Research Model AR25.
3. Commencer le titrage dans ce bécher à l'aide d'acide sulfurique à concentration de 0,02N en baissant le pH de la solution à 4,5 (dans la fourchette 4,3 à 4,7) et en notant le volume de la burette graduée avant de commencer ($V_{initial}$) ainsi que lorsque la valeur cible est atteinte (V_{virage}). Prendre soin d'agiter et de mesurer le pH en permanence pour réduire les risques de dépassement.
4. Une fois à pH 4,5, le titrage doit être poursuivi avec précaution pour une baisse de pH de 0,30, à ce point arrêter le titrage et noter le nouveau volume de la burette (V_{final}).
5. Calculer l'alcalinité de l'eau par la formule (4.1).

Le résultat est en mg de $CaCO_3$ (carbonate de calcium) par litre de d'eau.

$$Alcalinité = (2 \times (V_{initial} - V_{virage}) - (V_{initial} - V_{final})) \times c_{H2SO4} \times 50000/V_{eau} \quad (4.1)$$

La valeur de pH de 4,5 est importante car il s'agit du pH où la concentration des ions bicarbonates devient négligeable et seule la concentration d'acide carbonique H_2CO_3 est mesurée, par ailleurs les ions carbonates dominent au-delà de pH=10,3 ; il s'agit du point de virage final de tous les titrages alcalimétriques [66].

La courbe 4.1 présente l'un de ces titrages :

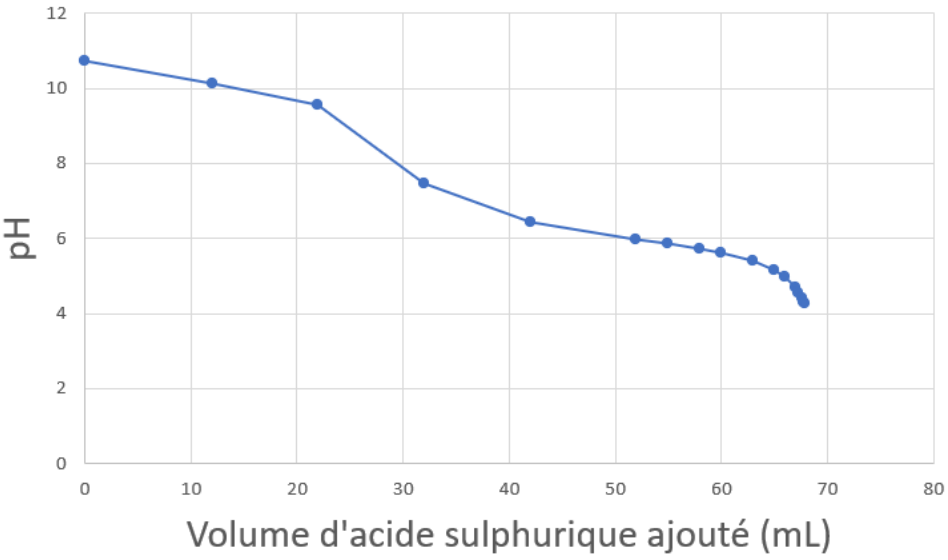

FIGURE 4.1 Tirage pHmétrique d'eau très alcaline par de l'acide sulfurique à 0.02N

Dans le cas de cette figure, le volume initial d'eau est de 50mL. Le volume d'acide sulfurique nécessaire pour atteindre un pH de 4,57 a été de 67,3mL, puis un nouvel ajout de 0,45mL a permis d'atteindre un pH de 4,27. De par la formule (4.1), l'alcalinité est :

$$Alcalinité = (2 \times (67,3) - (67,3 + 0,45)) \times 0,02 \times 50000/50 = 1335 mg CaCO_3/L \quad (4.2)$$

L'erreur de mesure e est liée à la lecture du volume d'acide sur la burette, limitée à 0,025mL qui est la même erreur que pour le volume d'eau introduit par pipette jaugée de 50mL. De par (4.3), l'erreur de mesure est de l'ordre de 75mg $CaCO_3$ /L qui correspond à 5,7% de la valeur trouvée en (4.2).

$$\begin{aligned} \frac{\Delta Alcalinité}{Alcalinité} &= \frac{0,025}{67,3} + \frac{0,025}{67,3} + \frac{0,025}{0,45} + \frac{0,05}{50} \\ &= 3,71 \times 10^{-4} + 3,71 \times 10^{-4} + 5,56 \times 10^{-2} + 1,00 \times 10^{-3} = 5,73 \times 10^{-2} \\ e &= \Delta Alcalinité = 75,8 mg CaCO_3/L \end{aligned} \tag{4.3}$$

Dans le cas d'une solution très peu alcaline (de l'ordre de 1mg $CaCO_3/L$), introduire un faible volume d'acides provoque après quelques dixièmes de millilitres une chute de pH en-deçà de 4,3. A ce moment, il est impossible d'obtenir une valeur précise puisqu'ajouter une seule goutte d'acide suffit à dépasser la zone de virage.

4.2 Mesures de concentrations

Des mesures de concentrations ont également été réalisées pour les ions lithium Li^+, sodium Na^+, ammonium NH^{4+}, potassium K^+, magnésium Mg^{2+} et calcium Ca^+ afin de déterminer la présence de tout contre-ion associés aux carbonates. L'appareil utilisé est un chromatographe ionique ICS 5000 AS-DP DIONEX Thermo Scientific. Les échantillons ont été préparés en filtrant l'eau à l'aide de filtres 0,45µm pour éliminer les impuretés (notamment des traces de NPS) puis déposés dans des fioles de 1,5mL. Si la concentration totale en ions était de plus de 150mg/L, une dilution de l'échantillon était requise pour obtenir des valeurs dans les limites de la courbe de calibration.

Le carbone organique total (COT) a été mesuré à l'aide d'un appareil Sievers M5310C Laboratory TOC Analyzer.

4.3 Méthode de gravimétrie d'adsorption d'eau (Dynamic vapor sorption (DVS))

La méthode de gravimétrie d'adsorption d'eau, dite "dynamic vapor sorption" (DVS) en anglais, est une méthode qui permet de mesurer l'évolution de la masse d'un échantillon en contact avec de l'air dans un environnement fermé et une humidité relative contrôlée. Les essais sont réalisés dans une boîte à gants fermée, dans laquelle sont placés des capteurs d'humidité ainsi qu'un porte-échantillons. Ce dernier est attaché à une balance de précision qui mesure la masse de l'échantillon au cours du temps. Les capteurs sont reliés à un humidificateur par une carte Arduino et le circuit permet de contrôler l'humidité à l'intérieur de la boîte en continu par ordinateur, et de la maintenir à une valeur fixée. Les mesures ont été effectuées à des paliers de 95%, 60% et 30% d'humidité relative (RH) pour étudier l'effet de différents climats sur la capacité de l'échantillon à capter l'eau atmosphérique.

Dans ce cas, la DVS a été utilisée pour étudier l'influence du rinçage des NPS sur leur efficacité en termes de rétention d'eau.

4.4 Diodes électroluminescentes

4.4.1 Caractéristiques des diodes

Les diodes électroluminescentes (DELs) utilisées sont du modèle Standard POB series TUD7MF1B de Seoul Viosys et émettent dans l'UV-C avec un pic à 275nm et une distribution gaussienne autour de cette valeur. La modélisation sur COMSOL a considéré que la distribution des longueurs d'onde était réduite à un pic à 275nm et 11,5mW comme étant la puissance émise par chaque DEL. La modélisation de l'émission des UV a été effectuée selon la distribution angulaire de puissance correspondant à la courbe en 4.2 comparant les données du constructeur à la modélisation montrée en formule (4.4).

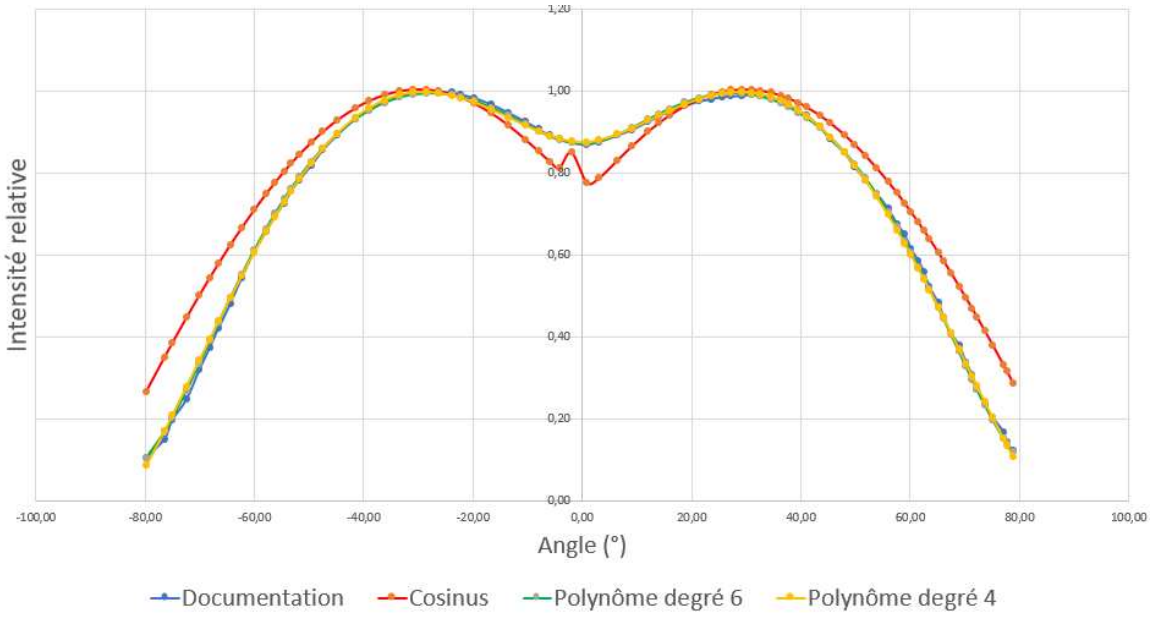

FIGURE 4.2 Profil d'intensité des DELs UV utilisées (bleu) et approximations avec des cosinus (rouge), un polynôme de degré six (vert) et un polynôme de degré quatre (jaune)

Les approximations polynômiales ont été obtenues par la fonction DroiteReg sur Microsoft Excel version 2308, et ont donné la formule empirique (4.4) qui correspond à la courbe jaune de la figure 4.2 :

$$I(x) = 8,64242\times10^{-8}\times x^4 - 1.44828\times10^{-5}\times x^3 + 4,71469\times10^{-4}\times x^2 + 6.52246\times10^{-4}\times x + 8,73065\times10^{-1} \quad (4.4)$$

4.4.2 Mesures d'intensité lumineuse dans les ultraviolets (UV)

L'intensité lumineuse se mesure en W/m² à une longueur d'onde donnée. Elle est mesurée à l'aide d'un spectrophotomètre ILT1700 de International Light Technologies et un capteur SED400. Les distances ont été mesurées à la règle, et les mesures ont été répétées cinq fois pour réduire les incertitudes.

4.5 Paramétrisation du modèle de système de désinfection

Durant l'étude du système de désinfection, il est apparu important de jouer sur certains paramètres spécifiques afin d'étudier leur effet sur le système. A cette fin, les simulations ont été paramétrées selon la puissance des DELs, le rayon du système, le nombre de DELs, le débit d'eau, les différentes distances dans le système (zone de désinfection, sortie du système et distance de plug-flow) et la taille des DELs. Ces paramètres permettent de déterminer une fenêtre d'opération du dispositif et de choisir potentiellement quel paramètre favoriser selon les contraintes de fabrication. Le débit est lié à la génération d'eau, entre 1 L/h pour les valeurs d'un premier prototype et 100L/h comme valeur cible. Le rayon du système a été paramétré entre 1cm et 16cm, qui correspondent respectivement à l'ordre de grandeur du rayon d'un robinet et à l'ordre de grandeur de la distance d'atténuation des UV dans l'eau au-delà de laquelle la désinfection sera bien moins efficace. La distance de plug-flow a été fixée à 100 fois la taille du rayon pour s'assurer que l'on a bien un régime laminaire.

Le choix des valeurs sera discuté dans le chapitre 6, notamment le nombre de DELs et la taille de la zone de désinfection qui lui est lié. La puissance des DELs, bien que paramétrée, a été maintenue constante à la valeur des DELs commerciales acquises.

CHAPITRE 5 TENEUR EN MINÉRAUX

La qualité de l'eau potable est importante pour la santé humaine, et de ce fait est strictement contrôlée à plusieurs échelles comme il a été vu au chapitre 2. A cet effet, des instances gouvernementales créent et vérifient la bonne application des règlements, standards et normes de qualité de l'eau. Dans le cadre de cette étude, les standards du gouvernement québécois ont été considérés tout en gardant à l'esprit que l'Organisation mondiale de la santé (OMS) a ses propres standards, qui sont toutefois généralement moins stricts, comme vu au chapitre 2. Dans cette section, la teneur en minéraux de l'eau sera étudiée en particulier.

5.1 Tests physico-chimiques

Les tests ont été réalisés selon la méthodologie décrite ci-avant, tout d'abord sur de l'eau déionisée pour avoir une ligne de base, puis avec de l'eau potable prélevée au robinet à Polytechnique Montréal, et enfin après avoir introduit des NPS dans de l'eau distillée pour étudier leur effet direct dans un cas extrême de 100% d'humidité. L'objectif est de voir si, en présence d'eau liquide, certains composés peuvent migrer des NPS vers le liquide en contact et ainsi causer une contamination de l'eau, voire endommager le matériau.

5.1.1 Tests préliminaires

Eau déionisée

Les premières mesures ont été réalisées sur l'eau déionisée fournie par le réseau de Polytechnique Montréal. L'ajout d'acide sulfurique lors du titrage a immédiatement réduit le pH de l'eau donnant une valeur d'alcalinité non mesurable avec la précision de cette technique, considérée comme nulle. Cela a permis de confirmer que l'eau déionisée utilisée par la suite n'apporte pas d'alcalinité mesurable qui fausserait les résultats suivants.

Eau du robinet

Les tests réalisés avec de l'eau du robinet ont donné des concentrations comprises entre 48 et 98 mg $CaCO_3/L$ qui sont des valeurs habituelles pour l'eau potable de Montréal [67]. Les variations sont importantes car le traitement de l'eau n'impose pas de valeur spécifique d'alcalinité et les variations peuvent donc être significatives d'une journée sur l'autre. Pour ces mesures, un volume de 100mL d'eau a été introduit dans un bécher de 200mL avant le

titrage à l'acide sulfurique présenté en figure 5.1.

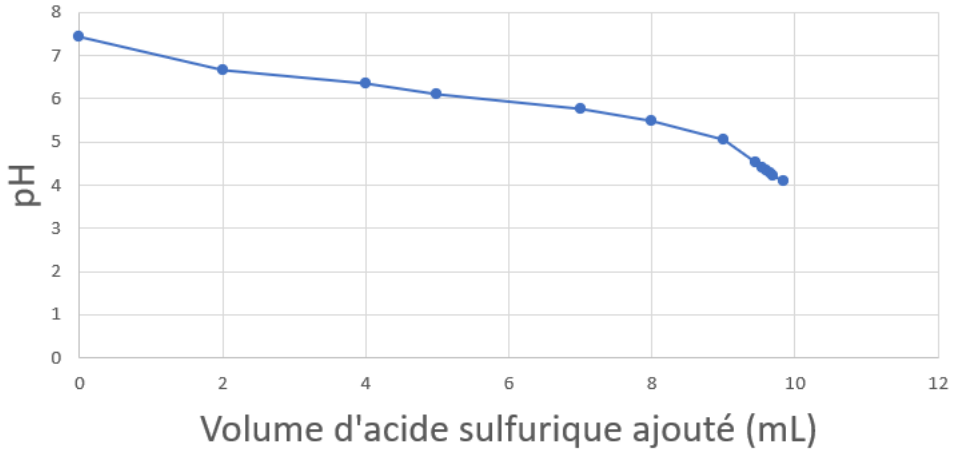

FIGURE 5.1 Évolution du pH au cours du titrage d'eau du robinet à l'acide sulfurique à 0,2N

L'équation (5.1) donne la valeur de l'alcalinité pour la figure 5.1.

$$Alcalinité = (2 \times (9,55) - (9,55 + 0,3)) \times 0,02 \times 50000/100 = 92,5 mg CaCO_3/L \quad (5.1)$$

Les valeurs sont exprimées en milligrammes de $CaCO_3$ équivalents par litre, ceci ne change pas en l'absence de calcium car l'équation se base sur la concentration normale des ions CO_3^{2-}, HCO_3^-, HO^- et H^+.

5.1.2 Ajout de NPS

Le test suivant a consisté en l'ajout d'environ 20g de NPS dans 100mL d'eau déionisée afin de voir si l'ajout de NPS impacte la qualité de l'eau, ici spécifiquement la valeur de son alcalinité qui devrait être nulle. Les résultats ont fourni des valeurs d'alcalinité très élevées au point que l'ajout de 57mL d'acide lors du titrage n'a fait baisser le pH que de 1, passant de 10,73 à 9,72 comme montré en figure 5.2.

Les résultats ont fourni des valeurs d'alcalinité très élevées, dépassant la limite de quantification supérieure de 2000 mg $CaCO_3/L$. Cette limite est liée au volume d'acide qui peut être ajouté pendant le titrage, la plus grande burette graduée disponible étant de 50mL. Dans le cas de la figure 5.2, la faible évolution du pH montre qu'une quantité d'acide de l'ordre du litre aurait été requise pour finir le titrage. Les premiers tests ont été réalisés avec 100 ou 200mL d'eau car de faibles valeurs d'alcalinité étaient attendues et de ce fait une

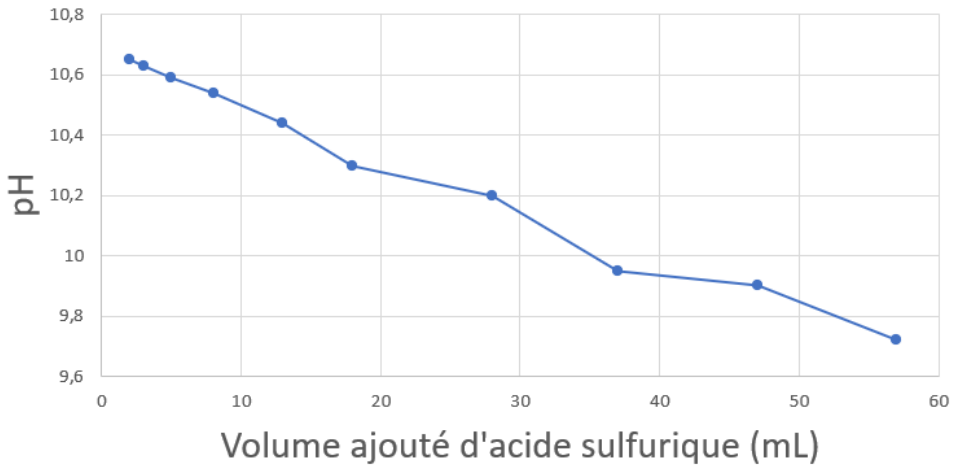

FIGURE 5.2 Évolution du pH au cours du titrage de 100mL d'eau déionisée avec ajout de 20g de NPS à l'acide sulfurique à 0,2N

masse importante de NPS avait été introduite. Le volume d'eau a été abaissé à 50mL par la suite, parce que seule la masse de NPS influe sur la quantité d'acide requise et la plus grande pipette jaugée disponible est de 50mL. Un volume plus faible que 50 mL empêchant d'immerger complètement la sonde pH dans l'échantillon, aucun test n'a été réalisé avec un volume plus faible.

Pour économiser l'acide et obtenir des valeurs d'alcalinité mesurables, la quantité de NPS introduite a été fortement diminuée, entre 1 et 5g selon les mesures. En effet, la taille des particules rend toute mesure de masse moindre que 1 g non reproductible ce qui aurait empêché de réaliser des mesures à concentration constante comme on pourra le voir en figure 5.7 notamment. Les valeurs d'alcalinité ne correspondent pas aux attentes - il n'y a normalement pas d'ions carbonates dans les NPS et le protocole de mesure de l'alcalinité est identique à celui suivi lors des mesures d'alcalinité sur l'eau sans NPS.

L'alcalinité a été mesurée en parallèle avec la conductivité de solutions d'eau déionisée à laquelle ont été ajoutées des quantités variables de NPS afin de confirmer si cette source d'alcalinité très élevée est liée directement à ces dernières ou si elle a une autre origine. La mesure de la conductivité de la solution ainsi qu'en carbone organique total (COT) ont aussi été réalisées. Les trois figures 5.4, 5.5 et 5.6 montrent les résultats obtenus, où il est clairement visible que la quantité de NPS est proportionnelle à la teneur en minéraux de la solution. Les NPS utilisées pour chaque mesure étaient neuves, n'ayant jamais été utilisées depuis leur synthèse.

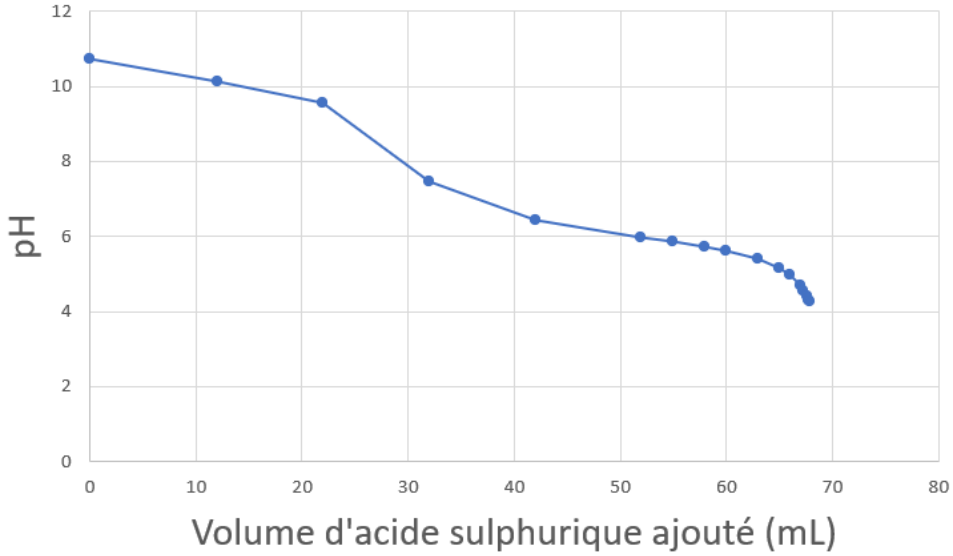

FIGURE 5.3 Évolution du pH au cours du titrage de 200mL d'eau déionisée avec ajout de 3,4g de NPS à l'acide sulfurique à 0,2N

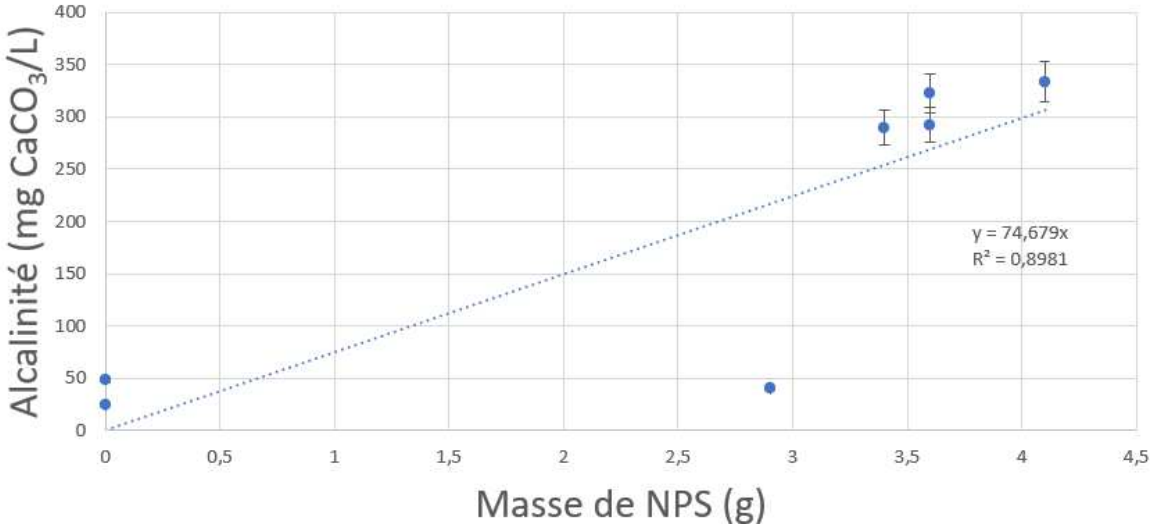

FIGURE 5.4 Alcalinité de la solution selon la masse de NPS ajoutée dans 100mL d'eau

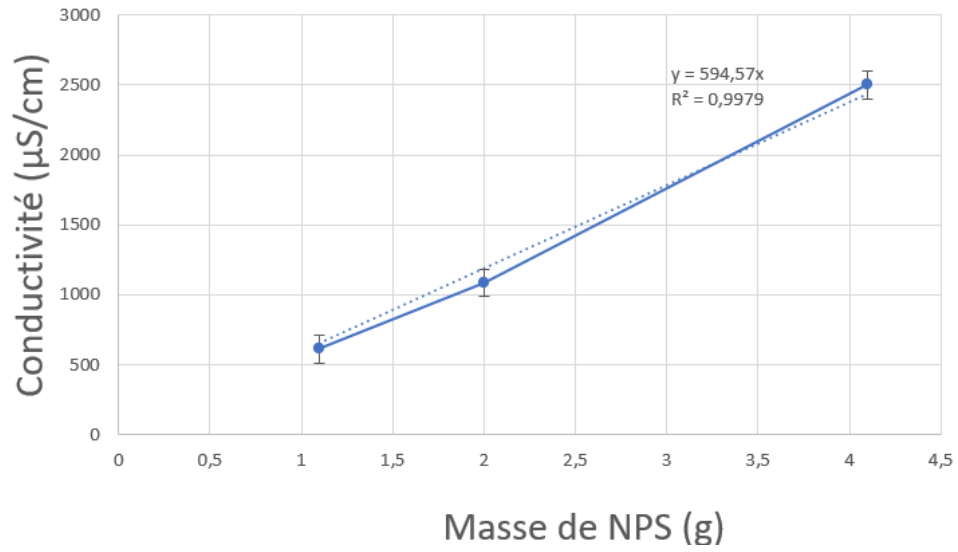

FIGURE 5.5 Conductivité de la solution selon la masse de NPS ajoutée dans 200mL d'eau

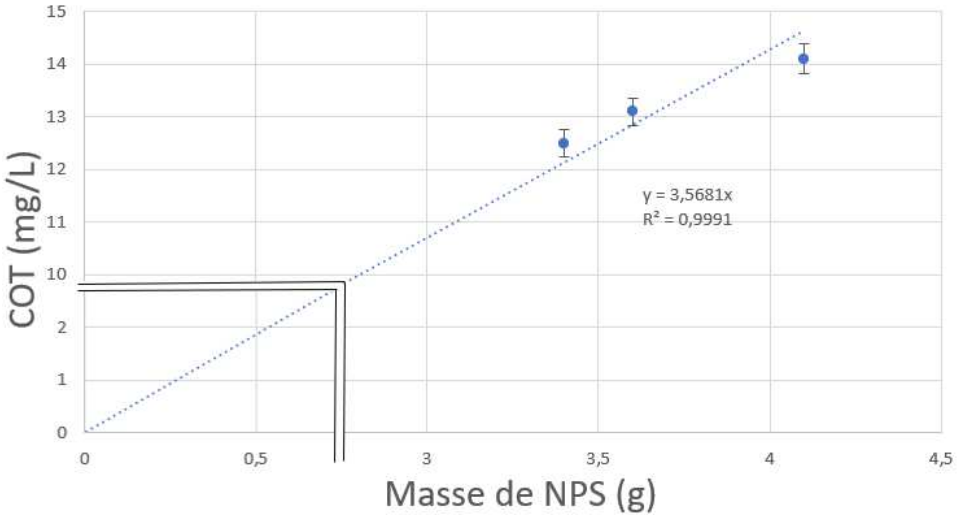

FIGURE 5.6 COT de la solution selon la masse de NPS ajoutée dans 200mL d'eau

Cela démontre la présence d'ions carbonates dans l'eau dont l'origine est l'introduction de NPS. Ces derniers contiennent donc un contaminant inattendu qui va fortement changer les valeurs de l'alcalinité de l'eau produite. Le point isolé de la figure 5.4 s'explique par l'utilisation de NPS d'un batch différent, qui a vraisemblablement été moins contaminé durant la synthèse. Ceci met aussi en exergue le problème du contaminant, qui peut causer des variations de l'alcalinité de l'eau selon le batch étudié et qui est donc impérativement à éliminer. Pour que les résultats soient comparables, le même batch a été conservé pour la

suite des mesures. Du fait du peu de matériau disponible, peu de points de mesures ont été réalisés pour chaque test.

5.2 Identification du contaminant

Le contaminant étant associé aux NPS et relarguant facilement dans l'eau, une hypothèse est qu'il s'agit d'un solide hydrophile peu lié aux NPS. De ce fait, un rinçage dans de l'eau déionisée suivi d'une filtration et d'un séchage réduirait la présence du contaminant qui contribue à l'alcalinité élevée de la solution d'eau et NPS. De nouvelles mesures ont été réalisées dans l'eau déionisée après un rinçage.

5.2.1 Rinçage des NPS

Les rinçages ont consisté à plonger les NPS dans l'eau déionisée de Polytechnique Montréal pendant plusieurs minutes, avant d'utiliser un filtre de 11µm pour retirer les NPS. Ces dernières ont ensuite été placées à l'étuve à 100°C pendant 2 heures ou plus afin de les sécher, puis la mesure d'alcalinité a été réalisée avec les NPS ainsi préparées. Nous avons observé que des rinçages successifs abaissent encore cette valeur qui tombe à presque 0 mg $CaCO_3$/L après 2 rinçages.

Après avoir établi que le rinçage permettait d'éliminer la source de contamination de l'eau, l'objectif a été de vérifier la durée minimale de rinçage pour retirer la source de contamination. Les tests ont démontré que la dissolution dans l'eau était extrêmement rapide : cf la figure 5.7 où l'on voit peu d'évolution au cours du temps. Il ne s'agit donc pas d'une réaction avec les NPS elles-mêmes puisque la réaction est rapide et que ces dernières ne se désagrègent pas, restant des solides en suspension dans l'eau. Cela confirme que la source de contamination est un solide faiblement lié ou non-lié aux NPS.

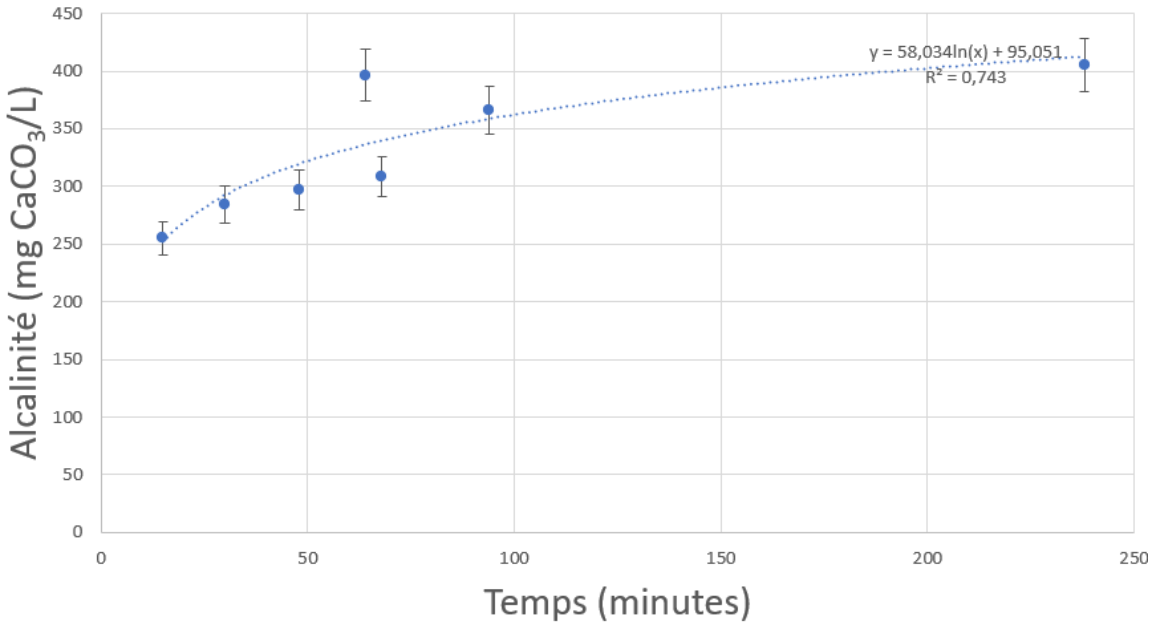

FIGURE 5.7 Alcalinité de la solution en fonction du temps pour une masse de 1.7g de NPS ajoutée pour un volume d'eau de 100mL

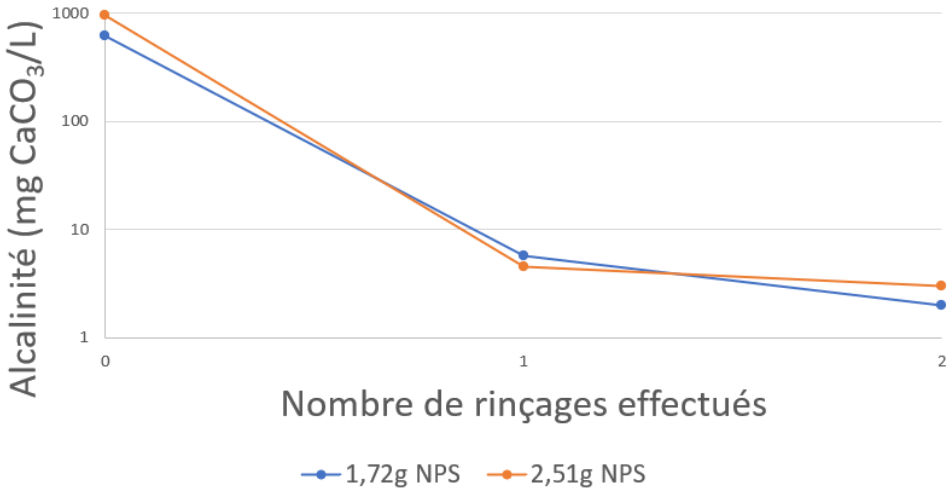

FIGURE 5.8 Alcalinité de la solution après plusieurs rinçages pour deux échantillons différents en échelle logarithmique

La figure 5.8 montre par ailleurs qu'un simple rinçage des NPS permet d'éliminer le surplus d'alcalinité, les valeurs après 1 et 2 rinçages étant proches de la marge d'erreur des mesures d'alcalinité.

5.2.2 Mesure de concentration des ions

Pour vérifier l'espèce responsable de la contamination, une mesure de la concentration en cations les plus courants comme décrite en chapitre 4 a été réalisée sur un échantillon non rincé. Les résultats sont présentés dans le tableau 5.1 et la figure 5.9.

TABLEAU 5.1 Concentrations ioniques dans l'eau après ajout de différentes quantités de NPS et filtration

Cation (mg/L)	Li^+	Na^+	NH_4^+	K^+	Mg^{2+}	Ca^{2+}
Eau + 1,1g NPS	Moins de 0,2	11,28	Moins de 0,2	Moins de 0,2	Moins de 0,2	Moins de 0,2
Eau + 2,0g NPS	Moins de 0,2	22,83	Moins de 0,2	Moins de 0,2	Moins de 0,2	Moins de 0,2
Eau + 4,1g NPS	Moins de 0,2	55,11	Moins de 0,2	Moins de 0,2	Moins de 0,2	Moins de 0,2

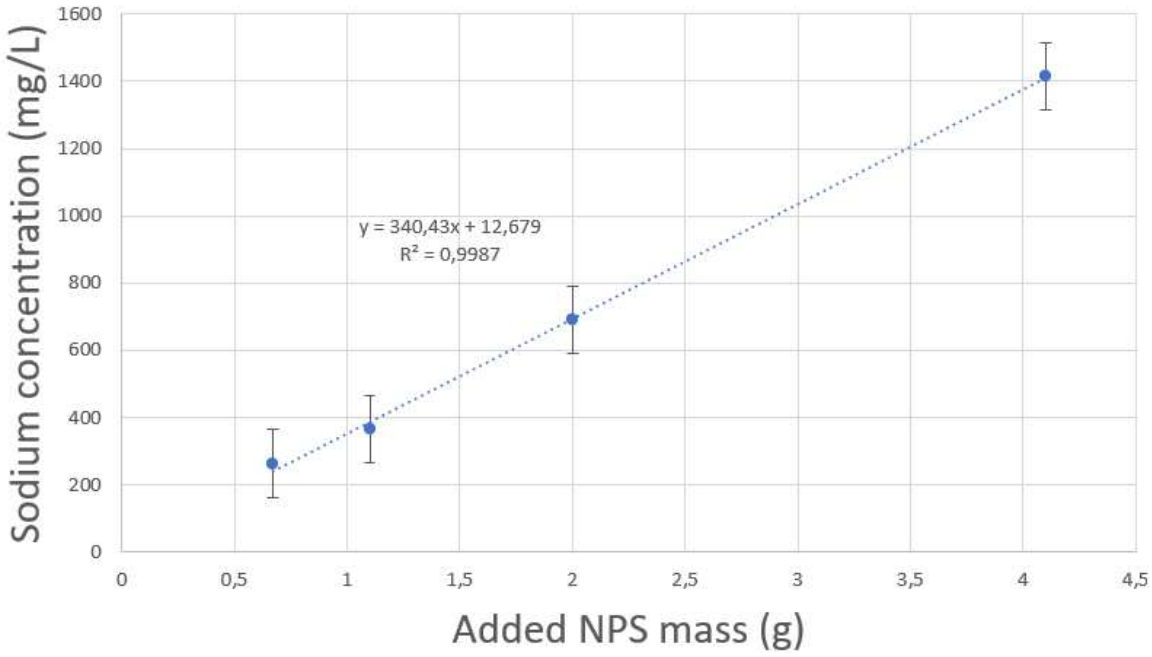

FIGURE 5.9 Concentrations mesurées de sodium dans l'eau après ajout de différentes quantités de NPS dans 200mL d'eau et filtration à 70µm

En raison de la concentration élevée de sodium et de la corrélation avec la concentration en NPS, il est possible de déduire que le composé recherché est du carbonate de sodium. Ce composé sert à contrôler le pH lors de la synthèse de NPS, et reste vraisemblablement sur le matériau après la phase de traitement thermique. Il s'agit d'une espèce hygroscopique qui va donc améliorer la capacité des NPS à capter l'eau atmosphérique, mais selon un mécanisme

différent de déliquescence et dont l'efficacité va diminuer au cours du temps au fur et à mesure que le carbonate de sodium se dissout dans l'eau produite.

Les rinçages ont permis de retirer le sel des NPS, affectant négativement les performances du matériau en termes de capture d'eau initiale mais en permettant la stabilité des résultats après plusieurs cycles.

5.2.3 Protocole établi

Afin d'obtenir la valeur véritable de la capacité du NPS à adsorber l'eau et de prévenir une concentration trop forte en carbonate et en sodium dans l'eau obtenue, un rinçage dans l'eau déionisée des NPS suivi d'une filtration s'avère nécessaire. Il a été prouvé qu'un tel rinçage permet de réduire la concentration de carbonate de sodium à un niveau acceptable et de garantir qu'il n'y aura pas de perte d'efficacité des NPS au fur et à mesure de leur utilisation. L'eau produite par un premier prototype, après rinçage selon ce protocole, a exhibé une alcalinité de 6,5 $mgCaCO_3/L$ qui correspond à ce qui est attendu en présence de peu de carbonate de sodium.

CHAPITRE 6 DÉSINFECTION

6.1 Désinfection aux ultraviolets : paramètres des diodes

Dans le cadre du processus de désinfection, les DELs émettant à une longueur d'onde de 275nm ont été choisies comme discuté en revue de littérature. Leur modélisation selon l'équation du quatrième degré définie en Méthodologie permettrait une visualisation plus précise de la fluence mais étant donné que ce type de modélisation est trop chronophage pour la plupart des simulations requises dans le cadre du projet, celles-ci ont été effectuées à l'aide d'un profil gaussien.

6.2 Simulations COMSOL

6.2.1 Modélisation du réacteur

Choix de la forme

L'objectif du projet étant de concevoir un dispositif d'alimentation en eau potable, le réacteur de désinfection doit être conçu de manière à avoir une entrée et une sortie de part et d'autre de la zone de désinfection à proprement parler. De premiers essais de simulations ont été réalisés sur la base du tutoriel de COMSOL suggérant un réservoir cylindrique auquel un tuyau d'entrée plus un de sortie de diamètre ajustable sont ajoutés, et une lampe UV se situe au centre émettant radialement comme on peut le voir en figure 6.1.

Ce système a permis de tester les fonctionnalités de COMSOL relatives aux interactions entre l'eau et la lumière émise dans les UV. Deux géométries ont été considérées, la première constituée d'un réservoir en forme de cylindre avec entrée et sortie tandis que la seconde, plus simple, est simplement un tuyau. Dans le cas du réservoir que l'on voit en figure 6.2, l'eau rentre par le tuyau le plus bas, traverse le réservoir avec les lampes allumées, puis ressort par le tuyau du haut.

Ceci permet de réduire les risques liés aux eaux stagnantes, notamment la formation de biofilms rendant la désinfection beaucoup plus compliquée, et d'avoir une réserve d'eau potable rapidement accessible pour l'utilisateur. Les inconvénients de cette géométrie sont, en premier lieu, que les simulations fonctionnaient mal du fait du maillage de la surface au niveau de l'intersection entre tuyau et réservoir. COMSOL ne réussissait pas à effectuer les calculs de la simulation si entrée et sortie étaient au niveau, respectivement, du fond et du sommet du

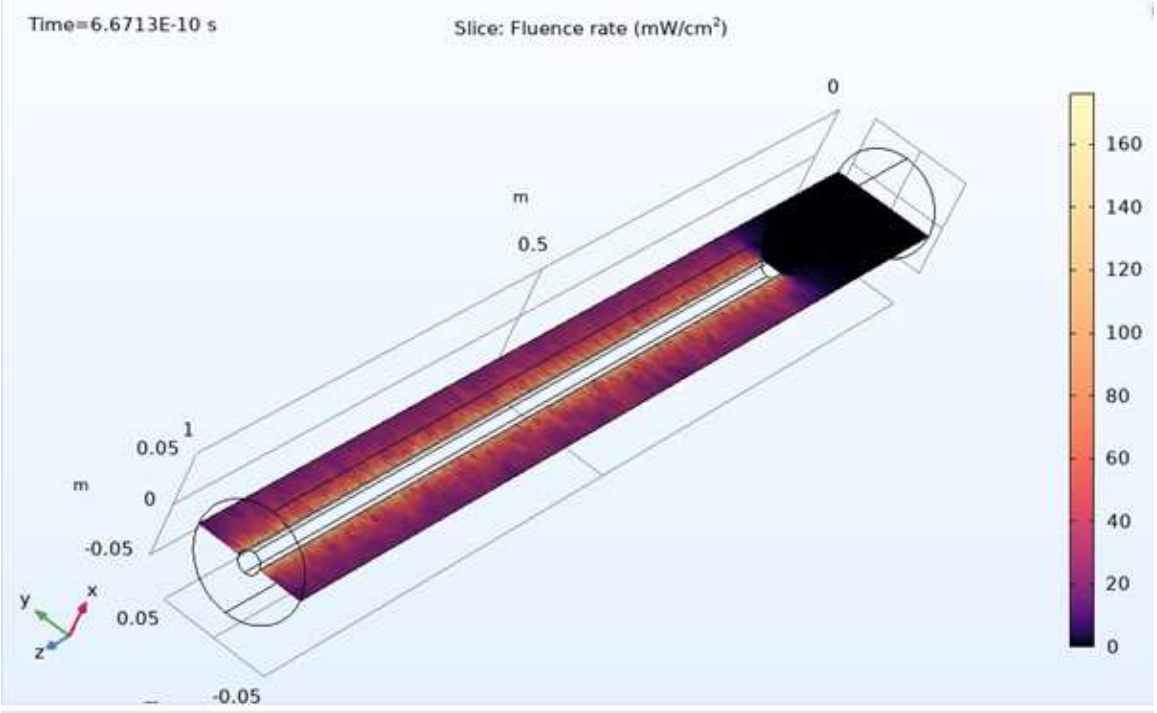

FIGURE 6.1 Aperçu de la simulation du premier modèle de réacteur, avec lampe UV au mercure au lieu de DELs et la fluence perçue à l'intérieur

réservoir conduisant à l'abandon de toute géométrie avec angles droits. En termes d'efficacité de la désinfection, l'irradiation UV devrait être effectuée à intervalles réguliers pour éliminer le surplus de micro-organismes qui peuvent se développer dans le réservoir de nouveau une fois la désinfection terminée, au lieu d'être effectuée en POU après le réservoir de stockage.

La seconde géométrie, finalement retenue, consiste en un tuyau où la région de désinfection est précédée d'une zone vide pour permettre le développement d'un écoulement piston comme vu au chapitre 4. Ceci permet un écoulement laminaire et permet de pouvoir étudier avec précision la désinfection par les DELs.

6.2.2 Matériaux du réacteur

Le réacteur doit permettre de désinfecter l'eau produite à l'aide de rayons UV, donc il doit être résistant à la fois à l'eau et aux UV, ces derniers ne devant pas traverser la paroi sous risque de menacer la santé des utilisateurs. Le matériau le plus adapté est l'aluminium qui est à la fois peu cher et a un fort indice de réflexion par rapport aux UV, comme vu en section 2. Ceci permet de réfléchir les rayons en interne et d'améliorer l'efficacité de désinfection en réduisant les déperditions d'énergie.

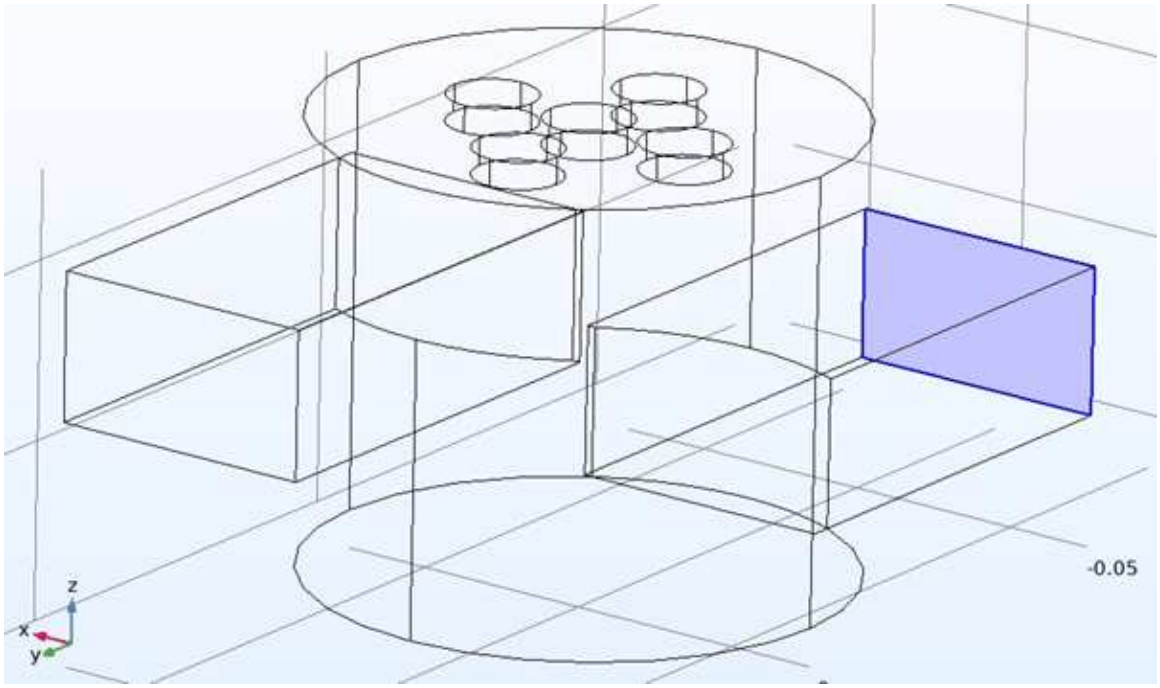

FIGURE 6.2 Aperçu de la simulation du second modèle de réacteur, 5 DELs au-dessus d'un réservoir cylindrique avec entrée d'eau par le tuyau rectangulaire en bas et sortie d'eau par le tuyau rectangulaire en haut

Le quartz, étant très perméable aux UV et imperméable à l'eau comme vu en chapitre 2, peut être utilisé pour protéger les DELs. Il y aura de ce fait un encrassement des DELs au cours du temps qui va réduire l'efficacité des UV.

Disposition des diodes

Une fois la forme du réacteur fixé, la position des DELs doit être étudiée afin de rendre le système aussi efficace que possible. Puisque la forme retenue est celle d'un tuyau, il n'est pas envisageable de rentrer les DELs à l'intérieur, comme la lampe à mercure que l'on retrouve en figure 6.1. Une solution plus appropriée est de les placer à l'extérieur sur des bagues, les paramètres devenant le nombre de DELs par bague et le nombre de bagues, chaque DEL émettant une puissance de 0,9W. Cela permet de choisir entre une densité de désinfection plus importante en un point du réacteur et une désinfection plus diffuse sur un volume plus grand en allongeant la zone de désinfection d de la figure 5.3 et en y ajoutant des bagues supplémentaires.

En fin de compte, le système retenu peut être modélisé par le schéma de la figure 6.3, et visualisé par la figure 6.4.

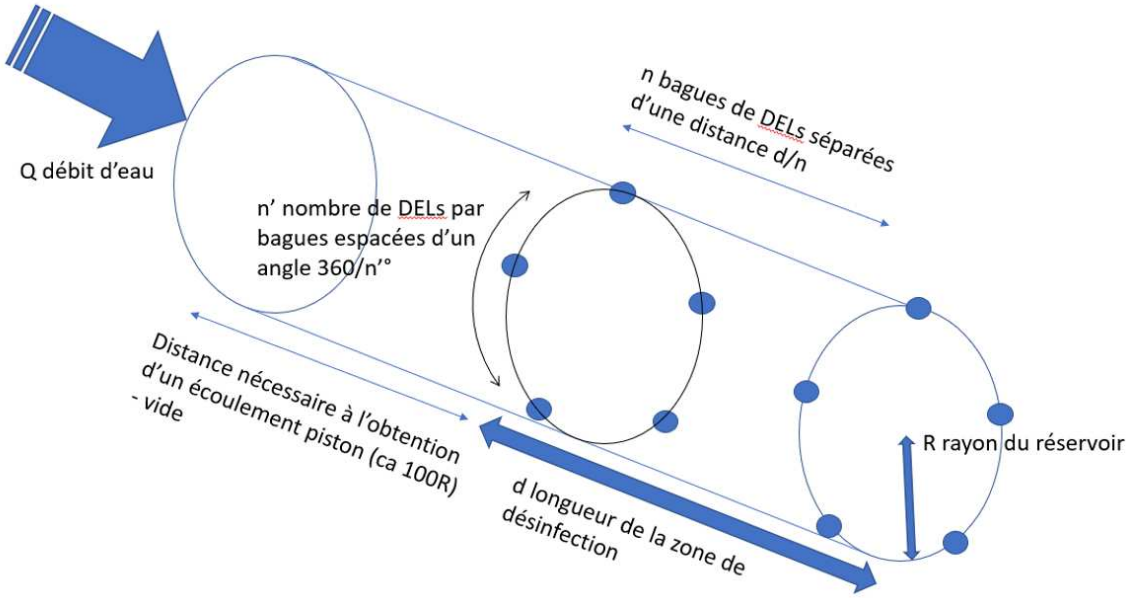

FIGURE 6.3 Schéma du réacteur de désinfection et des principaux paramètres associés

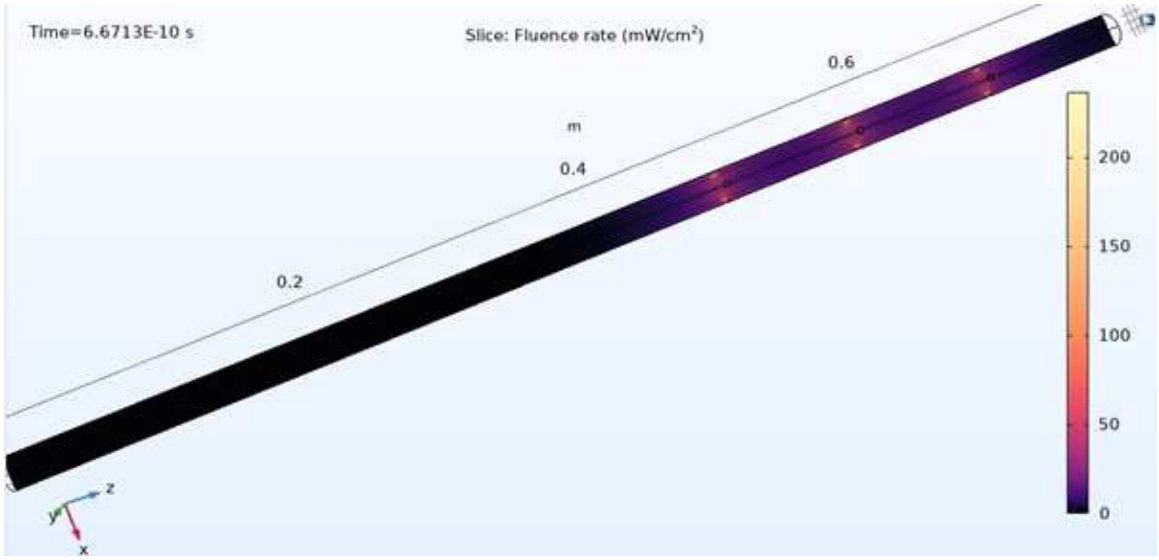

FIGURE 6.4 Réacteur en forme de tuyau avec la région à profil de vitesse variable sur la gauche et 3 bagues de DELs dans la partie droite dans la région d'écoulement piston avec visualisation du taux de fluence associé en mW/cm², les DELs étant représentées par des cercles

Fluence

Comme il a été vu en chapitre 2, la désinfection dans le cadre des UV se mesure par le calcul de la fluence. Cette dernière se calcule à partir de la valeur du taux de fluence et de la vitesse des particules de fluide.

Dans le cadre d'un écoulement piston, on peut considérer le flux comme laminaire et avec une vitesse indépendante du temps en tout point du système. Si de plus le fluide est considéré newtonien et incompressible, on peut appliquer la formule (6.1) décrivant la vitesse maximale dans un écoulement de Poiseuille où u_{max} est la vitesse maximale, μ la viscosité dynamique du fluide, P la pression et R le rayon du tuyau.

$$u_{max} = \frac{-1}{4 * \mu}(\frac{\partial P}{\partial x})R^2 \tag{6.1}$$

On peut appliquer la formule (6.2) de Hagen-Poiseuille pour déterminer la variation de pression, à condition que les caractéristiques du tuyau soient telles que la contrainte (6.3) soit respectée où L est la longueur du tuyau, Q le débit volumique de fluide et Re le nombre de Reynolds que l'on peut calculer séparément par la formule (6.4).

$$\Delta p = \frac{8\mu LQ}{\pi R^4} \tag{6.2}$$

$$\frac{L}{R} > \frac{1}{48}Re \tag{6.3}$$

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \tag{6.4}$$

En fin de compte, on peut calculer la vitesse maximale par (6.5) obtenue en considérant (6.2) divisée par la longueur du tuyau dans comme dérivée partielle (6.1).

$$u_{max} = \frac{2Q}{\pi R^2} \tag{6.5}$$

Le calcul de la fluence consiste alors en (6.6) où F est la fluence s'exprimant traditionnellement en mJ/cm² et f le taux de fluence.

$$F = \frac{f}{10u_{max}} \tag{6.6}$$

6.2.3 Rayon du réacteur

Plusieurs simulations ont été réalisées afin de déterminer un rayon approprié ; comme vu précédemment en 4, le rayon le plus petit considéré a été 1cm et le plus grand 16cm. Des tests ont été réalisés avec divers nombre de DELs, divers débits entrants et différents rayons afin de comparer la fluence reçue au centre du dispositif en figures 6.5 et 6.6. Les configurations sont nommées A×B, où A est le nombre de bagues et B le nombre de DELs par bague : 2×3 correspond par exemple à 2 bagues de 3 DELs.

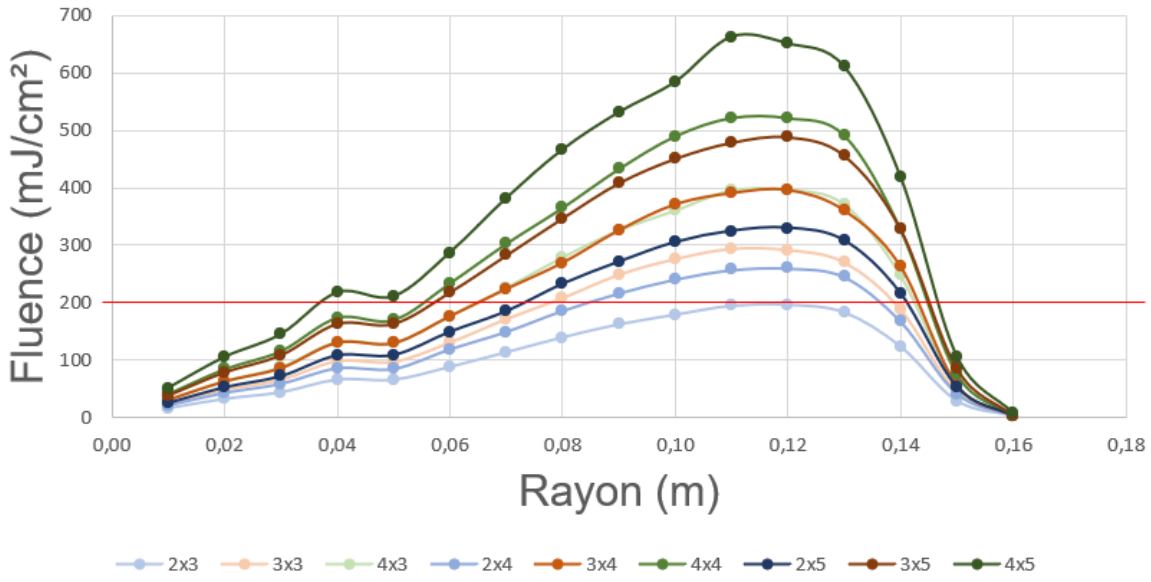

FIGURE 6.5 Fluence pour un débit de 1 L/s et différentes configurations de DELs pour un rayon de réacteur variable. La ligne rouge correspond à la fluence minimale requise pour une désinfection efficace, soit 200 mJ/cm².

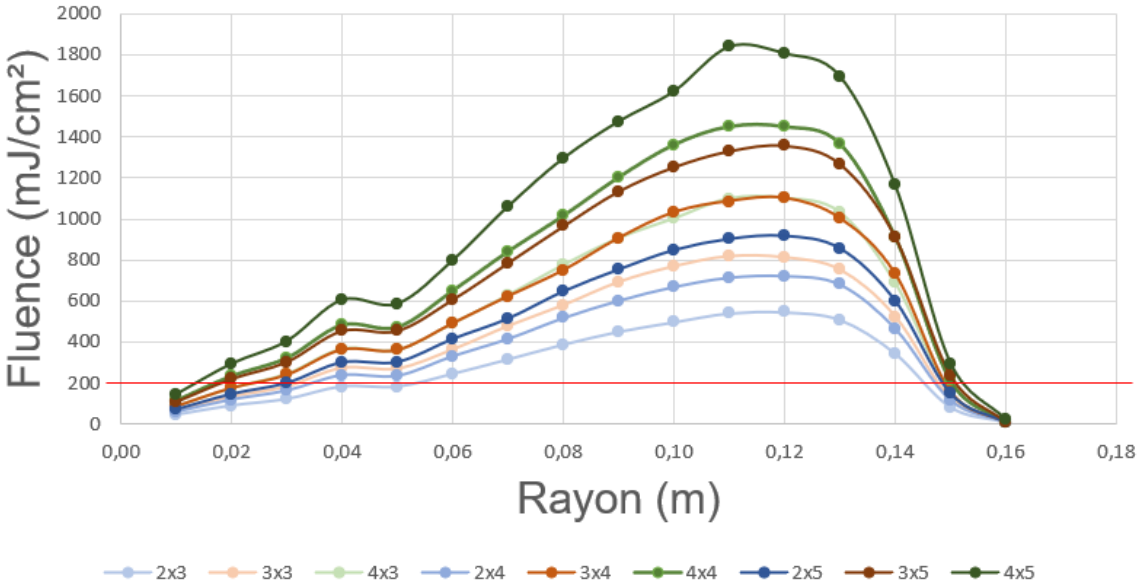

FIGURE 6.6 Fluence pour un débit de 0,36 L/s et différentes configurations de DELs pour un rayon de réacteur variable

En termes de fluence perçue au centre du dispositif modélisé, les différents graphiques montrent une meilleure efficacité pour un rayon de 11 à 12cm. Pour des rayons plus faibles, la vitesse plus importante du fluide réduit la dose reçue du fait d'une exposition de durée beaucoup plus courte. Pour des rayons plus grands, les pertes dues à la propagation et à l'absorption par l'eau provoquent une chute de la fluence de 50% entre déjà 12 et 14cm de rayon et donc de l'efficacité de désinfection. On remarque par ailleurs que comme le débit d'eau n'influe sur la fluence que par la formule (6.5), le rayon optimal demeure inchangé lorsque le débit change. Au vu de ces résultats, un rayon d'un système réel idéal serait autour de 6cm afin de garantir une couverture de désinfection de tout le diamètre du système.

En effet, le diamètre du tuyau serait alors de 12cm ce qui signifie que les pertes seront encore peu importantes au niveau des parois assurant une désinfection efficace sur toute la section. Cependant, selon les besoins de dimensionnement du dispositif, un tuyau entre 5cm et 7cm de rayon permettrait de conserver une désinfection efficace. Le débit n'influe que sur la valeur de la fluence, et les figures 6.5 et 6.6 montrent que pour une valeur de 1 L/h, les valeurs de fluence sont toujours au-dessus de la valeur minimale requise.

6.2.4 Répartition de l'intensité

Le taux de fluence est très important à proximité immédiate des DELs UV, puis s'atténue dans l'eau au fur et à mesure de l'éloignement de la source selon (6.7) où I est l'intensité

à distance de la source qui émet une intensité I_0 selon un coefficient d'atténuation α. Du fait de la forme de l'émission, certaines zones du réacteur reçoivent peu d'intensité UV et la désinfection y est alors moins efficace.

$$I = I_0 \times 10^{\alpha d} \tag{6.7}$$

Afin de visualiser l'effet du nombre de DELs sur la répartition de la fluence, des simulations ont été réalisées pour un réacteur de 1cm de rayon cf la figure 6.7 et pour 5cm de rayon cf la figure 6.8.

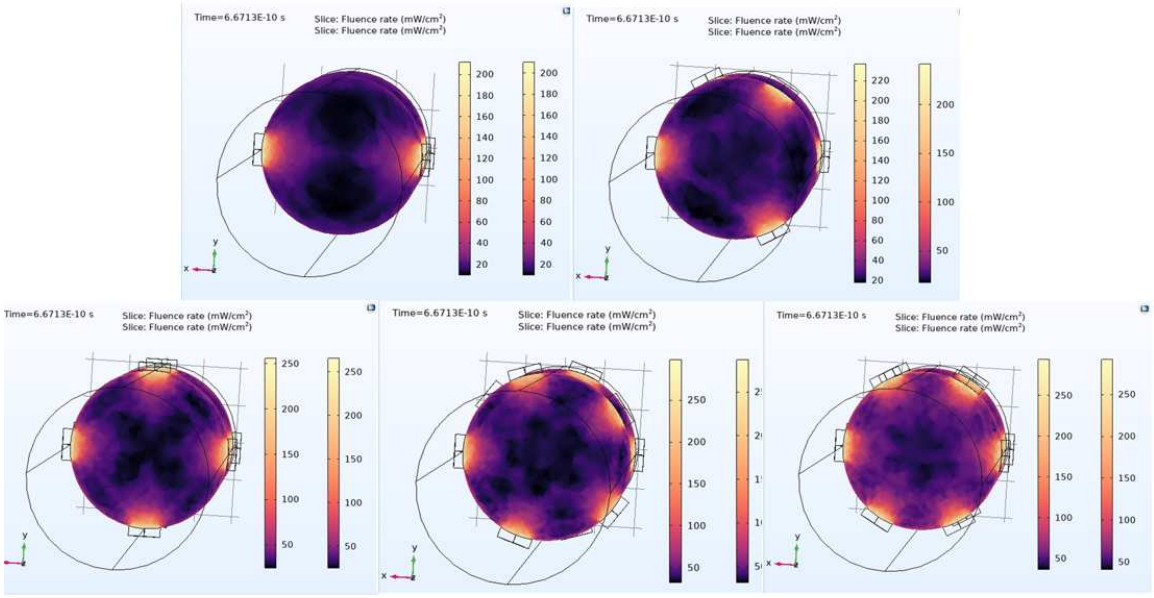

FIGURE 6.7 Aperçu de la simulation de la répartition du taux de fluence respectivement pour 2, 3, 4, 5 et 6 DELs par bague pour un réacteur de 1cm de rayon

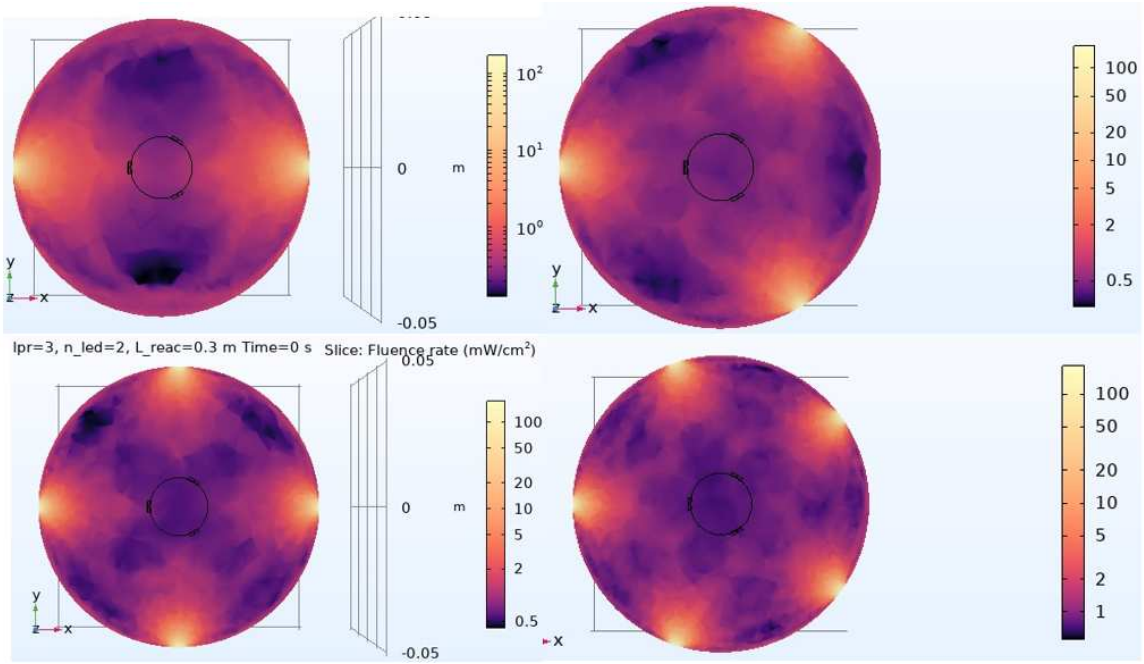

FIGURE 6.8 Aperçu de la simulation de la répartition en échelle logarithmique du taux de fluence respectivement pour 2, 3, 4 et 5 DELs par bague pour un réacteur de 5cm de rayon

Les régions à proximité de la paroi, hors de la périphérie immédiate des DELs, sont soumises à un taux de fluence faible s'il n'y a que 2 ou 3 DELs pour un rayon de 1cm, et jusqu'à 4 DELs pour un rayon de 5cm. S'il y a plus que 3 DELs, la région avec la désinfection la moins efficace passe au centre. Comme vu en Revue de littérature, la vitesse la plus importante est au centre : ceci signifie que le temps de résidence et donc la fluence reçue sont plus faibles au centre que sur les bords à taux de fluence égal.

Utiliser 4 DELs ou plus, bien que réduisant le problème de régions faiblement désinfectées, ne l'élimine pas totalement. De ce fait utiliser une configuration à deux bagues de 3 DELs en décalé permet de répartir plus le volume fortement désinfecté comme montré en figure 6.9.

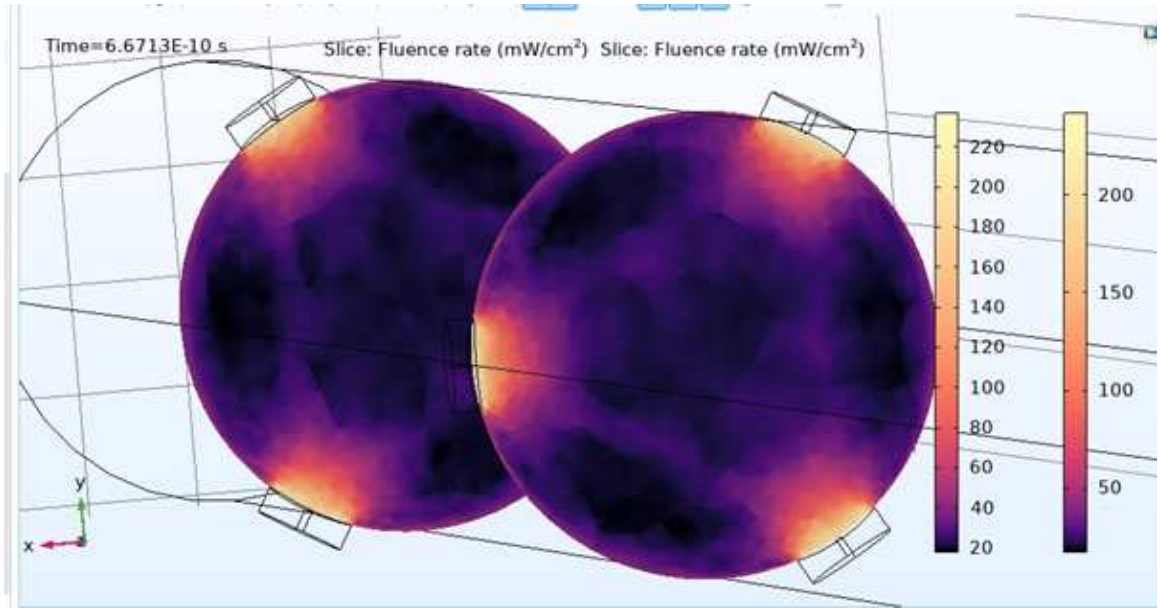

FIGURE 6.9 Aperçu de la simulation de la répartition du taux de fluence pour une conformation décalée 2x3 DELs

Dans le cas d'un rayon de 5cm, pour un débit de 100L/h, la répartition de la fluence selon la distance au centre du réservoir est présentée en figure 6.10 pour une conformation alignée avec 2 bagues de 3 DELs et en figure 6.11 avec deux bagues de 5 DELs, les angles étant définis par rapport à l'axe Ox de 6.12.

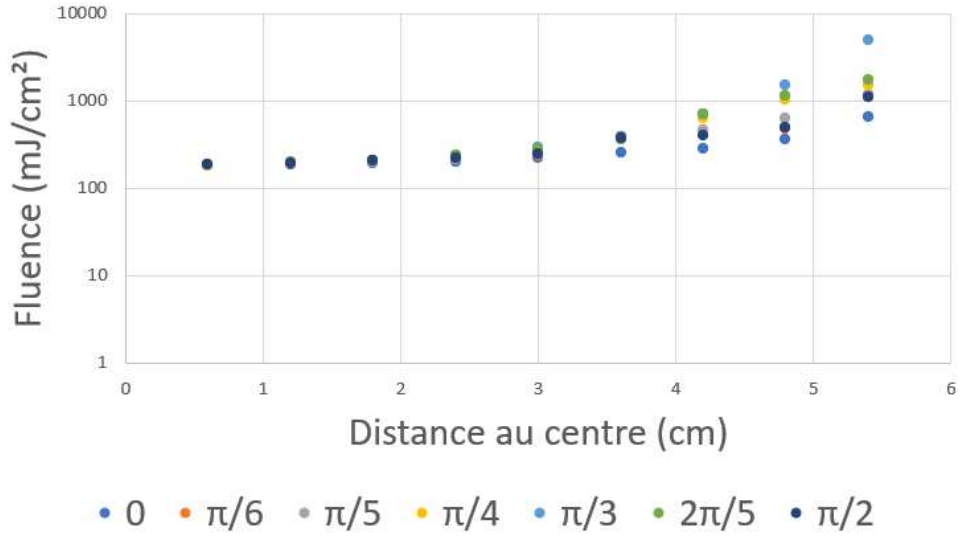

FIGURE 6.10 Fluence perçue à différentes distances du centre du réacteur à divers angles par rapport à l'axe Ox pour deux bagues de 3 DELs

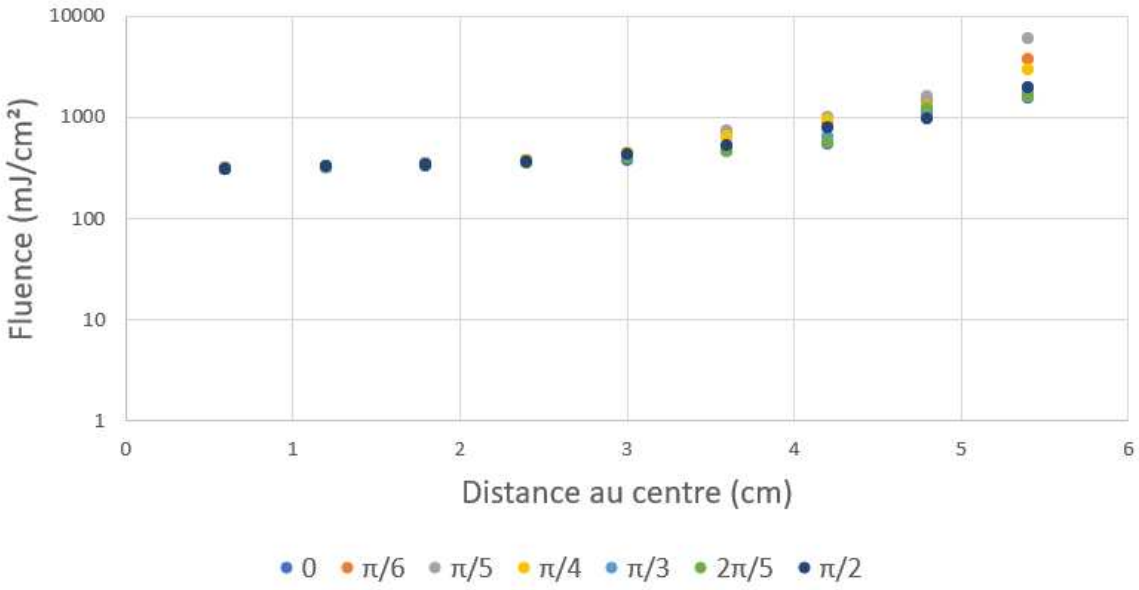

FIGURE 6.11 Fluence perçue à différentes distances du centre du réacteur à divers angles par rapport à l'axe Ox pour deux bagues de 5 DELs

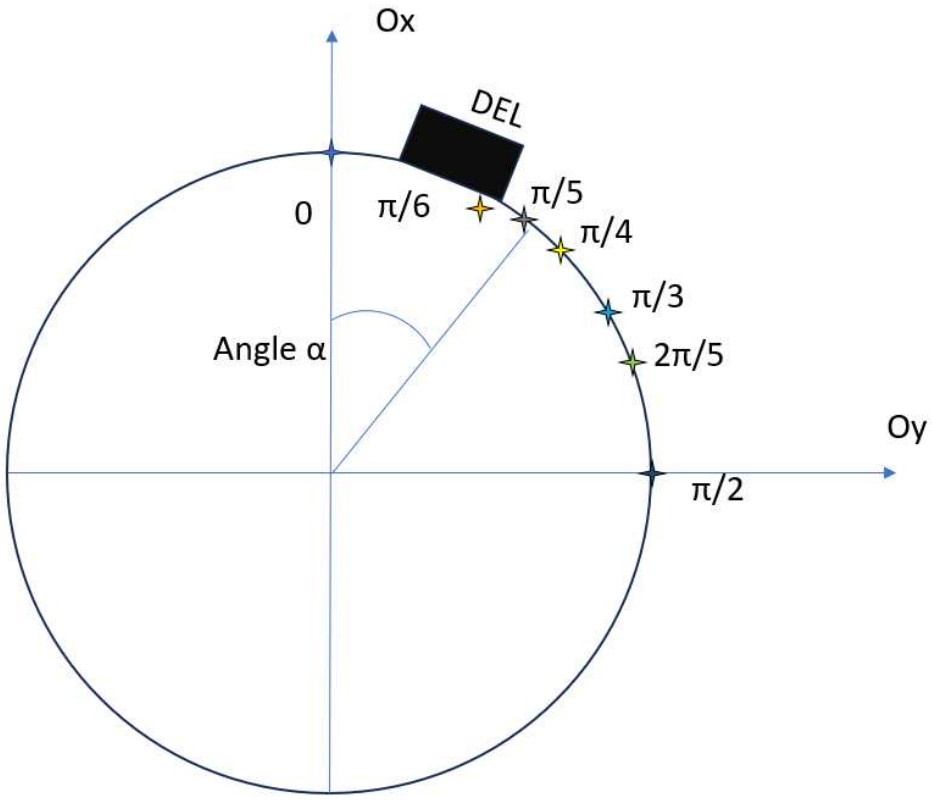

FIGURE 6.12 Schéma de principe pour les figures 6.10 et 6.11

Ce résultat permet de confirmer qu'il est nécessaire de faire tous les calculs de fluence au niveau du centre du réservoir, puisqu'il s'agit du point où la désinfection est la moins efficace.

6.3 Fenêtre d'opérations

6.3.1 Choix des paramètres

Les paramètres utiles sont ceux que l'on peut changer aisément dans le réacteur de désinfection. En l'occurrence, le flux entrant d'eau, le rayon du système et le nombre de DELs sont les principaux paramètres étudiés. Parmi d'autres paramètres possibles, la longueur d'onde des DELs changerait la profondeur de pénétration, mais dépend des DELs disponibles commercialement et la taille de la zone de désinfection pourrait être modifiée pour optimiser l'espace disponible. Un flux plus important réduit le temps de résidence et de ce fait le temps de traitement, mais diminue corrélativement le taux de fluence reçu par les particules d'eau.

6.3.2 Fenêtre générale d'opération

Ainsi que vu précédemment, les paramètres idéaux pour le fonctionnement du réacteur sont un rayon de 6cm ou moins afin de maximiser l'efficacité de désinfection. La configuration 2 bagues de 3 DELs en configuration décalée permet de minimiser le nombre de DELs présentes dans le système tout en garantissant une bonne répartition de la fluence.

Le débit n'apparaît généralement pas comme un facteur limitant, mais l'objectif de production de 100L/h devrait être considéré comme valeur maximale avec les paramètres retenus ci-dessus ; pour tout débit plus élevé il conviendrait d'ajouter des DELs dans le dispositif pour maintenir une désinfection convenable. Enfin, il a été vu en revue de littérature que les réflexions et la réfraction vont provoquer une baisse de la fluence perçue de l'ordre de 25% qui doit donc être considérée dans la marge de sécurité pour l'efficacité de désinfection.

CHAPITRE 7 CONCLUSION

7.1 Synthèse des travaux

Pour conclure, dans un premier temps l'étude réalisée de la teneur en minéraux de l'eau en contact avec les NPS a permis de détecter une source de forte alcalinité, au-delà des valeurs standards de l'eau potable. Différents tests ont ensuite permis de démontrer que les NPS en sont l'origine car apportant du carbonate de sodium, tandis que les tests pour d'autres sources de contamination de l'eau se sont révélés négatifs. Afin de contrer ces effets indésirés, un protocole de rinçage a été mis en œuvre, dont les résultats ont confirmé la quasi-élimination du carbonate de sodium. Ceci a permis d'établir un protocole de vérification de la teneur en minéraux, ainsi que pour le rinçage des NPS, permettant de garantir des propriétés stables dans le temps des dites NPS. De plus, il a été confirmé que, après l'élimination du carbonate de sodium, l'eau produite est pratiquement pure avec des concentrations en minéraux en-deçà des seuils de détection des appareils utilisés.

Par ailleurs, la comparaison entre désinfection au chlore, à l'ozone et aux UV a fait ressortir que le meilleur système à utiliser dans des régions reculées telles le grand Nord canadien est constitué de DELs UV émettant à 265nm : il s'agit de l'option la plus sûre en termes de santé humaine, requérant peu d'entretien et consommant peu d'énergie. Il a de ce fait été décidé de concevoir un système de désinfection autour de ce concept. Le logiciel COMSOL a permis de déterminer les valeurs importantes de paramétrage de ce système de désinfection dans le cadre d'un écoulement piston, à savoir le rayon du réservoir, le nombre de DELs et leur agencement ainsi que le débit d'eau entrant. Dans le cadre des DELs étudiées, une configuration à 2 bagues de 3 DELs avec un rayon de 6cm et un débit de l'ordre de 1 L/h serait optimale dans le cadre des simulations réalisées.

7.2 Limitations de la solution proposée

Ce travail a porté essentiellement sur des simulations autour du système de désinfection, mais aucune mesure bactériologique n'a été réalisée. En termes de teneur en minéraux, il n'a pas été proposé ici de solutions pour assurer une concentration constante en minéraux respectueuse des recommandations de santé publique.

7.3 Améliorations futures

Des tests pratiques doivent être effectués afin de vérifier que les valeurs obtenues expérimentalement correspondent bien à ces prédictions : des tests micro-biologiques de bio-dosimétrie ou d'actinométrie [58] permettent notamment de vérifier ces valeurs. Une incertitude subsiste quant à la quantité de micro-organismes qui peut se retrouver dans l'eau atmosphérique, notamment dans des conditions fortement polluées, même si Kaplan et al [68] mentionnent que l'eau générée depuis l'atmosphère semble peu affectée par la pollution en tant que telle. En termes de teneur en minéraux, il reste désormais à considérer quels minéraux ajouter et dans quelles proportions, pour concevoir un système dans le but d'assurer un contenu minéral sain de l'eau produite.

RÉFÉRENCES

[1] "La crise de l'eau en 5 chiffres," 2023. [En ligne]. Disponible : https://www.sciencepresse.qc.ca/actualite/2023/03/23/crise-eau-5-chiffres

[2] UNESCO, "United nations world water development report on partnerships and cooperation," 2023. [En ligne]. Disponible : https://www.unesco.org/reports/wwdr/2023/en

[3] M. Qasim, M. Badrelzaman, N. N. Darwish, N. A. Darwish et N. Hilal, "Reverse osmosis desalination : A state-of-the-art review," *Desalination*, vol. 459, p. 59–104, juin 2019. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0011916418325037

[4] U. Legrand, D. Klassen, S. Watson, A. Aufoujal, B. Nisol, R. Boudreault, K. E. Waters, J.-L. Meunier, P.-L. Girard-Lauriault, M. R. Wertheimer et J. R. Tavares, "Nanoporous Sponges as Carbon-Based Sorbents for Atmospheric Water Generation," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 60, n°. 35, p. 12 923–12 933, sept. 2021. [En ligne]. Disponible : https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.iecr.1c02248

[5] T. Horikawa, D. Do et D. Nicholson, "Capillary condensation of adsorbates in porous materials," *Advances in Colloid and Interface Science*, vol. 169, n°. 1, p. 40–58, nov. 2011. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0001868611001497

[6] USEPA, "Lt1eswtr disinfection profiling and benchmarking technical guidance manual," 05 2003.

[7] SantéCanada, "Recommandations pour la qualité de l'eau potable au canada." [En ligne]. Disponible : https://www.canada.ca/fr/sante-canada/services/publications/vie-saine/recommandations-pour-qualite-eau-potable-canada-turbidite/page-14-recommandations-pour-qualite-eau-potable-canada-turbidite.html

[8] X. Liu, D. Beysens et T. Bourouina, "Water Harvesting from Air : Current Passive Approaches and Outlook," *ACS Materials Letters*, vol. 4, n°. 5, p. 1003–1024, mai 2022. [En ligne]. Disponible : https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsmaterialslett.1c00850

[9] N. Gargiulo, A. Peluso et D. Caputo, "MOF-Based Adsorbents for Atmospheric Emission Control : A Review," *Processes*, vol. 8, n°. 5, p. 613, mai 2020. [En ligne]. Disponible : https://www.mdpi.com/2227-9717/8/5/613

[10] I. Rosborg et F. Kozisek, édit., *Drinking Water Minerals and Mineral Balance : Importance, Health Significance, Safety Precautions*. Cham : Springer International Publishing, 2019. [En ligne]. Disponible : http://link.springer.com/10.1007/978-3-030-18034-8

[11] SantéCanada, “Guidelines for canadian drinking water quality : Guideline technical document – iron.” [En ligne]. Disponible : https://www.canada.ca/en/health-canada/services/publications/healthy-living/guidelines-canadian-drinking-water-quality-guideline-technical-document-iron.html

[12] ——, “Guidelines for canadian drinking water quality : Guideline technical document – hardness.” [En ligne]. Disponible : https://www.canada.ca/en/health-canada/services/publications/healthy-living/guidelines-canadian-drinking-water-quality-guideline-technical-document-hardness.html

[13] ——, “Drinking water quality guidelines - chemical and physical parameters.” [En ligne]. Disponible : https://www.canada.ca/en/services/health/publications/healthy-living.html

[14] USEPA, “National secondary drinking water regulations,” 02 2023. [En ligne]. Disponible : https://www.epa.gov/sdwa/drinking-water-regulations-and-contaminants

[15] *Nutrients in drinking water*. Geneva, Switzerland : Water, Sanitation, and Health Protection and the Human Environment, World Health Organization, 2005, oCLC : 68980269.

[16] LégisQuébec, “Règlement sur la qualité de l’eau potable,” 08 2023. [En ligne]. Disponible : https://www.legisquebec.gouv.qc.ca/fr/document/rc/q-2,%20r.%2040

[17] “Qualité des eaux pluviales : évaluation, contrôle et suivi.” [En ligne]. Disponible : https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/pluviales/chap8.pdf

[18] A. Hollingsworth, N. Smith, M. Goodwyn et N. Rakestraw, “Atmospheric water generation system using multi-stage filtration and method of forming same,” USA Brevet US20 200 239 347A1, juill. 2020.

[19] N. Pichel, M. Vivar et M. Fuentes, “The problem of drinking water access : A review of disinfection technologies with an emphasis on solar treatment methods,” *Chemosphere*, vol. 218, p. 1014–1030, mars 2019. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045653518323129

[20] A. Malayeri, M. Mohseni, B. Cairns, J. Bolton, G. Chevrefils et E. Caron, “Fluence (UV Dose) Required to Achieve Incremental Log Inactivation of Bacteria, Protozoa, Viruses and Algae,” 2016. [En ligne]. Disponible : https://sentinel-air.co.uk/app/uploads/2020/11/180301_UVSensitivityReview_full.pdf

[21] B. Flannigan, R. Samson et J. Miller, “Microorganisms in indoor air,” *Microorganisms in home and indoor work environments : Diversity, health impacts, investigation and control*, vol. 2, p. 17–31, 2001.

[22] V. Trivittayasil, K. Nashiro, F. Tanaka, D. Hamanaka et T. Uchino, “Inactivation characteristics and modeling of mold spores by uv-c radiation based on irradiation dose,” *Food Science and Technology Research*, vol. 21, n°. 3, p. 365–370, 2015.

[23] G. E. Clayton, R. M. S. Thorn et D. M. Reynolds, “The efficacy of chlorine-based disinfectants against planktonic and biofilm bacteria for decentralised point-of-use drinking water,” *npj Clean Water*, vol. 4, n°. 1, p. 48, déc. 2021. [En ligne]. Disponible : https://www.nature.com/articles/s41545-021-00139-w

[24] A. Hinenoya, S. P. Awasthi, N. Yasuda, A. Shima, H. Morino, T. Koizumi, T. Fukuda, T. Miura, T. Shibata et S. Yamasaki, “Chlorine Dioxide is a Better Disinfectant than Sodium Hypochlorite against Multi-Drug Resistant *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, and *Acinetobacter baumannii*,” *Japanese Journal of Infectious Diseases*, vol. 68, n°. 4, p. 276–279, 2015. [En ligne]. Disponible : https://www.jstage.jst.go.jp/article/yoken/68/4/68_JJID.2014.294/_article

[25] S. E. Hrudey, “Chlorination disinfection by-products, public health risk tradeoffs and me,” *Water Research*, vol. 43, n°. 8, p. 2057–2092, mai 2009. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0043135409000943

[26] Lenntech. [En ligne]. Disponible : https://www.lenntech.com/processes/disinfection/chemical/disinfectants-sodium-hypochlorite.htm

[27] J. Sohn, G. Amy, J. Cho, Y. Lee et Y. Yoon, “Disinfectant decay and disinfection by-products formation model development : chlorination and ozonation by-products,” *Water Research*, vol. 38, n°. 10, p. 2461–2478, mai 2004. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0043135404001320

[28] W. Hijnen, E. Beerendonk et G. Medema, “Inactivation credit of UV radiation for viruses, bacteria and protozoan (oo)cysts in water : A review,” *Water Research*, vol. 40, n°. 1, p. 3–22, janv. 2006. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S004313540500610X

[29] Jarvis, Autin, Goslan et Hassard, “Application of Ultraviolet Light-Emitting Diodes (UV-LED) to Full-Scale Drinking-Water Disinfection,” *Water*, vol. 11, n°. 9, p. 1894, sept. 2019. [En ligne]. Disponible : https://www.mdpi.com/2073-4441/11/9/1894

[30] “Introduction and comparison study between uv-led and uv mercury discharge lamp (uv-mdl).” [En ligne]. Disponible : https://www.alliedscientificpro.com/fr_CA/blog/bienvenue-sur-nos-blogs-1/introduction-and-comparison-study-between-uv-led-and-uv-mercury-discharge-lamp-uv-mdl-155

[31] K. A. Sholtes, K. Lowe, G. W. Walters, M. D. Sobsey, K. G. Linden et L. M. Casanova, “Comparison of ultraviolet light-emitting diodes and low-pressure mercury-arc lamps for disinfection of water,” *Environmental Technology*,

vol. 37, nº. 17, p. 2183–2188, sept. 2016. [En ligne]. Disponible : https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/09593330.2016.1144798

[32] A. Hajimalayeri, "Effect of UV-LED fluence rate and reflection on inactivation of microorganisms," Mémoire de maîtrise, University of British Columbia, Vancouver, août 2016.

[33] S. E. Beck, H. Ryu, L. A. Boczek, J. L. Cashdollar, K. M. Jeanis, J. S. Rosenblum, O. R. Lawal et K. G. Linden, "Evaluating UV-C LED disinfection performance and investigating potential dual-wavelength synergy," *Water Research*, vol. 109, p. 207–216, févr. 2017. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0043135416308697

[34] J. Christensen et K. G. Linden, "How particles affect UV light in the UV Disinfection of Unfiltered Drinking Water," *Journal AWWA*, vol. 95, nº. 4, p. 179–189, avr. 2003. [En ligne]. Disponible : https://awwa.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/j.1551-8833.2003.tb10344.x

[35] Y. Cai, Y. Zhao, A. K. Yadav, B. Ji, P. Kang et T. Wei, "Ozone based inactivation and disinfection in the pandemic time and beyond : Taking forward what has been learned and best practice," *Science of The Total Environment*, vol. 862, p. 160711, mars 2023. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0048969722078147

[36] G. Gelete, H. Gokcekus, D. U. Ozsahin, B. Uzun et T. Gichamo, "Evaluating disinfection techniques of water treatment," *DESALINATION AND WATER TREATMENT*, vol. 177, p. 408–415, 2020. [En ligne]. Disponible : http://www.deswater.com/DWT_abstracts/vol_177/177_2020_408.pdf

[37] Y. Penru, A. R. Guastalli, S. Esplugas et S. Baig, "Disinfection of Seawater : Application of UV and Ozone," *Ozone : Science & Engineering*, vol. 35, nº. 1, p. 63–70, janv. 2013. [En ligne]. Disponible : https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/01919512.2012.722050

[38] K. Harding, R. Ntimbani, P. Mashwama, R. Mokale, M. Mothapo, N. Gina et D. Gina, "Decomposition of ozone in water," *Chemical Technology*, p. 6–10, 07 2013.

[39] J. Kim, A. E. Mironov, J. H. Cho, D. S. Sievers, C. M. Herring, S. Park, P. P. Sun, Z. Liang, W. Chen, S. Park et J. G. Eden, "Commercialization of microcavity plasma devices and arrays : Systems for VUV photolithography and nanopatterning, disinfection of drinking water and air, and biofilm deactivation for medical therapeutics," *Plasma Processes and Polymers*, vol. 19, nº. 10, p. 2200075, oct. 2022. [En ligne]. Disponible : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ppap.202200075

[40] C. Hendrickson, J. Oremo, O. O. Akello, S. Bunde, I. Rayola, D. Akello, D. Akwiri, S.-J. Park et S. Dorevitch, "Decentralized solar-powered drinking water ozonation in

Western Kenya : an evaluation of disinfection efficacy," *Gates Open Research*, vol. 4, p. 56, oct. 2020. [En ligne]. Disponible : https://gatesopenresearch.org/articles/4-56/v2

[41] K. Song, M. Mohseni et F. Taghipour, "Application of ultraviolet light-emitting diodes (UV-LEDs) for water disinfection : A review," *Water Research*, vol. 94, p. 341–349, mai 2016. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0043135416301300

[42] H. Zhang, Y. Tian, M. Kang, C. Chen, Y. Song et H. Li, "Effects of chlorination/chlorine dioxide disinfection on biofilm bacterial community and corrosion process in a reclaimed water distribution system," *Chemosphere*, vol. 215, p. 62–73, janv. 2019. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045653518318472

[43] Z. Sun, M. Li, W. Li et Z. Qiang, "A review of the fluence determination methods for UV reactors : Ensuring the reliability of UV disinfection," *Chemosphere*, vol. 286, p. 131488, janv. 2022. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045653521019603

[44] M. Hessling, A. Gross, K. Hoenes, M. Rath, F. Stangl, H. Tritschler et M. Sift, "Efficient Disinfection of Tap and Surface Water with Single High Power 285 nm LED and Square Quartz Tube," *Photonics*, vol. 3, n°. 1, p. 7, janv. 2016. [En ligne]. Disponible : http://www.mdpi.com/2304-6732/3/1/7

[45] K. Oguma, R. Kita, H. Sakai, M. Murakami et S. Takizawa, "Application of UV light emitting diodes to batch and flow-through water disinfection systems," *Desalination*, vol. 328, p. 24–30, nov. 2013. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0011916413003792

[46] P. Pramanik, S. Das, A. Adhikary, C. R. Chaudhuri et A. Bhattacharyya, "Design and implementation of water purification system based on deep ultraviolet light emitting diodes and a multi-pass geometry reactor," *Journal of Water and Health*, vol. 18, n°. 3, p. 306–313, juin 2020. [En ligne]. Disponible : https://iwaponline.com/jwh/article/18/3/306/74103/Design-and-implementation-of-water-purification

[47] S. Wengraitis, P. McCubbin, M. M. Wade, T. D. Biggs, S. Hall, L. I. Williams et A. W. Zulich, "Pulsed UV-C Disinfection of *Escherichia coli* With Light-Emitting Diodes, Emitted at Various Repetition Rates and Duty Cycles," *Photochemistry and Photobiology*, vol. 89, n°. 1, p. 127–131, janv. 2013. [En ligne]. Disponible : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1751-1097.2012.01203.x

[48] G. Y. Lui, D. Roser, R. Corkish, N. J. Ashbolt et R. Stuetz, "Point-of-use water disinfection using ultraviolet and visible light-emitting diodes," *Science of The Total Environment*, vol. 553, p. 626–635, mai 2016. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0048969716302509

[49] D. Collins, L. Yitao et R. West, “Ultraviolet disinfection system,” USA Brevet US9 540 252B1, janv. 2017.

[50] “Ultraviolet light (uv) disinfection.” [En ligne]. Disponible : https://www.truewaterquality.com/systems/ultraviolet-light-uv-disinfection/

[51] R. Boodaghians et S. Nazari, “Point of use water treatment device,” USA Brevet US9 260 323B2, févr. 2016.

[52] D. Conrad, R. Boodaghians, R. Wilbanks et G. Murray, “UV water treatment in portable water tank,” USA Brevet US10 266 426B1, avr. 2019.

[53] J. Bolton, “Calculation of ultraviolet fluence rate distributions in an annular reactor : significance of refraction and reflection,” *Water Research*, vol. 34, n°. 13, p. 3315–3324, sept. 2000. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0043135400000877

[54] K. Oguma, R. Kita et S. Takizawa, “Effects of arrangement of uv light-emitting diodes on the inactivation efficiency of microorganisms in water,” *Photochemistry and Photobiology*, vol. 92, n°. 2, p. 314–317, mars 2016. [En ligne]. Disponible : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/php.12571

[55] USEPA, “Uv disinfection guidance manual for the lt2eswtr,” 11 2006. [En ligne]. Disponible : https://www.epa.gov/system/files/documents/2022-10/ultraviolet-disinfection-guidance-manual-2006.pdf

[56] H. Kim, S. R. Rao, E. A. Kapustin, L. Zhao, S. Yang, O. M. Yaghi et E. N. Wang, “Adsorption-based atmospheric water harvesting device for arid climates,” *Nature communications*, vol. 9, n°. 1, p. 1191, 2018.

[57] W. J. Kowalski, W. P. Bahnfleth, D. L. Witham, B. F. Severin et T. S. Whittam, “Mathematical Modeling of Ultraviolet Germicidal Irradiation for Air Disinfection,” *Quantitative Microbiology*, vol. 2, n°. 3, p. 249–270, 2000. [En ligne]. Disponible : http://link.springer.com/10.1023/A:1013951313398

[58] S. Jin, A. A. Mofidi et K. G. Linden, “Polychromatic UV Fluence Measurement Using Chemical Actinometry, Biodosimetry, and Mathematical Techniques,” *Journal of Environmental Engineering*, vol. 132, n°. 8, p. 831–841, août 2006. [En ligne]. Disponible : https://ascelibrary.org/doi/10.1061/%28ASCE%290733-9372%282006%29132%3A8%28831%29

[59] K.-F. Cao, Z. Chen, Y.-G. Sun, B.-H. Huang, Q. Shi, Y. Mao, Y.-H. Wu, Y. Lu et H.-Y. Hu, “Modeling and optimization of synergistic ozone-ultraviolet-chlorine process for reclaimed water disinfection : From laboratory tests to software simulation,” *Water Research*, vol. 243, p. 120373, sept. 2023. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0043135423008096

[60] O. Zikanov, *Essential computational fluid dynamics*, second edition éd. Hoboken, NJ : Wiley, 2019.

[61] J. G. Chatila et H. R. Danageuzian, "PIV and CFD investigation of paddle flocculation hydrodynamics at low rotational speeds," *Scientific Reports*, vol. 12, nº. 1, p. 19742, nov. 2022. [En ligne]. Disponible : https://www.nature.com/articles/s41598-022-23935-x

[62] D. Salvi, D. Boldor, J. Ortego, G. M. Aita et C. M. Sabliov, "Numerical Modeling of Continuous Flow Microwave Heating : A Critical Comparison of COMSOL and ANSYS," *Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy*, vol. 44, nº. 4, p. 187–197, janv. 2010. [En ligne]. Disponible : http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/08327823.2010.11689787

[63] "Learn openfoam." [En ligne]. Disponible : https://holzmann-cfd.com/community/learn-openfoam

[64] J. Crha, P. Basařová, M. C. Ruzicka, O. Kašpar et M. Zednikova, "Comparison of Two Solvers for Simulation of Single Bubble Rising Dynamics : COMSOL vs. Fluent," *Minerals*, vol. 11, nº. 5, p. 452, avr. 2021. [En ligne]. Disponible : https://www.mdpi.com/2075-163X/11/5/452

[65] T. R. Steiner, "High temperature steady-state experiment for computational radiative heat transfer validation using COMSOL and ANSYS," *Results in Engineering*, vol. 13, p. 100354, mars 2022. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S259012302200024X

[66] T. Ernawati, "Character Comparison Visualization Of Natural Indicators In Alkalimetric Titration," *Journal of the Turkish Chemical Society Section A : Chemistry*, vol. 9, nº. 4, p. 1073–1082, nov. 2022. [En ligne]. Disponible : http://dergipark.org.tr/en/doi/10.18596/jotcsa.1108468

[67] "Rapport annuel montréal ouest et mont royal." [En ligne]. Disponible : https://portail-m4s.s3.montreal.ca/pdf/2022_rapport_annuel_montreal_montreal_ouest_et_mont-royal.pdf

[68] A. Kaplan, G. Ronen-Eliraz, S. Ratner, Y. Aviv, Y. Wolanov et D. Avisar, "Impact of industrial air pollution on the quality of atmospheric water production," *Environmental Pollution*, vol. 325, p. 121447, mai 2023. [En ligne]. Disponible : https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0269749123004499