

# Thèse CIFRE de Julien Kermorvant

Concept d'empreintes chimiques appliqué à la gestion du risque chimique des matériaux, gisements recyclés et emballages alimentaires

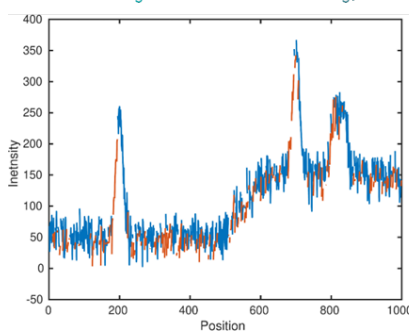
**Contexte :** L'économie circulaire remet en cause la possibilité de gérer collectivement les risques sanitaires des nouveaux matériaux et applications des emballages par les acteurs de la filière agroalimentaire. La contamination indirecte des aliments par les emballages est gérée par des concepts ambigus de substances intentionnellement ou non intentionnellement ajoutées, qui disparaissent quand les gisements sont mélangés ou vieillis.

**Description des travaux :** Les travaux visent à mesurer la complexité des mélanges de contaminants pour construire une empreinte de la contamination, d'un gisement de matériaux thermoplastiques ou celluloses. Afin de permettre une application en routine à l'échelle des acteurs de la filière (ex. mesure toutes les 20 tonnes, ou toutes les semaines), l'information chimique est quantifiée en chromatographie en phase gaz couplée à la spectrométrie de masse basse résolution. Elle est enregistrée sous forme alphanumérique par une transformée en ondelettes qui code la variation du signal transformé, sa largeur et son intensité. Une substance ou un gisement peuvent être identifiés par une séquence préenregistrée dans une base de données. Une classification hiérarchique basée sur des critères complémentaires de distance d'édition et de concept d'information mutuelle permet l'évaluation du potentiel de la méthode pour tracer des gisements ou reconnaître des défauts sur ligne de production. Une application inverse permet de reconstruire un signal de chromatographie filtré pour être interprété avec les outils classiques de chimiométrie. Les résultats sont disponibles sous la forme d'un projet open source.

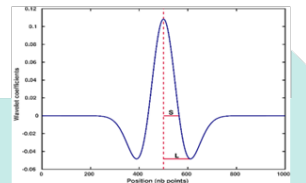
## Méthodologie



RAW GC-MS signals with column bleeding, noise...

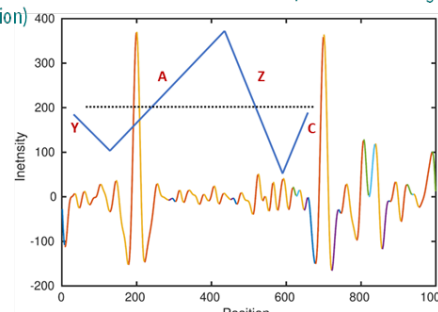


Symmetric Wavelet Transform

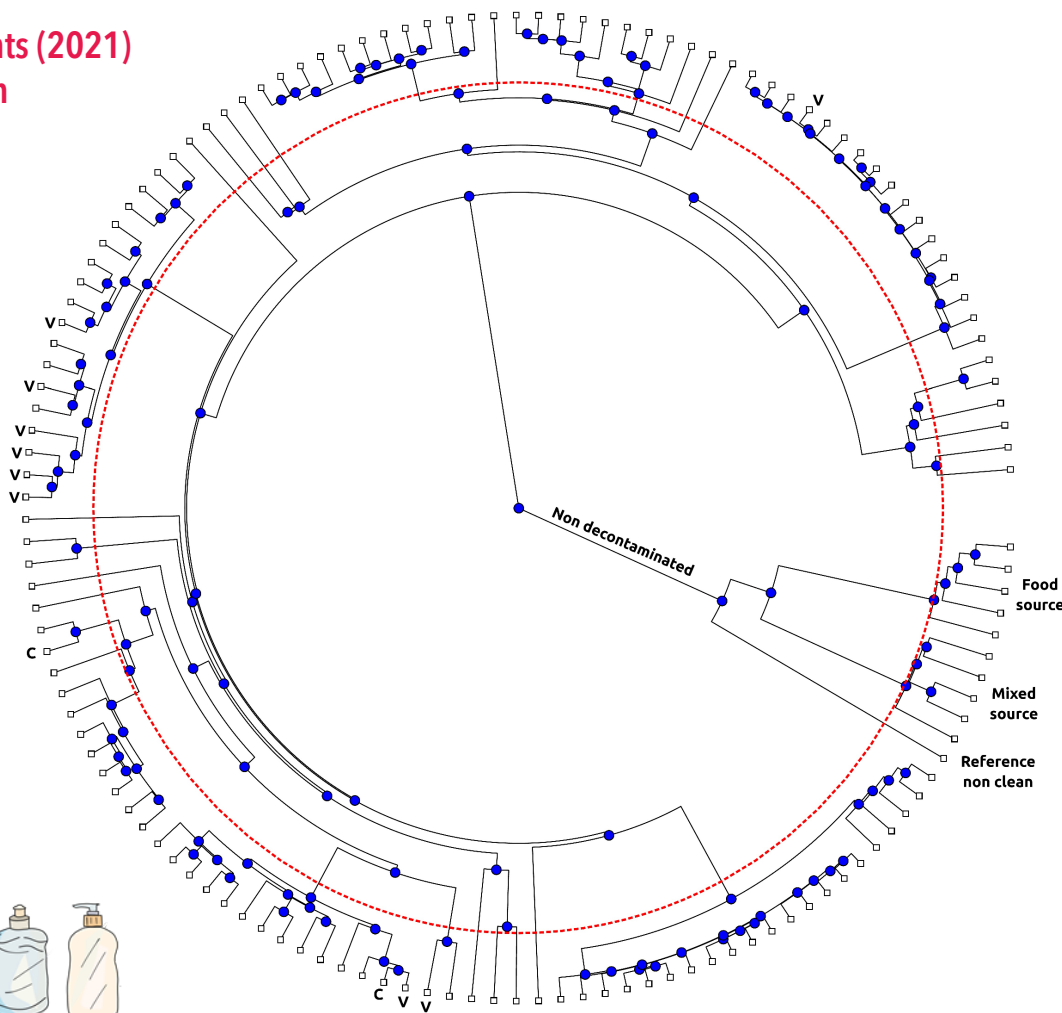
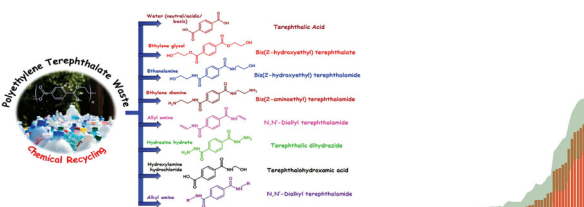
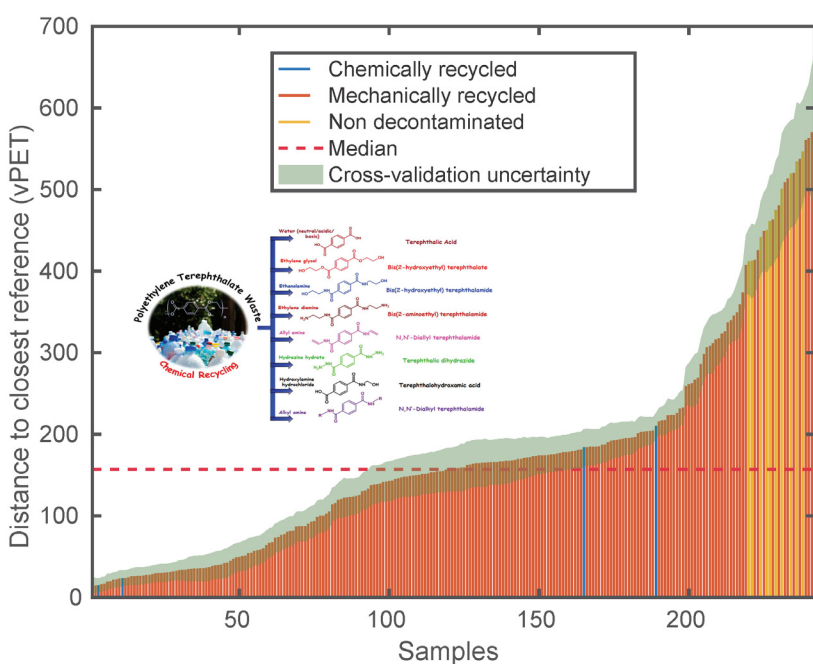


Character	Positive start	Increasing	Crossing X
A	0	1	1
B	1	1	0
C	0	1	0
X	1	0	0
Y	0	0	0
Z	1	0	1

TAGGING+ENCODING MONOTONIC SEGMENTS (6 letters + strong compression)



**Exemple de résultats : survey of 135 PET from 4 continents (2021)**  
25 groups of sourcing | sorting | origin | decontamination



UNITÉ MIXTE TECHNOLOGIQUE SAFEMAT 22.07 - ACTIA

Axe de l'UMT  
Alimentarité  
des recyclats

Partenariat  
LNE, INRAE  
Thèse UMT

Thèse  
Julien  
Kermorvant  
(soutenance  
21/03/2023)

Communications  
ILSI 2022  
SFGP 2022  
ICEF 2023

Contact  
olivier.vitrac@agroparistech.fr  
(Directeur thèse)