



## Action R1.3.1

# Valorisation des données liées aux procédés d'oxydation avancée des micropolluants

### Contacts :

Julien Le Roux (julien.le-roux@u-pec.fr)

My-Dung Jusselme (thi-my-dung.jusselme@u-pec.fr)

## CONTEXTE

Le Laboratoire Eau Environnement et Systèmes Urbains (Leesu), en partenariat avec le Service Public de l'Assainissement Francilien (SIAAP), travaille depuis une quinzaine d'années sur le comportement des polluants prioritaires et d'autres substances le long des filières de traitement des eaux résiduaires urbaines et dans les procédés de traitement avancés (adsorption sur charbon actif, ozonation), dans le cadre du programme OPUR. Récemment, le SIAAP s'intéresse à la désinfection des effluents d'eaux usées rejetés en Seine en vue d'améliorer la qualité sanitaire des eaux pour les JO 2024. Des essais de **désinfection à l'acide performique** ont notamment été réalisés à l'échelle industrielle, et une thèse de la phase 5 d'OPUR (thèse C. Nabintu Kajoka, 2020-2023) a été menée pour comprendre les mécanismes réactionnels de l'acide performique avec les eaux usées, en particulier avec les micropolluants organiques.

Ce travail de thèse a eu pour objectif d'améliorer la compréhension et l'élimination des micropolluants pharmaceutiques (résidus de médicaments) le long des filières de traitement des eaux résiduaires urbaines (ERU), et a notamment évalué le potentiel de l'acide performique pour l'élimination de ces micropolluants. Des expérimentations ont d'abord été réalisées avec l'acide performique seul, puis en couplage avec d'autres procédés ou oxydants chimiques (ex. UV-C/PFA, ozone/PFA, UV-C/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, ozone/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>...). Ces expériences ont été menées à la fois à l'échelle laboratoire (réacteurs batch) et à l'échelle pilote (alimenté en continu par un effluent d'ERU sur l'usine de Seine Centre). **L'élimination de produits pharmaceutiques** a été évaluée à partir d'analyses ciblées d'une trentaine de molécules, permettant d'établir des relations entre les propriétés physico-chimiques des molécules (notamment le logP) et leur élimination par les différents procédés.

Au cours de ces expérimentations, des **analyses non-ciblées par spectrométrie de masse haute résolution (HRMS)** ont été réalisées (UPLC-IMS-QTOF disponible dans la plateforme Prammics de l'OSU Efluve) afin de suivre l'évolution des micropolluants organiques au cours des différents traitements, et de potentiellement identifier certains produits de dégradation des molécules étudiées. Des **analyses de métagénomique** (diversité bactérienne) ont également été menées afin d'estimer les impacts des traitements sur les communautés microbiennes des eaux usées.

## OBJECTIFS

Les objectifs de ce travail sont les suivants :

- Exploiter les données HRMS obtenues pour identifier le comportement des produits dégradés et la formation de produits de transformation,
- Exploiter les données de métagénomique pour identifier l'impact des traitements sur les communautés microbiennes,
- Déterminer à partir de l'ensemble des données obtenues (analyses ciblées et non-ciblées) les performances et les limites de tous les procédés d'oxydation, et en estimer la faisabilité opérationnelle (d'un point de vue technico-économique) afin de déterminer si ce type de traitement est adapté aux eaux usées et aux contraintes opérationnelles,

Des expérimentations de laboratoire complémentaires pourront être envisagées pour affiner la compréhension des mécanismes réactionnels et de la formation de produits de transformation lors des procédés d'oxydation.

## MÉTHODOLOGIE

Cette action fera principalement l'objet d'un post-doctorat d'un an. Il s'agira de reprendre les données acquises en HRMS dans la phase 5 d'OPUR et d'identifier les produits de transformation formés lors des différents traitements appliqués, à partir des molécules pharmaceutiques ajoutées dans les échantillons. Pour cela, différentes méthodes employées avec les données de HRMS pourront être utilisées :

- Une approche par screening suspect en établissant au préalable une liste de produits de transformation d'intérêt (ex. produits déjà observés dans la littérature). Une base de données sera créée dans le logiciel de l'instrument pour rechercher des molécules d'intérêt directement dans les spectres acquis.
- Une approche non-ciblée, par différentes méthodes statistiques discriminantes (ex. ACP, OPLS-DA) permettant d'isoler les marqueurs/composés spécifiquement formés lors des traitements. Les applications statistiques (R/Shiny) développées au Leesu pourront être utilisées à cet effet.

Pour l'analyse technico-économique des procédés, les données d'investissement et de consommation énergétique des différents couplages envisagés (ozonation, UV-C,

avec ou sans ajout d'acide performique ou d'H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) seront mobilisées avec l'aide du SIAAP.

## RÉSULTATS ATTENDUS ET RETOMBÉES

Les résultats permettront :

- d'estimer la production de sous-produits par les différents procédés et en comprendre les mécanismes réactionnels, en particulier pour les procédés basés sur l'acide performique, encore peu caractérisés ;
- d'évaluer l'impact des procédés sur les communautés microbiennes, et de relier ces impacts avec l'évolution des contaminants chimiques ;
- d'estimer la faisabilité opérationnelle (d'un point de vue technico-économique) des procédés de traitement avancés étudiés, en prenant en compte leur pertinence pour les eaux usées et les contraintes opérationnelles du SIAAP

Il est attendu d'une part une valorisation sous forme d'articles scientifiques internationaux pour les résultats de HRMS et de produits de transformation et les résultats de métagénomique, et d'autre part une valorisation sous forme d'article technique dans une revue nationale (ex. TSM) pour la comparaison technico-économique des procédés.