

RAPPORT D'ÉTUDE
N° DRC - 15-136884-12446A

22/12/2015

**Analyse économique de stratégies de gestion à
long terme des micropolluants urbains**

Thème 16 Action C.3

Rapport final

Décembre 2015

Avec le soutien financier de



Analyse économique de stratégies de gestion à long terme des micropolluants urbains

Thème 16 Action C.3

Rapport final

Décembre 2015

ONEMA

Direction Générale, Le Nadar Hall C 5, square Félix Nadar
94300 Vincennes, France

Liste des personnes ayant participé à l'étude :

Cantuarias-Villessuzanne, Carmen

Brignon, Jean-Marc

Mombelli, Enrico

PRÉAMBULE

Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

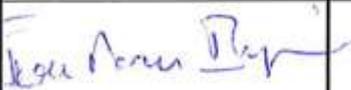
	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	Carmen CANTUARIAS- VILLESSUZANNE Enrico MOMBELLI	Jean-Marc BRIGNON	Laurence ROUÏL
Qualité	Économiste de l'environnement DRC/DECI/EDEN Ingénieur DRC/VIVAI/METO	Responsable d'Unité DRCDECI/EDEN	Responsable de pôle DRC/DECI
Visa	 		

TABLE DES MATIÈRES

1.	INTRODUCTION.....	15
2.	DEMARCHE GENERALE	16
3.	CONSTRUCTION DES SCENARIOS DE RISQUE	18
3.1	Substances du scénario de risque « actuel »	18
3.2	Substances du scénario de risque « émergent ».....	21
4.	DESCRIPTION ET EVALUATION DU SCENARIO DE TRAITEMENT DES EAUX USEES	23
4.1	Concentrations en micropolluants à l'entrée du traitement tertiaire (C).....	23
4.2	Efficacité des traitement tertiaires	23
4.3	Prédiction par modélisation QSAR du taux de rejection par nanofiltration (R%).....	24
4.4	Evaluation du coût du traitement tertiaire	29
5.	EVALUATION DE LA REDUCTION A LA SOURCE : COUT DE SUBSTITUTION	31
6.	COMPARAISON ENTRE TRAITEMENT ET SUBSTITUTION.....	39
7.	PERSPECTIVES.....	42
8.	REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	43
9.	LISTE DES ANNEXES	47

RESUME

Résumé

L'analyse économique de stratégies nationales de gestion des micropolluants urbains s'intègre dans les exigences de la Directive-Cadre sur l'Eau et dans le plan d'action national de lutte contre la pollution des milieux aquatiques (Plan Micropolluants).

L'objectif de l'étude est de comparer, en termes de coûts et d'efficacité, les différentes approches pour réduire les rejets des micropolluants, dans le contexte de deux scénarios de « risques » (une liste réduite et une liste allongée de micropolluants d'intérêt). En particulier, nous comparons le coût de ne pas émettre une même quantité d'un polluant, soit en la substituant à la source, soit en l'éliminant des rejets d'eaux usées par l'ajout de traitements tertiaires en station d'épuration urbaine.

En premier lieu, nous construisons **deux scénarios contrastés de risques** liés aux rejets de substances dangereuses pour les milieux aquatiques. Chaque scénario est constitué d'une liste argumentée de substances, avec les références d'études et leurs critères de choix, basée sur une recherche des études françaises sur les polluants émergents les plus significatives (notamment les études déjà réalisées par l'ONEMA).

- Le premier scénario de « risque actuel » représente un statu-quo et se focalise donc sur les substances réglementées au titre de la DCE (et de sa déclinaison en droit national) qui sont pertinentes en milieu urbain, et pour lesquelles il existe des leviers d'action.
- Le deuxième scénario de « risque émergent » présente une vision à plus long terme et regroupe des substances potentiellement dangereuses issues des plusieurs travaux de synthèse sur les substances émergentes. Nous avons retenu 16 substances dans le premier scénario et les 16 initiales plus 23 substances supplémentaires dans le second.

La deuxième étape de la démarche consiste à **caractériser les stratégies de réduction** des micropolluants :

- Pour l'option « substitution à la source », nous analysons le coût de substitution des substances sur la base des alternatives de remplacement ou des changements d'usages. Les données prises en compte proviennent notamment des travaux de la réglementation UE REACH et d'études INERIS.
- Pour l'option du « traitement complémentaire en STEU », nous recensons l'efficacité des moyens technologiques de traitement tertiaire des eaux usées : ozonation, charbon actif et technologies membranaires. Nous modélisons le taux d'abattement par nanofiltration car il s'agit du traitement qui abat le plus large spectre de micropolluants et pour lequel des travaux de modélisation d'abattement sont disponibles.

Il est à noter qu'il y existe peu de données expérimentales sur l'efficacité des procédés tertiaires pour l'ensemble des substances d'intérêt pour l'étude. De la même façon, les études sur les coûts de substitution des substances sont limitées à certains usages étudiés dans la réglementation. Pour cette raison, de nombreuses hypothèses ont été nécessaires afin de proposer un cadre de comparaison.

Enfin, la troisième étape qui constitue le principal travail de l'étude, consiste à **comparer les deux stratégies en termes de coût d'opportunité**. La comparaison entre le traitement des effluents et la substitution des substances est réalisée pour le cas d'une station d'épuration d'une ville de 200 000 eq.hab, et porte, par construction des scénarios, sur le coût des deux stratégies pour une même réduction des émissions de micropolluants dans les milieux aquatiques. Nous répondons ainsi à la question suivante, pour chaque substance, puis pour leur ensemble (en additionnant les coûts de substitution) : quel aurait été le coût de substituer à la source pour ne pas émettre dans les milieux aquatiques la quantité abattue par la STEU ?

Les résultats font apparaître que, même dans le cas où la liste de micropolluants est plus longue, et donc le coût de substitution plus élevé, les coûts de substitution seraient inférieurs aux coûts du traitement tertiaire par nanofiltration. Par construction, les quantités de micropolluants non-émises dans les cours d'eau sont égales entre le scénario traitement et le scénario de substitution, et il s'agit donc d'une comparaison à performances environnementales égales.

La conclusion en faveur de la substitution ne peut pas à ce stade d'une étude exploratoire être considérée comme fermement établie, en raison des très nombreuses incertitudes qui entourent l'ensemble des données exploitées. Cette étude devrait être confirmée par des travaux plus approfondis et inclure d'autres techniques de traitement tertiaires.

Le point le plus important serait de réaliser une extrapolation de l'étude à un nombre plus important de micropolluants (de l'ordre de 100 à 200), pour voir comment évolueraient les coûts de substitution pour une très longue liste de micropolluants. En effet, s'il semble que le traitement ne se justifie pas pour les listes de micropolluants étudiées ici, leur prise en compte de manière exhaustive pourrait changer la perspective.

Mots clés (thématique et géographique)

Micropolluants, substances prioritaire, substances dangereuses, traitement des eaux usées, STEU, STEP, substitution à la source, coût de traitement des eaux usées, structure de coût, analyse coût-efficacité de traitement des eaux usées, France.

ABSTRACT

Abstract

The economic analysis of national urban micropollutant strategies is part of the requirements of the Water Framework Directive (WFD) and the national action plan to fight micropollution in aquatic environments (Plan Micropolluants).

The objective of this study is to compare in terms of cost and efficiency, the different approaches to reduce the release of micropollutants in the context of two risk scenarios (a short list and an extended list of micropollutants). Particularly, we compare the substitution cost of chemicals of the same amount of a pollutant against the cost of tertiary treatment.

First, we construct two contrasting scenarios of risks associated with dangerous substances. These scenarios consist of a list of substances, built with references studies and selection criteria. This construction of the scenarios was based on French studies of the most significant emerging pollutants (including studies already carried out by ONEMA).

- The first risk scenario, called current risk, represents a *statu-quo*, therefore it focuses on hazardous substances regulated by the WFD and its variation in national law that are relevant in urban areas, and for which there are means of actions and regulation in progress.
- The second risk scenario, called emergent, presents a prospective vision and includes potentially dangerous substances from several synthetic research studies on emerging substances. We selected the 16 initial substances in the first scenario and 23 additional substances in this second scenario.

The second step of the process is to characterize the reduction strategies of micropollutants:

- For the substitution scenario, we analyze the opportunity cost for the replacement by alternatives or changes in use. The sources of information taken into account are the UE REACH regulation and INERIS studies.
- For the advanced treatment in WWTP scenario, we identify effective technological means of wastewater treatment: ozonation, activated carbon and membrane technologies. We model the abatement rate by nanofiltration because technically this process reduces the larger spectrum of micropollutants and for which modeling is available.

It should be noted that there are few experimental data on the effectiveness of tertiary processes for all substances analyzed. Similarly studies on the costs of substitution are limited to the use discussed in regulation. For these insufficient data many assumptions have been established to provide a framework for comparison.

The third step is to establish a framework for comparison of two strategies in terms of opportunity cost. This comparison is the main contribution of the study. The comparison between treatment and substitution is made to the case of a wastewater treatment plant of a city of 200,000 eq.hab, and estimates, for construction of scenarios, the cost of two strategies for the same micropollutant abatement in aquatic environments. We answer the question: how much would it cost to replace the same amount of pollutant that WWTP rejected?

The results show that even in the case where the list of micropollutants is extended, the advanced treatment costs are higher, the substitution cost are below the cost of tertiary treatment by nanofiltration. Since the amount of non-released micropollutants is equal for both alternative scenarios, this is therefore a comparison with equal environmental performance.

The conclusion supporting the substitution cannot at this stage of an exploratory study be considered as firmly established, because of the many uncertainties surrounding input data and assumptions used. Results should be confirmed by further studies; in particular, other treatment techniques should be considered.

The most important point would be to carry out an extrapolation of the study to a larger number of micropollutants (about 100 to 200), to see how scenarios would change for a very long micropollutant lists. Indeed, even if it appears that the treatment does not seem justified for the micropollutant lists studied here, a really very exhaustive list could change the perspective.

Key words (thematic and geographical area)

Micropollutants, hazardous substances, wastewater treatment, WWT, substitution of hazardous chemicals, wastewater treatment cost, cost structure, cost-effectiveness analysis of waste water treatment, France.

SYNTHESE POUR L'ACTION OPERATIONNELLE

L'analyse économique de stratégies nationales de gestion des micropolluants urbains s'intègre dans les exigences de la Directive-Cadre sur l'Eau et dans le plan d'action national de lutte contre la pollution des milieux aquatique (Plan Micropolluants). Par cette première étude exploratoire sur la comparaison de deux stratégies de réduction de polluants l'INERIS étend la perspective en incluant la substitution à la source des substances dans les stratégies étudiées.

L'objectif de l'étude est de comparer, en termes de coûts, et d'efficacité, les différentes approches pour réduire les rejets des micropolluants, dans le contexte de deux scénarios (une liste réduite et une liste allongée de micropolluants d'intérêt). En particulier on compare le traitement tertiaire des eaux usées urbaines et la substitution de produits chimiques à la source.

On construit en premier lieu deux scénarios contrastés de risques liés aux substances dangereuses. Ces scénarios sont constitués d'une liste argumentée de substances, avec les références d'études et leurs critères de choix. Cette construction des scénarios s'est basée sur une recherche des études françaises sur les polluants émergents les plus significatives (notamment les études déjà réalisées par l'ONEMA).

Le premier scénario de *risque actuel* représente un *statu-quo* et se focalise donc les substances prioritaires dangereuses actuelles de la DCE qui sont pertinentes en milieu urbain, et pour lesquelles il existe des leviers d'action. Le deuxième scénario de *risque émergent* présente une vision à plus long terme et comprend en plus des substances potentiellement dangereuses issues de plusieurs travaux de synthèse sur les substances émergentes. Nous avons retenu 16 substances dans le premier scénario et 39 substances dans le second scénario, les 16 substances initiales auxquelles sont ajoutées 23 molécules supplémentaires.

Les deux tableaux qui suivent présentent les substances retenues dans chacun des deux scénarios.

Substances du scénario de risque « actuel » Liste 1	Famille chimique/Usage	Classification substance (SDP/SP/PSEE) ¹
Arsenic	Métaux	PSEE
Cadmium et ses composés	Métaux	SDP
Chrome	Métaux	PSEE
Cuivre	Métaux	PSEE
Di(2-éthylhexyl) phtalate (DEHP)	Phtalates	SDP
Dichlorométhane	Hydrocarbure aliphatique halogéné	SP
HAP	Hydrocarbures aromatiques	SDP/SP
HBCDD	Retardateurs de flamme bromés	SDP
Mercure et ses composés	Métaux	SDP
Nickel et ses composés	Métaux	SP
Nonyl phénols	Alkylphénols	SDP
PFOS	Composés perfluorés	SDP
Plomb et ses composés	Métaux	SP
Trichloroéthylène	Composés organiques COV	(Autre polluant DCE)
Trichlorométhane (chloroforme)	Composés chimiques organochlorés	SP
Zinc	Métaux	PSEE

¹ [8] Référence à l'arrêté du 25 janvier 2010 sur l'évaluation de substances de l'état chimique ou écologique ; SDP : substance dangereuse prioritaire, SP substance prioritaire, PSEE : polluant spécifique de l'état écologique.

Substances du scénario de risque « émergent » (Substances du premier scénario + les suivantes) Liste 2	Famille chimique	Classification substances ²
17β-estradiol	Médicaments, hormone	SPAS
4-tert-butylphenol	Composé organique	SPAS
Benzo(a)anthracene	Hydrocarbure aromatique polycyclique	
Bisphénol A	Bisphénol	SPAS
Butylglycol (EGBE)	Ether de glycol	
Carbamazepine	Médicament, antiépileptique	SPAS
Chlorure de vinyle (Chloroethylene)	COV	
Decabromodiphenylether (BDE-209)	Polybromodiphényléthers (PBDE)	
Decahydronaphtalene		
Diazepam	Médicament	SPAS
Dibenzo(a,h)anthracene	Hydrocarbure aromatique polycyclique	SPAS
Diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE)	Ether de glycol	
Diisononyl phtalate (DINP)	Phtalates	SPAS
Estrone	Médicament	SPAS
Ethyl-parabène	Parabènes	SPAS
Ketoprofene	Médicament	SPAS
Methyl-parabene	Parabènes	SPAS
Ofloxacin	Médicament	SPAS
o-Phenylphenol	Phénols	SPAS
Oxazepam	Médicament	SPAS
Sulfamethazine	Médicament	SPAS
Tributylphosphate	Composés organiques volatils	PSEE
Triclosan		SPAS

La deuxième étape de la démarche consiste à caractériser les stratégies de réduction des micropolluants :

- Pour le scénario « traitement complémentaires en STEU », nous recensons l'efficacité des moyens technologiques de traitement tertiaire des eaux usées, avec notamment une vision prospective par la modélisation des taux d'abattement des technologies membranaires.
- Pour l'option substitution à la source, nous analysons le coût de substitution des substances sur la base des substances alternatives ou des changements d'usages. Les évaluations prises en compte sont les travaux issus de la réglementation REACH et les études INERIS.

Il est à noter qu'il y a peu des données expérimentales sur l'efficacité des procédés tertiaires pour l'ensemble des substances d'intérêt. De la même façon les études sur les coûts de substitution des substances sont limités aux usages étudiés dans la réglementation sur certains de leurs usages. Pour cela de nombreuses hypothèses ont été nécessaires afin de proposer un cadre de comparaison.

² [7] Référence à l'arrêté du 7 août 2015 : SPAS : substance pertinente à surveiller dans les eaux de surface

Enfin, la troisième étape consiste à comparer les deux stratégies en termes de coût d'opportunité. La comparaison entre le traitement et la substitution est réalisée pour le cas de la station d'épuration d'une ville de 200 000 eq.hab, et porte sur le coût des deux stratégies pour une même réduction des émissions de micropolluants dans les milieux aquatiques. Cette comparaison est le principal travail de l'étude et intègre cinq étapes (voir Figure 1).

Le calcul débute avec la caractérisation des concentrations en micropolluants de l'eau traitée par une STEU conventionnelle d'une taille de 200 000 eq.hab. Des taux d'abattement par les techniques de traitement tertiaire³ sont appliqués aux flux sortant de la STEU conventionnelle, et permettent de calculer les quantités de micropolluants non-émises dans l'environnement aquatique grâce à ces traitements. Parallèlement, le coût total de ces traitements (investissement et exploitation) est calculé.

On calcule ensuite les quantités de substances qu'il aurait fallu substituer à la source, pour ne pas émettre les quantités qui ont été traitées par les traitements additionnels. Ceci est fait en divisant les quantités traitées par un ratio représentant le taux de transfert des quantités utilisées à la source vers les milieux aquatiques. On obtient le coût de substitution pour chaque substance en multipliant les quantités à substituer par le coût de substitution par kg (ou t).

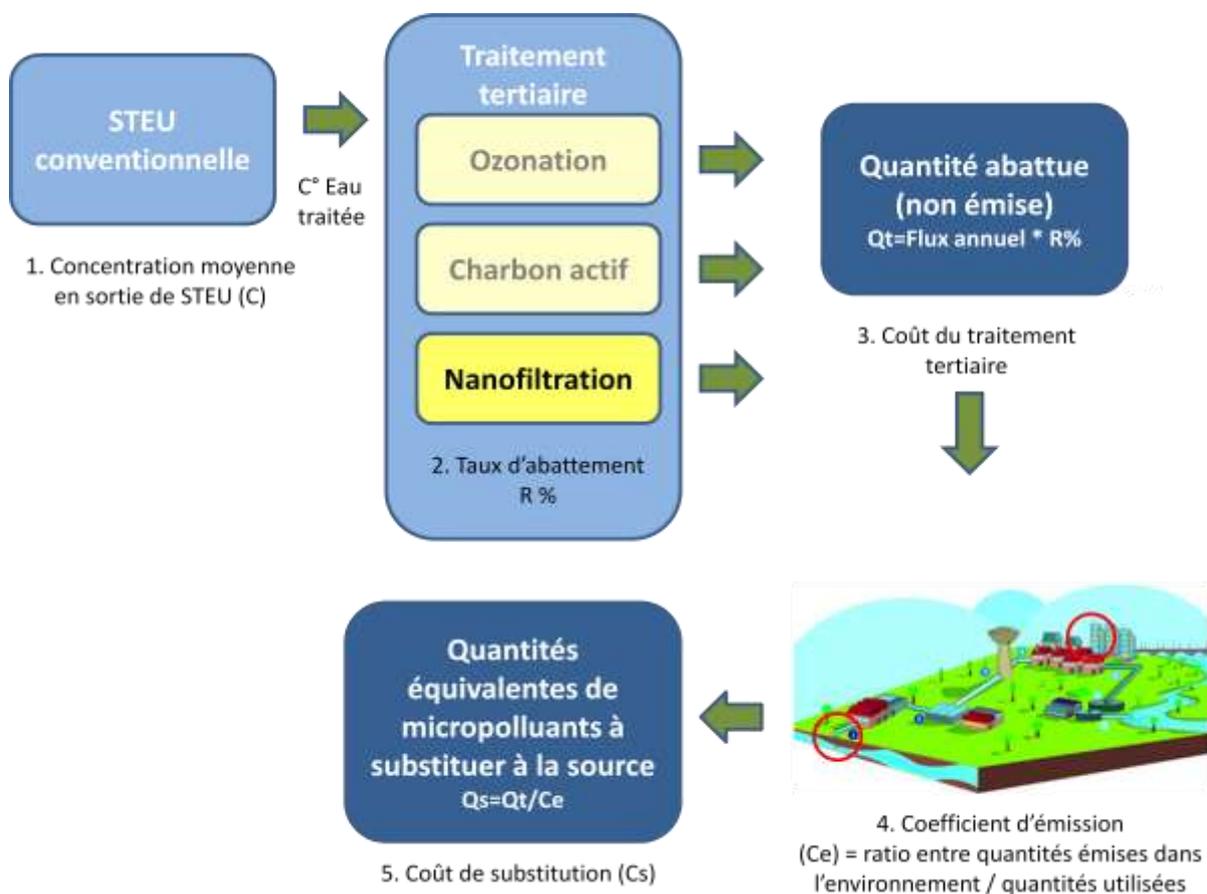


Figure 1 Etapes de calcul des coûts de traitement des eaux usées et des coûts de la substitution à la source

Le traitement par nanofiltration n'est pas le plus adapté à des eaux usées urbaines en raison des risques de colmatage, et est sensiblement plus cher que d'autres traitements, mais dans le cadre d'une étude exploratoire, il permet d'entreprendre une première comparaison entre traitement et substitution.

³ En pratique, les calculs n'ont pu être menés que pour le traitement de nanofiltration, en raison du manque de données sur les taux d'abattement sur les autres traitements tertiaires

Les résultats de la comparaison des deux stratégies, sont résumés sur la Figure 2. Deux estimations (haute et basse) des coûts de substitution, correspondant à deux hypothèses des taux d'abattement par nanofiltration et donc de quantités de micropolluants à substituer, sont prises en compte.

Dans la Figure 2, nous observons que le coût de substitution des substances de la liste 1 est largement supérieur à celui des substances de la liste 2, bien qu'elles soient en plus grand nombre. Deux facteurs expliquent cela. D'abord, la liste 1 comprend principalement des métaux, dont les quantités abattues par le traitement et à substituer sont élevées, et dont le coût de substitution est également significatif. Ensuite, la liste 2 contient un nombre important de médicaments, pour lesquels nous supposons un coût de substitution nul car des actions de réduction à la source sont prévues par les instances de santé.

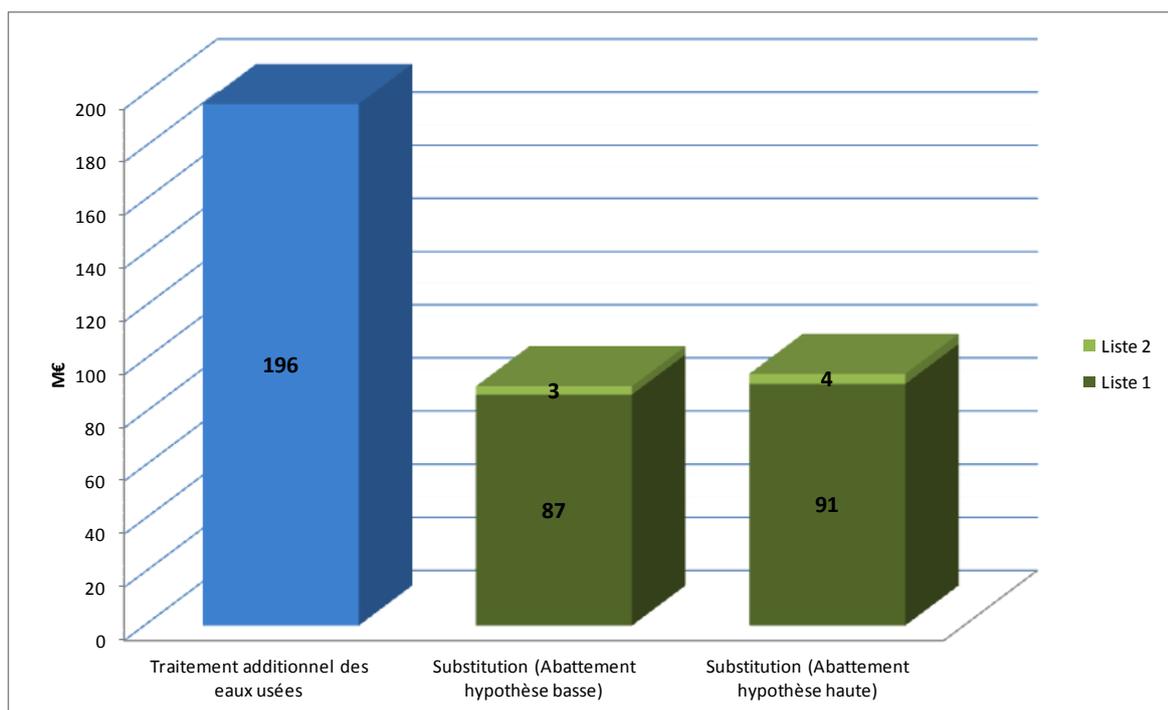


Figure 2 Comparaison des coûts de traitement tertiaire et des coûts de substitution des micropolluants (à quantités non-émises dans l'eau de surface égales, pour le cas d'une ville de 200 000 eq.hab)

Le coût de traitement tertiaire par nanofiltration est estimé à 196 M€ (coût actualisé en 2015 d'un projet d'investissement public intégrant le coût de l'infrastructure de nanofiltration et le coût opérationnel pendant 20 ans). Le coût de substitution est également récurrent et annuel, et il est actualisé sur 20 ans.

Les coûts de substitution sont dominés à 90% par le plomb pour des raisons particulières⁴. Une étude plus approfondie de son cas serait utile, mais nous présentons aussi les résultats en retirant le plomb de l'analyse dans la Figure 3.

⁴ Il s'agit de la conjonction de plusieurs facteurs : un coefficient d'émission très faible dans l'environnement depuis les matériaux en place d'après la littérature consultée, des quantités importantes dans les rejets, un traitement tertiaire efficace, ce qui conduit à des quantités très importantes à substituer, et de plus le plomb est très dense donc son coût de substitution au kilo est très élevé.

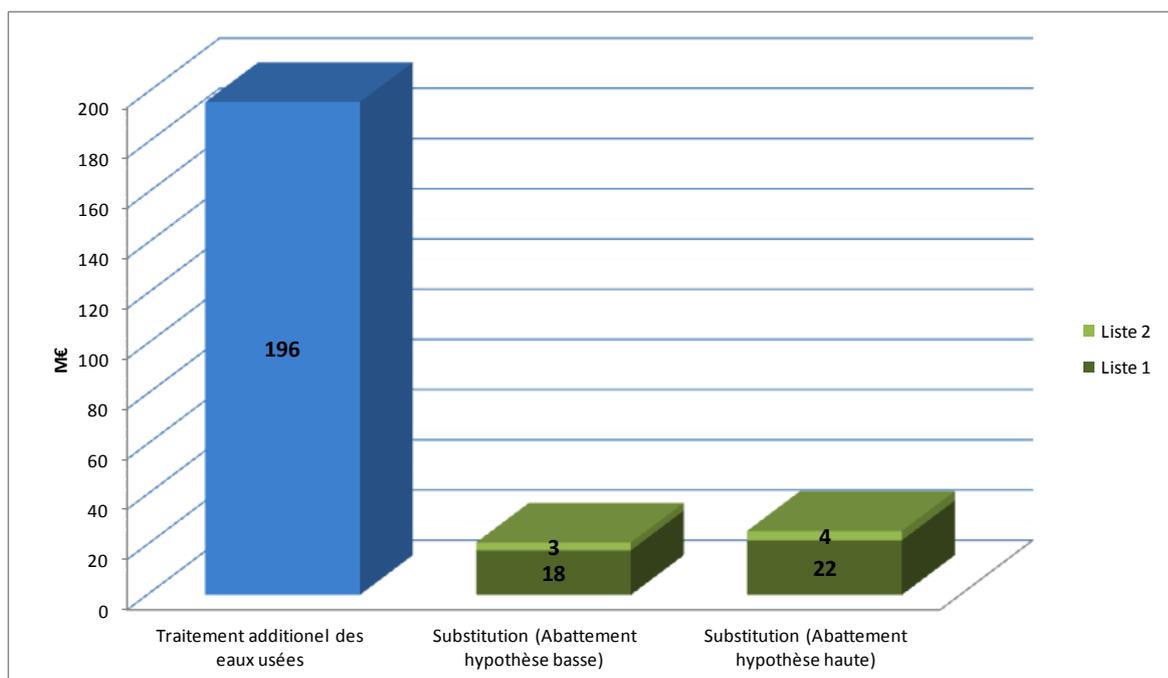


Figure 3 Comparaison des coûts de traitement tertiaire et des coûts de substitution (sans le plomb) des micropolluants (à quantités non-émises dans l'eau de surface égales, sauf pour le plomb, et pour le cas d'une ville de 200 000 eq.hab)

Ces résultats font apparaître que, même dans le cas où la liste de micropolluants est plus longue, et donc le coût de substitution plus élevé, les coûts de substitution sont inférieurs aux coûts du traitement tertiaire par nanofiltration. Les coûts ne sont toutefois pas supportés par les mêmes agents économiques :

- Dans le cas du traitement des eaux usées, le coût serait éventuellement ajouté au prix de l'eau.
- Dans le cas de la substitution les coûts sont supportés par l'industrie et les consommateurs.

On rappelle que, par construction, les quantités de micropolluants non-émises dans les cours d'eau sont égales entre le scénario traitement et chacun des deux scénarios de substitution, et qu'il s'agit donc d'une comparaison à performances environnementales égales.

La conclusion en faveur de la substitution ne peut pas à ce stade d'une étude exploratoire être considérée comme fermement établie, en raison des très nombreuses incertitudes qui entourent l'ensemble des données exploitées, et notamment : les performances des traitements tertiaires, les ratios entre quantités de micropolluants utilisées et émises dans les eaux, et les coûts de substitution unitaires.

Les nombreuses incertitudes et les hypothèses faites, les difficultés à trouver des données, font que cette étude est exploratoire et devrait être confirmée par des études plus approfondies incluant d'autres techniques de traitement.

Le point le plus important serait de tenter une extrapolation de l'étude à un nombre bien plus grand de micropolluants (de l'ordre de 100 à 200), pour voir comment évoluent les coûts de substitution pour une très longue liste de micropolluants. En effet, s'il semble que le traitement ne se justifie pas pour les listes de micropolluants étudiées ici, une liste réellement très exhaustive pourrait changer la perspective.

1. INTRODUCTION

Le bon état des masses d'eau est indispensable à la protection des écosystèmes et des ressources en eau potable. La construction et l'amélioration continue des stations d'épuration a considérablement amélioré la qualité des eaux. Néanmoins la diversité des pressions connues sur les milieux aquatiques ne cesse de croître, notamment en termes de micropolluants que l'on identifie de mieux en mieux grâce à des techniques analytiques plus performantes.

La directive cadre sur l'eau (DCE) et le plan micropolluants 2016-2021 pour préserver la qualité des eaux et la biodiversité imposent de connaître, puis de réduire, voire de supprimer, les rejets de micropolluants afin d'atteindre un bon état des eaux.

L'atteinte de cet objectif suppose de mettre en œuvre des actions de réduction des émissions, et notamment des émissions urbaines dont certaines doivent faire partie des programmes des mesures (PDM), attachés aux schémas directeurs d'aménagement et de gestion des eaux (SDAGE). Pour cela, il est nécessaire de définir des stratégies de réduction des émissions.

Schématiquement, deux grandes approches pour la réduction des rejets de micropolluants sont utilisables : la substitution à la source des substances et l'amélioration du traitement des eaux usées ou pluviales en zone urbanisée.

Chacune de ces approches a son intérêt et ses limites :

- La substitution peut apparaître *a priori* séduisante en termes de coûts et d'efficacité, mais le caractère « moins dangereux » des nouvelles substances utilisées peut être difficile à établir et s'avérer incertain sur la durée, dans la mesure où la connaissance actuelle des dangers et des risques n'est que provisoire.
- Le traitement des effluents domestiques et industriels pourrait représenter un moyen radical de traiter un grand nombre de substances, déjà identifiées ou à venir, mais le coût des techniques à déployer est très élevé, et il y a une incertitude sur la liste des substances qui seront effectivement abattues efficacement.

L'objectif de cette étude exploratoire est de comparer ces deux approches sur un cas simplifié. L'INERIS cherche à alimenter la réflexion sur la stratégie nationale à long terme de gestion des micropolluants en apportant des éléments sur les coûts de substitution à la source. Cette première étude évalue la substitution de produits chimiques comme une alternative à l'investissement dans le traitement des effluents urbains.

Dans ce rapport nous comparons le traitement tertiaire des eaux usées (additionnel au traitement déjà en place) et la substitution de produits chimiques à la source en termes de coûts/efficacité (comparaison des coûts pour une même réduction des émissions), pour une situation urbaine typique. Afin d'étudier la sensibilité des conclusions de cette comparaison, nous étudions deux variantes, basées sur deux listes de substances (une liste courte, une liste longue), et pour la situation d'une STEP urbaine de 200 000 eq.hab. De plus, nous avons utilisé une fourchette pour les efficacités de traitement.

Les sources d'incertitudes sont importantes, notamment car il a fallu rassembler des sources de données et faire des choix et des hypothèses simplificatrices. Ainsi des conclusions définitives ne doivent pas être tirées de cette étude. Les incertitudes sont discutées en fin de rapport et sont indissociables de la lecture des résultats.

2. DEMARCHE GENERALE

Dans l'objectif d'évaluer les deux stratégies « substitution » et « traitement », nous suivons une analyse coût-efficacité⁵. Le schéma de construction des scénarios est présenté dans la Figure 4.

Comme cela est précisé par la suite, ces scénarios de traitement et de substitution sont construits de façon à avoir la même efficacité (même réduction des émissions dans les milieux aquatiques), et sont comparés du point de vue de leurs coûts.

Chacun des deux scénarios (substitution ou traitement) fait l'objet de deux variantes, qui se différencient par l'ampleur de la liste de micropolluants qui est prise en compte pour l'évaluation :

- une première variante traite des substances strictement visées dans la réglementation DCE, et est représentative des risques « actuels » reconnus dans la réglementation ;
- une seconde variante prend en compte des risques et des substances émergentes, comme des biocides, des médicaments et des perturbateurs endocriniens.

La section 5 détaille la façon dont les substances ont été choisies pour élaborer les deux variantes de listes de micropolluants étudiées, ce qui constitue la première étape de la démarche générale.

La deuxième étape de la démarche consiste à caractériser les stratégies de réduction des micropolluants :

- pour le scénario « traitement complémentaires en STEU », nous recensons l'efficacité des moyens technologiques de traitement des eaux usées, avec notamment une vision prospective par la modélisation des taux d'abattement des technologies membranaires ;
- pour l'option substitution à la source, nous analysons le coût de substitution des substances sur la base des alternatives de remplacement ou des changements d'usages. Les sources d'information utilisées sont notamment des études réalisées dans le cadre de la réglementation REACH et les fiches technico-économiques de l'INERIS.

⁵ L'analyse coût-efficacité est une évaluation des coûts de stratégies alternatives qui atteignent toutes le même objectif. Une analyse coût-efficacité peut permettre d'identifier la façon la moins coûteuse d'atteindre l'objectif en comparant deux ou plusieurs actions.

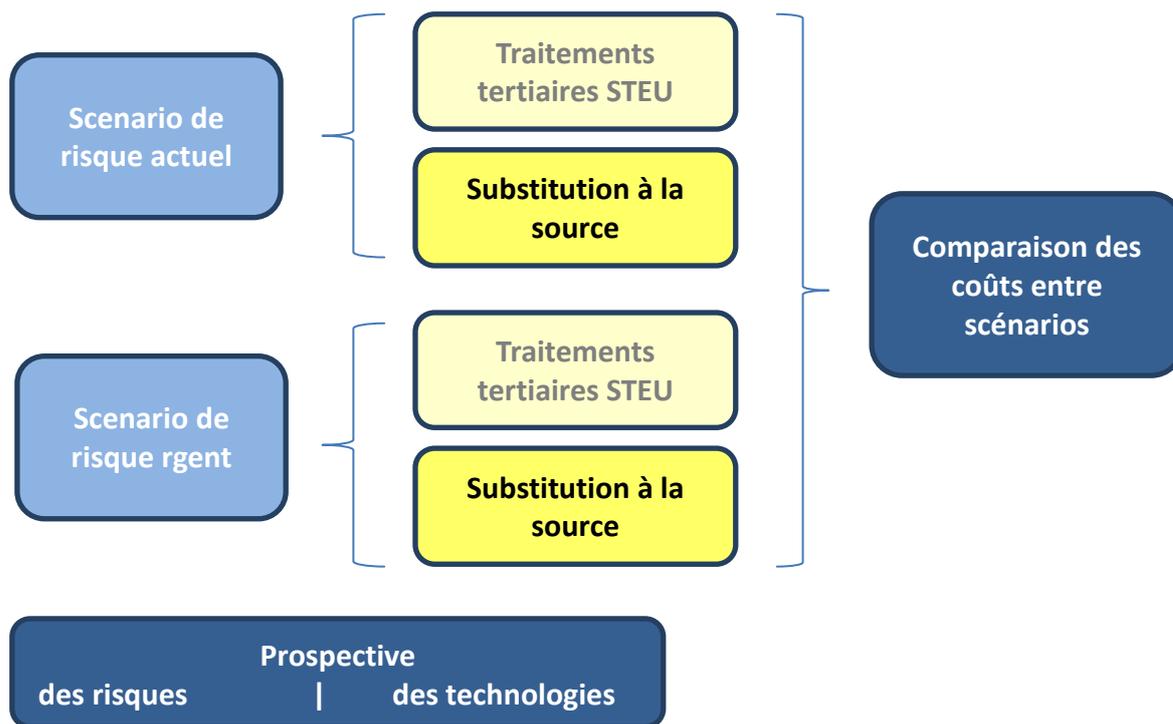


Figure 4 Démarche générale de l'étude

Enfin, la troisième étape consiste à établir un cadre de comparaison de deux stratégies en termes de coût d'opportunité. Cette comparaison est le principal travail de l'étude et il est composé de cinq points (voir la Figure 5).

Le principe de ces calculs est exposé ici, et les sources de données utilisées sont indiquées plus en détail dans les sections suivantes.

Le calcul débute avec la caractérisation des concentrations en micropolluants de l'eau traitée par une STEU conventionnelle d'une taille de 200 000 EH (point 1 de la comparaison). Des taux d'abattement par les techniques de traitement tertiaire additionnelles sont appliqués aux flux sortant de la STEU conventionnelle, et permettent de calculer les quantités de micropolluants non-émises dans l'environnement aquatique grâce à ces traitements (point 2). Ensuite, le coût total de ces traitements (investissement et exploitation) est calculé (point 3).

Il s'agit ensuite de calculer les quantités de substances qu'il aurait fallu substituer à la source, pour ne pas émettre les quantités qui ont été traitées par les traitements additionnels. Ceci est fait en divisant les quantités traitées par un ratio représentant le taux de transfert des quantités utilisées à la source vers les milieux aquatiques (point 4). On obtient le coût de substitution pour chaque substance en multipliant les quantités à substituer par le coût de substitution par unité de poids (point 5).

La section 7 donne plus d'information sur les sources d'information employées pour obtenir les ratios et les coûts unitaires de substitution à la source.

Enfin, la comparaison des scénarios s'effectue entre le coût du traitement additionnel, et la somme des coûts de substitution pour l'ensemble des substances considérées dans le scénario.

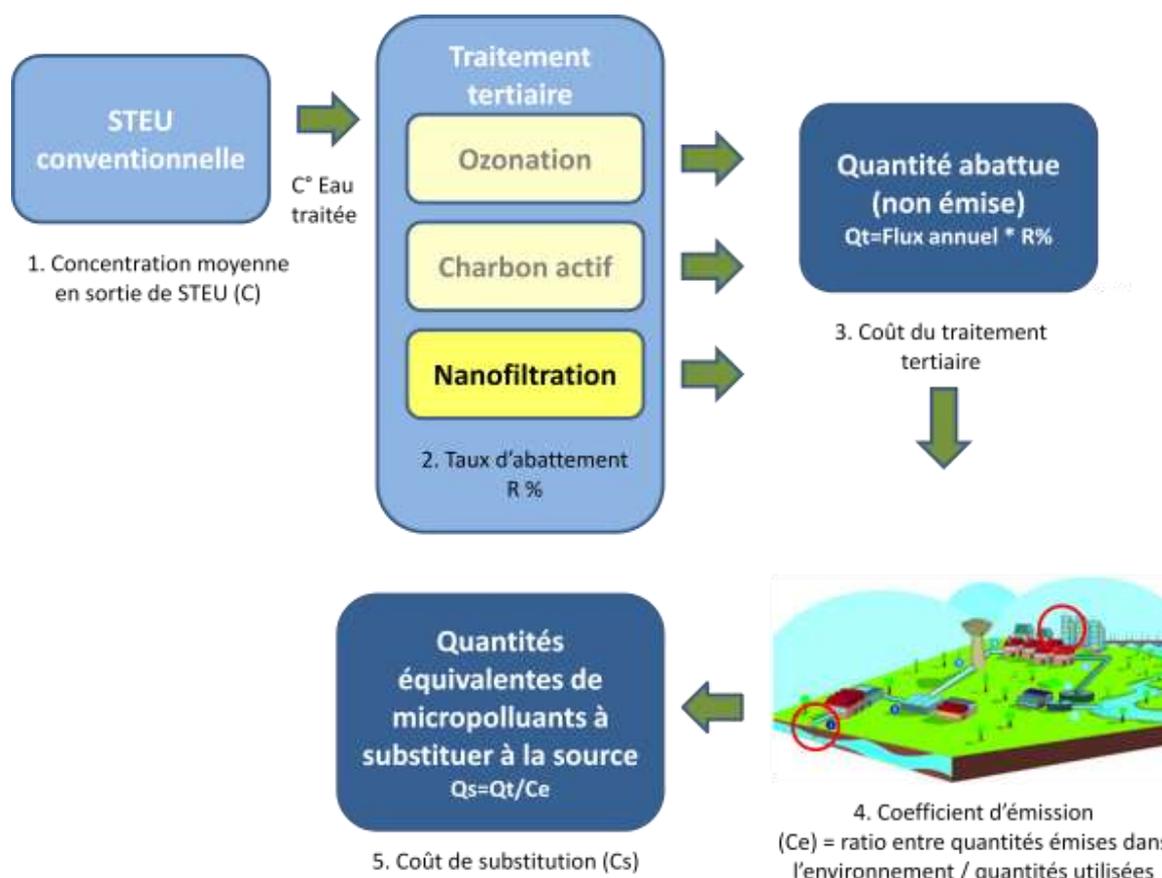


Figure 5 Etapes de calcul des coûts de traitement des eaux usées et des coûts de la substitution à la source

Les scénarios ne portent que sur le traitement des eaux en station d'épuration et non sur le traitement direct des eaux pluviales. Il s'agit d'une option envisageable, mais les données sur l'efficacité de ces traitements actuels et avancés sur les micropolluants sont beaucoup moins nombreuses que celles, déjà peu disponibles, sur les traitements d'épuration avancés des eaux usées. Cette option n'a donc pas pu être étudiée dans ce travail, mais resterait une option intéressante à explorer.

3. CONSTRUCTION DES SCENARIOS DE RISQUE

Deux scénarios de risque sont considérés. Ils sont présentés sous forme d'une liste de substances, dont on considère qu'elles doivent faire l'objet d'une suppression ou une réduction de leurs émissions dans le milieu aquatique.

- Le premier scénario, appelé *scénario de risque actuel*, est construit sur la base de substances prioritaires de la DCE.
- Le deuxième scénario, appelé *scénario de risque émergent*, regroupe des substances émergentes dangereuses avec une vision réglementaire à plus long terme, en se focalisant sur la pollution d'origine urbaine (celle qui est traitée dans les plus grandes stations d'épuration, a priori seules susceptibles d'investir dans des traitements de pointe et coûteux).

3.1 SUBSTANCES DU SCENARIO DE RISQUE « ACTUEL »

Le premier scénario de *risque actuel* représente un *statu-quo* et se focalise donc sur celles des substances prioritaires dangereuses actuelles de la DCE qui sont pertinentes en milieu urbain, et pour lesquelles il existe des leviers d'action.

Les critères de sélection sont les suivants pour ce scénario :

- Il s'agit des substances règlementées par la DCE et également des substances a priori prioritaires pour la mise en place de mesures spécifiques de réduction dans le cadre d'un PDM⁶.
- Elles présentent des rejets principalement ponctuels et d'origine urbaine pour lesquels il a été possible d'identifier des techniques ou technologies permettant de maîtriser les principaux rejets. Les polluants purement diffus ne sont pas retenus, car les techniques de traitement en stations d'épuration ne semblent que peu pertinentes les concernant.

Les substances sélectionnées sont présentées dans le Tableau 1. Pour la sélection nous nous basons essentiellement sur le rapport INERIS réalisé pour l'ONEMA [1].

⁶ Les substances « prioritaires pour les PDM » ont été identifiées dans Gouzy et al. (2014). Les auteurs décrivent quelques éléments et des opportunités d'action par substance.

Tableau 1 Liste de substances du scénario de risque « actuel »

	Substance	N°CAS	Code Sandre
1	Arsenic	7440-38-2	1369
2	Cadmium et ses composés	7440-43-9	1388
3	Chrome	7440-47-3	1389
4	Cuivre	7440-50-8	1392
5	Di(2-éthylhexyl)phtalate (DEHP)	117-81-7	
6	Dichlorométhane	75-09-2	
7	HAP	Benzo (g,h,i) Pérylène : 191-24-2	1118
		Indeno (1,2,3-cd) Pyrène : 193-39-5	1204
		Benzo (b) Fluoranthène : 205-99-2	1116
		Benzo (a) Pyrène : 50-32-8	1115
		Benzo (k) Fluoranthène : 207-08-9	1117
		Anthracène HAP : 120-12-7	1458
		Fluoranthène : 206-44-0	1191
8	HBCDD	Naphtalène : 91-20-3	1517
		1,2,5,6,9,10-Hexabromocyclododecane (HBCDD) : 3194-55-6	
		1,3,5,7,9,11-Hexabromocyclododecane (HBCDD) : 25637-99-4	7128
		α-HBCDD : 134237-50-6	
		β-HBCDD : 134237-51-7	
		γ-HBCDD : 134237-52-8	
9	Mercure et ses composés	7439-97-6	1387
10	Nickel et ses composés	7440-02-0	1386
11	Nonyl phénols	104-40-5	
12	PFOS	1763-23-1	
13	Plomb et ses composés	7439-92-1	1382
14	Trichloroéthylène	79-01-6	1286
15	Trichlorométhane (chloroforme)	67-66-3	1135
16	Zinc	7440-66-6	1383

3.2 SUBSTANCES DU SCENARIO DE RISQUE « EMERGENT »

Ce scénario comprend les substances du précédent scénario, et il est construit en prenant également en compte les substances émergentes présentes dans plusieurs études :

- Les résultats issus des travaux du Comité Experts Priorisation (CEP) synthétisé dans les « Propositions pour la sélection des substances de la feuille de route transition écologique (FRTE) » [2]. Ce travail a permis d'identifier des substances prioritaires en termes de protection des milieux aquatiques et d'enjeux sanitaires associés. Le CEP s'est basé sur l'état des connaissances actuelles et des données disponibles et exploitables pour identifier, parmi les substances, des familles d'intérêt prioritaire.
- Les résultats de l'étude prospective [3] ont permis d'enrichir le travail de priorisation décrit ci-dessus et de mettre en évidence des problématiques spécifiques à certains bassins.
- La base de données RSDE-STEU[4], gérée par l'INERIS, des mesures de substances à la sortie des stations d'épuration urbaines sur le territoire français, dans le cadre de l'action RSDE⁷.
- L'étude de diagnostic sur les substances dans les produits des ménages de l'AESN et l'OIE [5].

Nous avons élaboré ainsi une liste initiale de 190 substances identifiées dans l'ensemble de ces études. Sur cette liste initiale beaucoup trop longue pour se prêter à une étude comparative substitution/traitement dans le cadre du projet, nous avons retenu finalement 23 substances dangereuses émergentes (Tableau 2) (en plus des substances du scénario de risque actuel).

Une description synthétique de chacune des substances sélectionnées est disponible dans l'annexe 1 et la liste complète de substances identifiées est présentée dans l'annexe 2. Les critères de sélection finale de substances retenues pour le scénario de risque émergent ont été les suivants :

- Nous avons cherché à sélectionner des substances qui aboutissent à un ensemble représentatif des différents types de pressions et de sources de rejets : produits domestiques (par ex conservateurs), substances provenant de matériaux universels (monomères comme le BPA ou le CVM, plastifiants, retardateurs de flamme, autres additifs), résidus de médicaments et hormones.
- Nous avons privilégié les substances déjà identifiées par la stratégie de micropolluants déployée en Suisse [6], voir annexe 2. Cette étude économique sera en effet une source très importante de données technico-économiques et une base intéressante de comparaison internationale pour notre propre étude.
- Nous avons éliminé des substances chimiques dont nous savons que la réglementation européenne (REACH, Biocides, ...) a prévu une disparition rapide du marché.

La plupart de ces substances fait l'objet depuis décembre 2015 d'une surveillance obligatoire dans les milieux aquatiques [7], [8].

⁷ La base de données RSDE : <http://www.ineris.fr/rsde/>

Tableau 2 Liste de substances du scénario de risque « émergent » (en plus des substances du scénario de risque actuel)

	Substance	N° CAS	Code Sandre	Etude considérée	Usage principal identifié
1	17β-estradiol	50-28-2	5397	[3]	médicaments
2	4-tert-butylphenol	98-54-4	2610	[2], [4]	antioxydant
3	Benzo(a)anthracene	56-55-3	1082	[2]	
4	Bisphenol A	80-05-7		[3]	plastifiants
5	Butylglycol (EGBE)	111-76-2	2766	[5]	
6	Carbamazepine	298-46-4	5296	[3]	médicaments, antiépileptique
7	Chlorure de vinyle (Chloroethylene)	75-01-4	1753	[4]	gaz, extrêmement inflammable
8	Decabromodiphenylether (BDE-209)	1163-19-5	1815	[4]	produits industriels
9	Decahydronaphtalene	91-17-8	7117	[3]	produits industriels
10	Diazepam	439-14-5	5372	[3]	médicaments
11	Dibenzo(a,h)anthracene	53-70-3	1621	[2]	
12	Diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE)	112-34-5	2641	[5]	
13	Diisononyl phtalate (DINP)	28553-12-0	6215	[2]	
14	Estrone	53-16-7	5396	[3]	médicaments, hormone œstrogène
15	Ethyl-parabene	120-47-8		[2], [3]	produits de soin corporels
16	Ketoprofene	22071-15-4	5353	[3]	médicaments, antalgique et anti-inflammatoire
17	Methyl-parabene	99-76-3	6695	[3]	produits de soin corporels
18	Ofloxacin	82419-36-1	6533	[3]	médicaments, antibiotique
19	o-Phenylphenol	90-43-7	2781	[5]	alimentation, agriculture, biocide
20	Oxazepam	604-75-1	5375	[3]	médicaments, antibiotique
21	Sulfamethazine	57-68-1	6525	[3]	médicaments, antibiotique
22	Tributylphosphate	126-73-8	1847	[4]	
23	Triclosan	3380-34-5	5430	[3]	produits de soin corporels, biocide.

4. DESCRIPTION ET EVALUATION DU SCENARIO DE TRAITEMENT DES EAUX USEES

Dans cette partie, nous analysons les coûts d'investissement et d'exploitation associés à la mise en place d'un traitement additionnel tertiaire sur une STEU existante de référence, pour une réduction supplémentaire des micropolluants.

Nous nous basons notamment pour ce faire sur des données du projet ARMISTIQ [9] et adoptons les caractéristiques principales des stations de référence définies dans ce projet :

Les deux stations d'épuration de référence considérées dans ARMISTIQ sont :

- STEU de 200 000 EH (2740 m³/h traités),
- STEU de 60 000 EH (660 m³/h traités).

Le projet ARMISTIQ a choisi les tailles de ces deux STEU pour prendre en compte l'effet de la taille de la station sur le coût de traitements tertiaires. Nous ne disposons pas de données qui permettraient de prendre en compte l'effet de la taille (pour la nanofiltration que nous étudions), et donc nous ne retenons qu'un cas de station d'épuration de 200 000 eq.h. Ce choix est aussi justifié du fait que cette source d'incertitude sur les coûts de traitement est probablement faible au regard des autres (notamment les rendements d'élimination).

La construction du scénario de traitement nécessite des concentrations de substances en sortie d'une station conventionnelle et le rendement d'élimination des micropolluants par les traitements tertiaires (étape 2 de la Figure 5). La collecte de ces données est décrite dans les trois sections suivantes.

4.1 CONCENTRATIONS EN MICROPOLLUANTS A L'ENTREE DU TRAITEMENT TERTIAIRE (C)

Les concentrations moyennes en sortie de STEU ont été compilées à partir de plusieurs études et sources d'information. Nous avons privilégié les données des études françaises AMPERES et ARMISTIQ. Quand la substance n'avait pas été étudiée par ces projets, nous avons eu recours aux données de travaux du SIAAP (Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne). Enfin, quand nous n'avons pas identifié de données en France, le programme Suisse Micropoll a été notre source de données de concentration. Pour quelques substances, aucune donnée mesurée n'a été trouvée. Dans ce cas nous avons procédé à des estimations ad-hoc, par exemple en utilisant des données de flux rejeté disponibles sur le portail IREP [10] des rejets des installations classées, qui concerne également des stations d'épuration urbaines.

L'ensemble des données utilisées et les concentrations retenues figurent au Tableau 3.

4.2 EFFICACITE DES TRAITEMENT TERTIAIRES

Les études relatives aux micropolluants dans les eaux usées urbaines, réalisées en Suisse (stratégie « MicroPoll ») ont évalué les procédés de traitement tertiaires sur les exigences suivantes [5]:

- action à large spectre, car le procédé doit éliminer le plus grand nombre de substances problématiques ;
- éviter que le procédé engendre l'apparition de sous-produits ou de déchets indésirables ;
- applicabilité, notamment l'intégration du procédé dans l'équipement existant ;
- coût/ utilité, dépenses consenties (matériel, énergie, personnel, coût financier).

Selon l'état actuel des connaissances, d'après plusieurs auteurs [5]–[10], figurent les procédés d'ozonation et l'adsorption par charbon actif parmi les procédés les mieux appropriés pour éliminer les micropolluants, ainsi que la nanofiltration et l'oxydation avancée [5].

Les projets de recherche AMPERES et ARMISTIQ, les travaux de recherche sur des pilotes industriels au SIAAP [11], et la stratégie MicroPoll en Suisse [6] ont étudié principalement l'efficacité des procédés d'ozonation et d'absorption sur charbon actif en grain et en poudre (voir Annexe 1 Efficacité de traitements tertiaires des eaux usées). Toutefois l'ensemble des travaux cités ne prennent pas en compte tous les substances d'intérêt de notre étude, et nous ne pouvons pas les utiliser.

Le procédé pour lequel nous disposons le plus d'informations, est la nanofiltration. C'est surtout le seul pour lequel il a été possible de générer par modélisation (QSAR) une efficacité pour les molécules n'ayant pas été étudiées expérimentalement dans les études consultées.

Le traitement par nanofiltration n'est pas le plus adapté à des eaux usées urbaines et est sensiblement plus cher. Cependant dans le cadre d'une étude exploratoire, il permet d'entreprendre une première comparaison entre traitement et substitution.

La section suivante présente comment l'efficacité du traitement de nanofiltration a été évaluée.

4.3 PREDICTION PAR MODELISATION QSAR DU TAUX DE REJECTION PAR NANOFILTRATION (R%)

La nanofiltration (NF) est un procédé efficace pour l'élimination de composés pharmaceutiques, œstrogènes et composés odorants (projet européen POSEIDON⁸, 2004). L'efficacité de la nanofiltration dépend de plusieurs facteurs comme les propriétés de la membrane, les caractéristiques de polluants à filtrer et les caractéristiques physico-chimiques des effluents [12].

Le taux de rejection par nanofiltration peut être prédit grâce à des modèles QSAR⁹ en fonction des propriétés physicochimiques des substances chimiques. Yangali-Quintanilla, et al. (2010)[15] ont proposé un modèle linéaire (voir équation 1) qui prédit le taux de réjection en fonction de cinq propriétés physicochimiques : la longueur d'une molécule « *length* », sa profondeur « *depth* », sa largeur équivalente « *eqwidth* » (moyenne géométrique entre la largeur et la profondeur), le coefficient de distribution entre l'1-octanol et l'eau à pH 7.0 « *log D* » et le taux de rejection saline de la membrane « *SR* ».

$$\begin{aligned}
 \text{rejection (prédiction QSAR)} & \\
 &= 265.150 \text{ eqwidth} - 117.536 \text{ depth} + 81.662 \text{ length} \\
 &\quad - 5.229 \log D + 1358.090 \text{ SR} - 1447.817 \quad (1) \\
 (R^2 &= 0.74, F = 60.21, n = 106, Q2_{loo} = 0.72, RMSE = 10)
 \end{aligned}$$

$$\text{rejection (finale)} = \begin{cases} 100 \text{ si la prédiction QSAR} \geq 100 \\ \text{ou} \\ 0 \text{ si la prédiction QSAR} < 0 \\ \text{ou} \\ \text{prédiction QSAR pour toutes les autres valeurs} \end{cases}$$

⁸ EU-projet POSEIDON. http://www.poseidon.geo.uni-mainz.de/the_project.htm (1 décembre 2015).

⁹ Le principe des méthodes QSAR, *Quantitative Structure Activity Relationship*, consiste à mettre en place une relation mathématique à l'aide de méthodes d'analyse de données, reliant des propriétés moléculaires appelées descripteurs, à un effet expérimental (activité biologique, toxicité, affinité pour un récepteur), pour une série de composés chimiques similaires ; ils prennent en compte des informations sur la structure et les caractéristiques physico-chimiques des molécules [58].

Les résultats de taux de réjection par nanofiltration estimés à l'aide de ce modèle sont présentés dans le Tableau 3. Plusieurs substances ne se situent pas dans le domaine d'application du modèle et leurs prédictions sont incertaines. On consultera l'Annexe 3 pour une description détaillée de la modélisation. Le Tableau 3 présente aussi certaines données qui concernent le traitement par charbon actif et qui ont été utilisées pour compléter les données et modélisations effectuées pour la nanofiltration, pour les métaux, qui ne sont pas modélisables par QSAR, et pour lesquels nous n'avons pas identifié de données de réjection par nanofiltration. Pour certaines des substances, ces estimations sont très incertaines, car le modèle QSAR a été utilisé en dehors de son domaine d'application.

Pour les quantités éliminées en STEP, la variabilité de l'efficacité du traitement est prise en compte dans la modélisation QSAR : une quantité minimale et une quantité maximales sont donc calculées.

Les résultats de cette modélisation ont été confirmés par les quelques résultats expérimentaux disponibles (voir Annexe 3).

Il n'a pas été possible d'obtenir de données sur les concentrations en entrée de traitement tertiaire pour les 3 HAP de la liste 2 suivants : Benzo(a)anthracene, Dibenzo(a,h)anthracene et Decahydronaphtalene. Par conséquent, ils n'ont pas été pris en compte spécifiquement et les HAP ont été de toute façon étudiés globalement dans la liste 1 (car nous n'avons pas non plus de données sur des coûts de substitution spécifiques pour chacun d'entre eux, voir section 7).

Pour le o-Phenylphenol et la Sulfamethazine, on notera que les données sur les concentrations en entrée de STEU proviennent d'études réalisées en Espagne, et que des différences entre l'Espagne et la France sur les quantités utilisées, ou les traitements en STEU peuvent générer des incertitudes supplémentaires pour ces composés.

Tableau 3 Concentration moyenne en sortie de STEU et taux de rejection par traitement tertiaire (nanofiltration par modélisation QSAR et charbon actif)

Concentration moyenne en sortie de STEU – eaux traitées (ET)			Taux de rejection (NF) ou abattement (CA) du traitement complémentaire				
Concentration retenue pour l'étude (C) µg/L	Source de la donnée	Domaine d'application du modèle QSAR (DA)	Taux de rejection minimale (A _{min}) Modélisation QSAR - INERIS (%)	Taux de rejection maximale (A _{max}) Modélisation QSAR - INERIS (%)	Taux d'abattement par charbon actif pour substances non modélisables par QSAR (%)	Source du taux d'abattement charbon actif	
Substances de la liste 1							
Arsenic	2,300	[16]	non modélisable		15	[12]	
Cadmium et ses composés	0,060	[16]	non modélisable		15	[12]	
Chrome	1,800	[13]	non modélisable		55	[12]	
Cuivre	8,000	[16]	non modélisable		24	[12]	
Di(2-éthylhexyl)phtalate (DEHP)	4,200	[16]	N**	100	100		
Dichlorométhane	0,170	[16]	N**	0	0,5		
HAP							
Benzo (g,h,i) Pérylène : 191-24-2	0,002	[17]	N	45,5	72,7		
Indeno (1,2,3-cd) Pyrène : 193-39-5	0,002	[17]	N	48,7	75,8		
Benzo (b) Fluoranthène : 205-99-2	0,050	[16]	N	50,4	77,6		
Benzo (a) Pyrène : 50-32-8	0,001	[17]	N	44,6	71,7		
Benzo (k) Fluoranthène : 207-08-9	0,050	[13]	N	48,9	76		
Anthracène HAP : 120-12-7	0,001	[11]	N	27,5	54,7		
Fluoranthène : 206-44-0	0,090	[13]	N	29,1	56,3		
Naphtalène : 91-20-3	0,160	[16]	N	11,1	38,2		
HBCDD							

1,2,5,6,9,10-Hexabromocyclododecane (HBCDD) : 3194-55-6	0,010	[18]	N	67,5	94,7		
1,3,5,7,9,11-Hexabromocyclododecane (HBCDD) : 25637-99-4	0,010	[18]	N**	94,1	100		
α-HBCDD : 134237-50-6	0,010	[18]	N**	89,2	100		
β-HBCDD : 134237-51-7	0,010	[14]	N**	87,5	100		
γ-HBCDD : 134237-52-8	0,010	[14]	N**	89	100		
Mercure et ses composés	0,020	[13]	non modélisable			91	[16]
Nickel et ses composés	5,000	[13]	non modélisable			24	[12]
4-Nonylphénol	1,300	[13]	L	76,9	100		
PFOS	0,044	[11]	N	ND	ND	29	[17]
Plomb et ses composés	1,500	[13]	non modélisable			65	[12]
Trichloroéthylène	0,288	[15]	N**	0	19,7		
Trichlorométhane (chloroforme)	0,360	[13]	N**	-16,4	10,7		
Zinc	53,000	[13]	non modélisable			44	[12]
Substances de la liste 2							
17β-estradiol	0,001	[5]	R	67,7	94,9		
4-tert-butylphenol	0,070	[13]	R	28,3	55,5		
Benzo(a)anthracene	s.d	-	L(S)	39,7	66,8		
Bisphenol A	0,060	[13]	R	61	88,2		
Butylglycol (EGBE)	100,000	[19]	R(S)	36,2	63,4		
Carbamazépine	0,691	[9]	R	52,7	79,9		
Chlorure de vinyle (Chloroethylene)	1000,000	[10]	N**	0	0		
Decabromodiphényléther (BDE-209; DecaBDE)	0,130	[16]	N**	66,5	93,7		
Decahydronaphtalène	s.d	s.d	R(S)	18,5	45,6		
Diazépam	0,010	[9]	L	86,4	100		

Dibenzo(a,h)anthracene	s.d	-	N	10,2	37,3
Diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE)	304,500	[20]	R	67,7	94,9
Diisononyl phtalate (DINP)	300,000	[21]	N**	100	100
Estrone	0,007	[17]	R	74,4	100
Ethyl-parabène	0,040	[17]	R(S)	40,6	67,8
Ketoprofene	0,034	[17]	L	89,6	100
Methyl-parabene	0,065	[17]	L(S)	28,2	55,4
Ofloxacin	0,412	[17]	N**	100	100
o-Phenylphenol	0,370	[22]	R(S)	38,4	65,6
Oxazepam	0,139	[17]	R	78,8	100
Sulfamethazine	0,010	[23]	N	100	100
Tributylphosphate	0,090	[16]	N**	100	100
Triclosan	0,135	[17]	L	64,2	91,3

Note : DA = domaine d'application du modèle ; R = respecté, R(S) = respecté mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, L = substance située en proximité du domaine d'application, L(S) = substance située en proximité du domaine d'application mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, N = substance située à l'extérieur du domaine d'application, N** = substance très éloignée du domaine d'application.

s.d : sans aucune donnée ;

4.4 EVALUATION DU COUT DU TRAITEMENT TERTIAIRE

La revue de littérature réalisée a identifié plusieurs projets ayant travaillé sur les traitements tertiaires mais malheureusement les données économiques sont plus nombreuses pour d'autres traitements que la nanofiltration :

1) Hillenbrand et al. (2015) [24] présentent une revue bibliographique des coûts de traitement tertiaires notamment en Allemagne et en Suisse.

2) Des estimations des coûts en France, basées sur le projet ARMISTIQ [12], considèrent cinq procédés de traitement complémentaires (ozone seul, ozone/peroxyde, ozone/UV, peroxyde/UV et charbon actif en grain). Le projet avait pour objectif de calculer et comparer les coûts d'investissement et de fonctionnement. De cette étude, il ressort que :

- Le coût d'investissement (Capex) intègre l'ensemble de dépenses engagées avant la mise en service : coûts de base et intérêts intercalaires. Le coût de base comprend les coûts directs de construction (génie civil, équipements, montage, essais et mise en service) et les coûts indirects (terrain, frais administratifs, frais de maître d'œuvre, frais de pré-exploitation et aléas divers), qui ont été estimés entre 20% à 25% des coûts de base. Les intérêts tiennent compte de l'emprunt nécessaire et varient selon le taux d'actualisation et l'échéancier des dépenses de construction.
- Le coût de fonctionnement (Opex) englobe l'ensemble des dépenses engagées après la mise en service. Les plus importants postes de dépenses sont : réactifs, énergie, main d'œuvre, frais de maintenance, réparation, remplacement et contrôle qualité.
- Les coûts sont annualisés et amortis sur une période de 20 ans pour le génie civil et les équipements.

Pour des raisons relatives à la disponibilité des données d'abattement pour l'ensemble des substances d'intérêt nous devons travailler sur la nanofiltration. Nous ne pouvons donc pas exploiter les résultats technico-économiques de ces projets. Toutefois nous adoptons la taille de référence de STEU du projet ARMISTIQ, à savoir 200 000 EH.

Pour les coûts de la nanofiltration, nous nous sommes basés sur le document européen de référence BREF, qui recense les Meilleures Techniques Disponibles (*Best Available Techniques*), pour le traitement des eaux usées industrielles [23]. Ces données sont présentées dans le Tableau 4, ainsi que les estimations des dépenses d'investissement (Capex) et d'exploitation (Opex), réalisée par les auteurs de ce rapport.

Le BREF est un document officiel et validé au niveau européen, aussi bien par les Etats Membres que par les secteurs industriels concernés. Nous avons aussi consulté la littérature sur les coûts de la nanofiltration, et les résultats sont rassemblés dans le Tableau 5. Ils renseignent sur la variabilité du coût tout en montrant que la valeur adoptée dans le BREF est cohérente avec d'autres estimations disponibles dans d'autres contextes (eau potable, dessalement).

Les coûts d'investissement et d'exploitation sont estimés pour un projet de 20 ans de fonctionnement des STEU au taux d'actualisation de 4% (voir Tableau 4).

Tableau 4 Coût de traitement des eaux usées par nanofiltration d'après le document BREF

	Capex		Opex	
m ³ /an	36 500	3 650 000	36 500	3 650 000
k€	100	10 000		
€/m ³			0,4	0,4
Source : [23]				
Coûts Opex actualisés pour un STEU pour 20 ans à 4%				
k€			198,4	19 841,8
Coût Total Capex + Opex (20 ans de fonctionnement à 4%)				
			298,4	29 841,8
Source : Auteurs				

Tableau 5 Coût de traitement des eaux usées par nanofiltration : comparaison du BREF et d'autres sources d'information

Source	Taille de l'installation (si connue)	Coût complet (€/m ³)	Contexte
Rita Costa (2005) [24]	100 000 m ³ /j	0,2	Eau potable
Liikanen (2006) [25]	18 000 m ³ /j	0,11	Eau potable
Zhou (2015) [26]	variable	0,27 à 0,71 \$/m ³	Dessalement
BREF [23]	variable	0,4	Eaux industrielles

Nous extrapolons les coûts de nanofiltration issus du BREF pour la taille de station d'épuration retenue : STEU de 200 000 EH (2 740 m³/h traités). Le coût d'investissement et les coûts d'exploitation sont également agglomérés et estimés pour un projet de 20 ans (voir Tableau 6).

Tableau 6 Extrapolation de coût de traitement par nanofiltration selon STEU de référence ARMISTIQ pour projet de 20 ans de fonctionnement à 4%

Capacité de la STEU	m ³ /h traités	Flux annuel (m ³ /an)	Coût total de la nanofiltration (M€)
200 000 EH	2740	24 002 400	196, 24
Source : Auteurs			

Les estimations de coûts totaux de traitement seront comparées aux coûts d'opportunité de la substitution. Pour une même période d'étude de 20 ans, nous répondons dans les deux sections qui suivent à la question : combien aurait-il coûté de substituer la même quantité que les rejets abattus par la STEU ?

5. EVALUATION DE LA REDUCTION A LA SOURCE : COUT DE SUBSTITUTION

Afin d'évaluer le coût de substitution, deux données sont nécessaires pour chacun des micropolluants étudiés : les quantités à substituer et le coût unitaire de substitution. Le coût de substitution de chaque micropolluant est obtenu en multipliant ces deux données, et le coût total du scénario de substitution est ensuite calculé en additionnant les coûts pour l'ensemble des micropolluants du scénario, puis en dépréциant ce coût à 4% sur une durée de 20 ans (de la même façon que pour les coûts de traitement).

Pour les quantités éliminées en STEP, la variabilité de l'efficacité du traitement est prise en compte : une quantité minimale et une quantité maximale sont calculées, ce qui conduit à deux valeurs (min/max) des quantités à substituer et donc des coûts de substitution.

Quantités de micropolluants à substituer (Q_s)

Pour ce qui est des quantités à substituer, elles sont obtenues en divisant les quantités éliminées par le traitement tertiaire (voir Figure 5) par le coefficient d'émission représentant le ratio entre quantités émises dans l'environnement aquatique et quantités utilisées.

Le coefficient d'émission (C_e) est estimé pour chaque substance en consultant d'une part des données sur les émissions dans les milieux aquatiques, au niveau français ou au niveau européen, et d'autre part des informations sur les quantités utilisées en contexte urbain. Certaines sources bibliographiques fournissent aussi directement de tels ratios.

Les sources d'information mobilisées précisément sont indiquées dans les Tableaux qui suivent, et sont globalement les suivantes :

- Pour les émissions : Fiches Technico-économiques de l'INERIS, émissions de stations d'épuration sur le site IREP, études spécifiques.
- Pour les quantités utilisées en contexte urbain : Fiches Technico-économiques de l'INERIS, Dossiers de restrictions dans le cadre du règlement UE REACH sur la mise sur le marché de produits chimiques, études spécifiques, sites internet.
- Pour des ratios obtenus directement : Dossiers d'évaluation des risques de substances chimiques réalisés dans le cadre de la réglementation de l'UE, étude des pays scandinaves sur les scénarios d'émission de substances dans l'environnement.

Coûts unitaires de substitution (C_s)

Pour chaque micropolluant, nous avons identifié un ou des documents permettant d'estimer un coût de substitution par unité de masse substituée.

Les sources d'information mobilisées précisément sont indiquées dans les Tableaux qui suivent, et sont globalement les suivantes :

- Données économiques des dossiers de restrictions dans le cadre du règlement UE REACH sur la mise sur le marché de produits chimiques.
- Les études socio-économiques incluses dans les dossiers d'autorisation de produits chimiques dans le cadre du règlement européen REACH.
- Les fiches technico-économiques de l'INERIS.
- Autres études spécifiques.

Les Tableaux 7 et 8 présentent les quantités non émises dans l'eau et les coefficients d'émission par micropolluant pour les deux scénarios de risque (correspondant chacun aux deux listes de micropolluant). Des quantités minimales et maximales sont données, qui découlent des taux d'abattelements minimal et maximal (sauf pour les métaux pour lesquels une seule information est disponible).

Tableau 7 Quantités non émises et à substituer pour les substances du scénario de risque « actuel »
(liste 1 de micropolluants)

Micropolluant Liste 1	Quantité minimale non émise (kg/an)	Quantité maximale non émise (kg/an)	Coefficient d'émission Ce	Source Ce	Quantité minimale à substituer (kg/an)	Quantité maximale à substituer (kg/an)
Arsenic	8,28	8,28	0,0007	[26]	12 421,	12 421
Cadmium et ses composés	0,22	0,22	0,0007	[26]	324	324
Chrome	23,76	23,76	0,0023	[26], [27]	10 297	10 297
Cuivre	46,08	46,08	0,001	[26], [28]	46 084	46 084
Di(2-éthylhexyl) phtalate (DEHP)	100,81	100,81	0,03	[21]	3 360	3 360
Dichlorométhane	0	0,02	0,0003	[26]	0	68
HAP*	2,31	4,63	0,001	[29], [30]	2 047	4 102
HBCDD*	1,03	1,19	0,0005	[18]	2 051	2 375
Mercure et ses composés	0,44	0,44	0,01	[31]	44	44
Nickel et ses composés	28,8	28,8	0,001	[32]	28 803	28 803
4-Nonylphénol	24	31,2	0,84	[8]	29	37
PFOS	0,31	0,31				
Plomb et ses composés	23,40	23,40	0,00008	[31]	292 529	292 529
Trichloroéthylène	0	1,22	0,001	[26]	0	4 534
Trichlorométhane (chloroforme)	0	1,47	0,001	[26]	0	3 082
Zinc	560	560	0,00008	[31]	6 996 699	6 996 699

* Note : Pour la suite de l'analyse, nous avons groupé les substances appartenant à la famille de HAP et les isomères du HBCDD.

Tableau 8 Quantité non émises et à substituer de substances du scénario de risque « émergent »
(listes 1 et 2 de micropolluants)

Micropolluant Liste 2	Quantité minimale non émise (kg/an)	Quantité maximale non émise (kg/an)	Coefficient d'émission Ce	Source Ce	Quantité minimale à substituer (kg/an)	Quantité maximale à substituer (kg/an)
17β-estradiol	0,02	0,03	0,04	[16]	0,53	0,74
4-tert-butylphenol	0,48	0,93	0,00006	[26]	7 769	15 235
Benzo(a)anthracene	-	-	0,001	[29], [30]	-	-
Bisphenol A	0,88	1,27	0,00006	[26]	14 353	20 753
Butylglycol (EGBE)	869	1 521	0,00100	[19]	868 887	1 521 752
Carbamazepine (M)	8,74	13,25	-	-	-	-
Chlorure de vinyle (1) (Chloroethylene)	-	-	0,05	[34]	-	-
Decabromodiphenylether (BDE-209; DecaBDE)	2,08	2,92	0,0005	[18]	4 150	5 847
Decahydronaphtalene	-	-	s.d	s.d	-	-
Diazepam (M)	0,21	0,24	-	-	-	-
Dibenzo(a,h)anthracene	-	-	0,001	[29], [30]	-	-
Diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE)	4 948	6 936	0,0005	[20]	9 896 022	13 871 971
Diisononyl phtalate (DINP)	7 201	7 201	0,03	[21]	240 024	240 024
Estrone	0,13	0,17	0,04	[16]	3,13	4,20
Ethyl-parabène	0,39	0,65	0,5	[26], [35]	0,78	1,30
Ketoprofene (M)	0,73	0,82	-	-	-	-
Methyl-parabene	0,44	0,86	0,5	[26], [35]	0,88	1,73
Ofloxacine (M)	9,89	9,89	-	-	-	-
o-Phenylphenol	3,41	5,83	0,5	[26], [35]	6,82	11,65
Oxazepam (M)	2,63	3,34	-	-	-	-
Sulfamethazine (M)	0,24	0,24	-	-	-	-

Tributylphosphate	2,16	2,16	0,03	[21]	72,01	72,01
Triclosan	2,08	2,96	0,5	[36]	4,16	5,92

Les médicaments sont identifiés par la nomenclature (M).

Le Tableau 9 présente les coûts de substitution pour les deux scénarios de risque et il est à noter :

- **Ne figurent pas de données pour les médicaments** (marqués M). En effet, pour ces micropolluants, le coût de substitution a été considéré comme nul et nous n'avons pas besoin d'estimer de quantités à substituer. Nous faisons l'hypothèse, en s'appuyant sur [43] et [44], que des réductions significatives des quantités utilisées d'antibiotiques et antidépresseurs sont possibles sans coût, voire avec des bénéfices pour le système de santé publique.
- Pour le **PFOS**, de façon analogue, la substance est interdite depuis 2008, et donc le calcul d'un coût de substitution est sans objet.
- Pour le **chlorure de vinyle**, le traitement par nanofiltration est sans efficacité, et par conséquent les quantités à substituer équivalentes sont également nulles : les deux stratégies ne sont pas comparables à l'aide de ratios coût/efficacité pour ce micropolluant.
- Pour les **hormones** (estradiol et estrone), l'hypothèse est faite que 100% des quantités utilisées sont émises dans les systèmes de collecte des eaux usées, par suite le coefficient d'émission est le rendement d'élimination d'une STEP conventionnelle.
- Pour le **tributylphosphate et le DEHP**, on considère que le coefficient d'émission est identique à celui estimé pour le DINP, tous les trois étant des plastifiants et ayant donc des modalités d'utilisation similaires.

Tableau 9 Coût de substitution annuel par micropolluant

Micropolluant	Secteur d'utilisation pris comme référence	Coûts de substitution par an - C _s (€/kg)	Source C _s	Coût total de substitution par an (k€)	
				Quantité minimale	Quantité maximale
Micropolluants liste 1					
Arsenic	Métallurgie du zinc	69,09	[37]	858	858
Cadmium et ses composés	Peintures	35,90	[38]	12	12
Chrome	Cuir/ Tannerie	7,16	[26], [39]	74	74
Cuivre	Toitures	5,50	[26]	253	253
Di(2-éthylhexyl)phtalate (DEHP)	Additifs du PVC	0,42	[40]	1,42	1,42
Dichlorométhane	Colle dans les travaux, bâtiment, bricolage	1,96	[26]	0	0,13
HAP	Coût d'abattement des émissions dans l'air, et prise en compte du transfert air=> eau	47,20	[41]	97	194
HBCDD	Plastiques	4,45	[42]	9,12	10,56
Mercure et ses composés	Baromètres, manomètres, tensiomètres, y compris les thermomètres (hygromètres)	4 100 ¹⁰	[43], [44].	1,79	1,79
Nickel et ses composés	Robinetterie dans les salles de bain	0	Opinion d'expert INERIS ¹¹	-	-
4-Nonylphénol	Textiles	0,10	[45]	0,003	0,004
PFOS	Interdit depuis 2008 Déjà substitué	Sans objet	[26]	-	-
Plomb et ses composés	Articles divers	17,40	[46], [47]	5 090	5 090

¹⁰ Il s'agit pour le mercure du coût à la tonne non émise, qui était disponible dans la source consultée. Par conséquent il n'a pas été nécessaire d'utiliser de ratio d'émission pour ce micropolluant.

¹¹ Des substituts de coût inférieurs sont disponibles

Trichloroéthylène	Solvant	42,62	[48]	-	193
Trichlorométhane (chloroforme)	Intermédiaire de synthèse	0 ¹²		-	-
Zinc	Toitures	0 ¹³	[26]	-	-
Total Liste 1 (k€)				6 395	6 687

¹² Usage interdit en milieu domestique et artisanal, pas de coût de substitution en milieu urbain.

¹³ Les alternatives aux toitures en zinc ont des coûts inférieurs. Nous prenons toutefois un coût nul pour tenir compte des coûts d'installation qui pourraient les compenser.

Micropolluant	Secteur d'utilisation pris comme référence	Coûts de substitution par an - C _s (€/kg)	Source C _s	Coût total de substitution par an (k€) CT _s	
				Quantité minimale	Quantité maximale
Micropolluant Liste 2					
17β-estradiol	Hormone/Contraceptif	Non évalué	[49], [50]	-	-
			[26]		
4-tert-butylphenol	Colles	0,06		478	936
Bisphenol A	Papier thermique, tickets de caisse	0,24	[51]	3,41	4,93
Butylglycol (EGBE) ²	Peintures et vernis	0,01	[52]	8,69	15,22
Carbamazepine	Médicament	0	[49], [50]	-	-
Chlorure de vinyle ¹ (Chloroethylene)	Bâtiment, maison individuelle	1,75	Voir note au pied du tableau	-	-
Decabromodiphenylether (BDE-209; DecaBDE)	Retardateur de flamme additif dans les textiles et articles plastiques	0,50	[53]	2,07	2,92
			s.d		
Decahydronaphtalene		Non évalué		-	-
Diazepam	Médicament	0	[49], [50]	-	-
Diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE) ²	Peintures et vernis	0,01	[52]	99	139
Diisononyl phtalate (DINP)	Additifs du PVC	0,47	[40]	114	114
Estrone	Hormone/Contraceptif	Non évalué	[49], [50]	-	-
Ethyl-parabène ¹⁴	Cosmétologie	11	[54]	0,008	0,014
Ketoprofene	Médicament, anti-inflammatoire	0	[49], [50]	-	-
Methyl-parabène ³	Cosmétologie	11	[54]	0,009	0,019
Ofloxacine	Médicament	0	[49], [50]	-	-
o-Phenylphenol ³	Cosmétologie	11	[54]	0,075	0,128

¹⁴ Le diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE) et butylglycol (EGBE) sont analysés avec le même coût de substitution à cause de leur usage similaire dans les peintures et vernis.

Oxazepam	Médicament	0	[49], [50]	-	-
Sulfamethazine	Médicament	-	[49], [50]	-	-
Tributylphosphate		-	s.d	-	-
Triclosan ¹⁵	Cosmétologie	11	[54]	0,045	0,065
Total Liste 2 (k€)				228	277

¹⁵ Pour le triclosan, o-Phenylphenol, methyl-parabene, ethyl-parabène, c'est le prix de reformulation d'un ingrédient cosmétique analogue qui permet d'estimer le coût de substitution.

6. COMPARAISON ENTRE TRAITEMENT ET SUBSTITUTION

Ici nous rassemblons les résultats pour comparer les deux stratégies, résumés sur la Figure 6. Deux estimations (haute et basse) des coûts de substitution sont données, correspondant à deux hypothèses des taux d'abattement et donc de quantités de micropolluants à substituer.

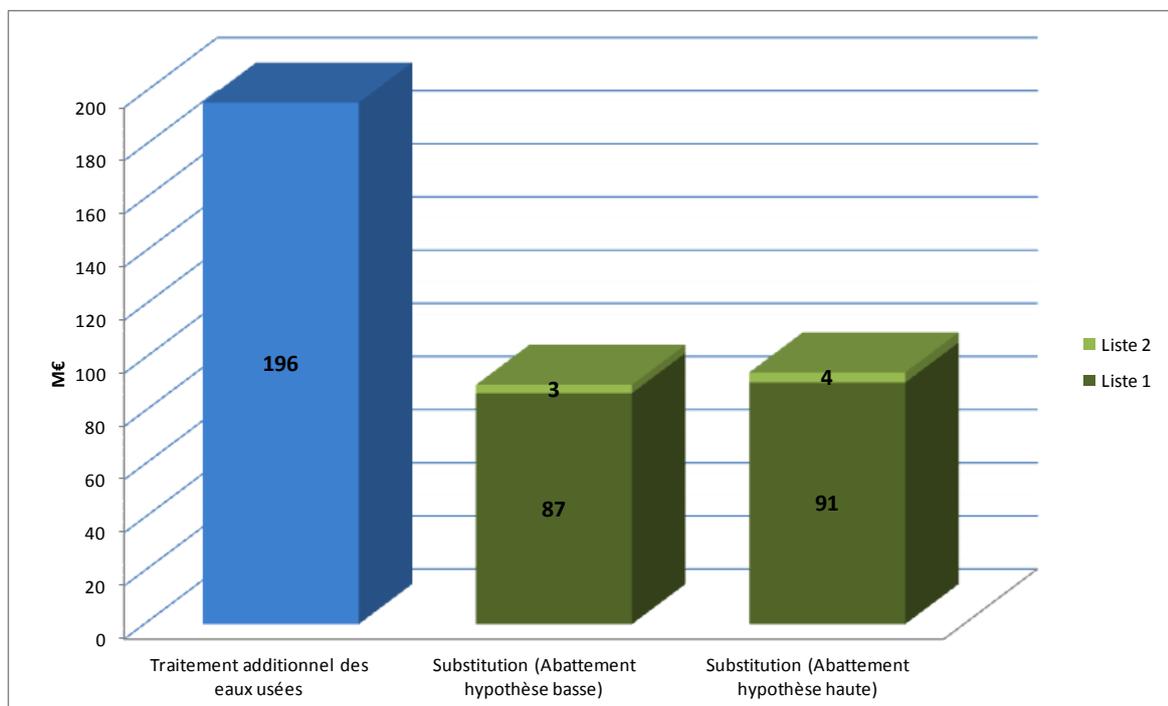


Figure 6 Comparaison des coûts de traitement tertiaire et des coûts de substitution des micropolluants (à quantités non-émises dans l'eau de surface égales, pour le cas d'une ville de 200 000 eq.hab)

Les coûts de substitution sont dominés à 90% par le plomb pour des raisons particulières. Il s'agit de la conjonction de plusieurs facteurs : un coefficient d'émission très faible dans l'environnement depuis les matériaux en place d'après la littérature consultée, des quantités importantes dans les rejets, un traitement tertiaire efficace, ce qui conduit à des quantités très importantes à substituer, et de plus le plomb est très dense donc son coût de substitution au kilo est très élevé.

Une étude plus approfondie de son cas serait utile, mais nous présentons aussi les résultats en retirant le plomb de l'analyse dans la Figure 7.

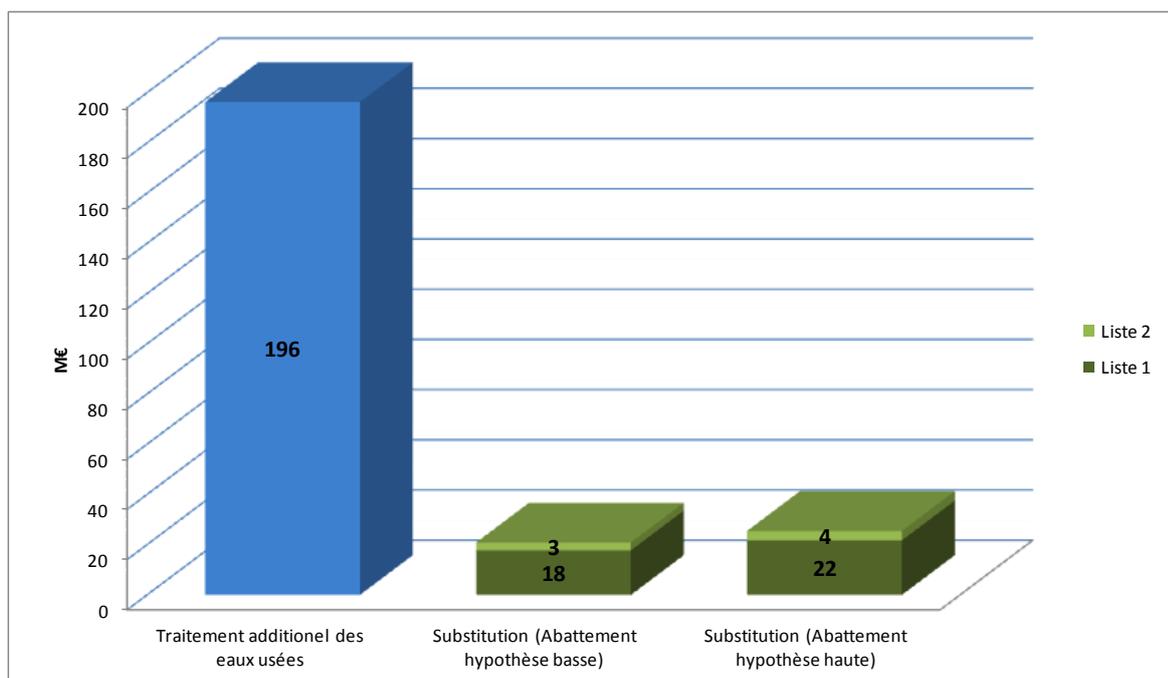


Figure 7 Comparaison des coûts de traitement tertiaire et des coûts de substitution (sans le plomb) des micropolluants (à quantités non-émises dans l'eau de surface égales, sauf pour le plomb, et pour le cas d'une ville de 200 000 eq.hab)

Ces résultats font apparaître que, même dans le cas où la liste de micropolluants est plus longue, et donc le coût de substitution plus élevé, les coûts de substitution sont inférieurs aux coûts du traitement tertiaire par nanofiltration.

On rappelle que, par construction, les quantités de micropolluants non-émises dans les cours d'eau sont égales entre le scénario traitement et chacun des deux scénarios de substitution, et qu'il s'agit donc d'une comparaison à performances environnementales égales.

La conclusion serait donc que la stratégie « préventive » de substitution à la source des émissions de micropolluants est économiquement plus efficace que leur traitement en station d'épuration. Il faut préciser que si la balance penche sur la substitution, les coûts ne sont pas supportés par les mêmes acteurs. Une augmentation du coût de traitement des eaux usées serait répercutée sur le prix de l'eau. Les coûts de substitution auraient des effets sur les prix de biens intermédiaires dans l'industrie et les produits de consommation.

On observe également que le coût de substitution des substances de la liste 1 est largement supérieur à celui des substances de la liste 2, bien qu'elles soient en plus grand nombre. Cela est largement dû à deux facteurs :

- la liste 1 comprend les métaux, dont les quantités abattues par le traitement et à substituer sont élevées, et dont le coût de substitution est également significatif ;
- la liste 2 contient un nombre important de médicaments, pour lesquels des actions de réduction à la source sans coûts de substitution semblent disponibles et mieux appropriées.

La conclusion en faveur de la substitution ne peut pas au stade d'une étude exploratoire être considérée comme fermement établie, en raison des très nombreuses incertitudes qui entourent l'ensemble des données exploitées : les performances des traitements tertiaires, les ratios entre quantités de micropolluants utilisées et émises dans les eaux, ou encore les coûts de substitution unitaires. Si l'on essaie de recenser les hypothèses et incertitudes selon qu'elles tendent à confirmer cette conclusion, ou la remettre en question, les principales à citer nous paraissent être les suivantes.

Pour les facteurs qui tendraient à infirmer ou remettre en question la conclusion :

- Le traitement de nanofiltration est moins représentatif des options réelles que l'ozonation et le charbon actif, et ces deux techniques sont vraisemblablement moins chères que la nanofiltration. Les coûts pris en considération sont également incertains et devraient être vérifiés de façon approfondie.
- Une substance comme le PFOS, interdite et n'étant plus utilisée, ne peut pas être gérée par une stratégie de substitution, alors qu'elle peut être traitée dans une station d'épuration. Ceci est également vrai d'un certain nombre de substances « historiques » émises à très faibles flux, et qui n'ont pas été intégrées dans l'étude (PBDE, PCBs,...). Toutefois le traitement en station d'épuration est plus susceptible de déplacer le problème vers les déchets de l'épuration, ces substances étant généralement persistantes.
- Nous n'avons pas pris en compte la dangerosité pour l'environnement des substituts aux micropolluants, dans le cadre de la stratégie « substitution ». Par exemple, un des substituts possibles au plomb dans les branchements en eau potable est le cuivre, lui aussi un micropolluant pris en compte dans l'étude. Clairement ces dangers ne sont pas à négliger et il s'agit d'un handicap sérieux de cette stratégie qui devrait être pris en compte.
- Certains sous-produits de traitement peuvent également être générés par les traitements tertiaires, surtout par l'ozonation; ou le traitement lui-même peut nécessiter le recours à des additifs chimiques, par exemple les additifs anticoagulants pour les membranes de nanofiltration, produits de nettoyage...).
- La nanofiltration (ou d'autres traitements tertiaires) sont susceptibles d'abattre significativement beaucoup plus de micropolluants que ceux pris en compte dans cette étude. D'après [55], le nombre de molécules qui pourraient être traitées (mais à des degrés divers et non évalués individuellement dans cette étude) serait de l'ordre de 435 substances, en étudiant le comportement de 12 substances témoin [56]. Si l'ensemble de ces substances était pris en compte, le coût du traitement ne serait pas modifié, mais celui de la substitution pourrait être augmenté très substantiellement.

Pour ce qui est des facteurs qui sont en faveur de la substitution :

- Le traitement des effluents ne procède pas toujours à une réelle élimination des micropolluants de l'environnement : soit les flux sont déplacés vers les déchets d'épuration, soit des sous-produits peuvent être créés.
- La stratégie de substitution a des co-bénéfices importants et directs en termes de santé publique, que ne présente pas la stratégie de traitement des eaux usées. Un grand nombre des micropolluants des deux listes posent des problèmes de santé publique lors de leur utilisation, qui seront également gérés par la substitution. Ces bénéfices pour la santé publique sont susceptibles d'être supérieurs aux coûts de substitution pour plusieurs micropolluants. Ce fait a notamment été démontré pour plusieurs cas de substitution de micropolluants pris en compte dans cette étude, dans les dossiers de l'ECHA que nous avons consulté : Plomb, Mercure Cadmium, DEHP, Nonyphénols. Ainsi, la prise en compte de ces co-bénéfices réduirait substantiellement les coûts nets du scénario « substitution ».
- Certains micropolluants de nos listes ne sont pas du tout abattus par les traitements tertiaires : il y a les concernant un avantage à la substitution, qui n'est pas reflété dans le bilan économique qui est présenté ici.
- La substitution est une stratégie relativement révisable et adaptable, alors que le traitement est un investissement pour lequel revenir en arrière ou modifier la stratégie semble difficile.

7. PERSPECTIVES

Cette première étude des deux approches de gestion à long terme de micropolluants développe un cadre de comparaison et présente la substitution de produits chimiques comme une alternative d'investissement face au traitement des effluents urbains. L'étude ne constitue pas, à ce stade, un outil d'aide à la décision en appui aux politiques publiques, mais elle permet d'initier la réflexion et s'inscrit dans les objectifs du nouveau plan micropolluants 2016-2021. Les nombreuses incertitudes et les hypothèses faites, les difficultés à trouver des données, font que cette étude est exploratoire et devrait être confirmée par des études plus approfondies.

Le point le plus critique serait de tenter une extrapolation de l'étude à un nombre bien plus grand de micropolluants (de l'ordre de 100 à 200), pour voir comment évoluent les coûts de substitution pour une très longue liste de micropolluants. En effet, s'il semble que le traitement ne se justifie pas pour les listes de micropolluants étudiées ici, une liste réellement très exhaustive pourrait changer la perspective. La difficulté technique d'une telle étude serait notamment de réaliser les extrapolations pour les coûts de substitution de ce grand nombre de produits chimiques.

La même étude de comparaison entre traitement et substitution devrait aussi être réalisée pour les autres techniques de traitement envisageables, pour vérifier si les conclusions obtenues pour la nanofiltration restent valables. Ces autres technologies sont vraisemblablement moins chères que la nanofiltration. Mais, comme elles sont moins performantes en termes d'abattement, les coûts de substitution à performances égales seront également plus faibles.

Il semblerait également important de passer du cas d'une seule STEU représentative d'une situation moyenne à un véritable scénario descriptif de l'ensemble du système d'épuration urbain. Il serait alors également intéressant de travailler sur une recherche de stratégie nationale optimale, qui pourrait combiner le traitement et la substitution, notamment en prenant en compte la taille des installations, comme cela a été fait en Suisse dans la stratégie Micropoll.

Il faudrait acquérir certaines données pour améliorer les résultats de ce type d'étude et aboutir à des scénarios robustes d'aide à la décision : données de concentrations en sortie de traitement conventionnel ; études de modélisation de l'abattement des traitements tertiaires (ozonation, charbon actif, etc.) ; études complémentaires de coût de substitution des substances chimiques ; études sur les coefficients d'émission dans l'environnement.

En termes plus économiques, le travail pourrait alors porter sur les conséquences économiques des scénarios en termes de modes de financement et d'impacts sur les consommateurs sur les prix de biens de consommation (dans le cas de la substitution), et sur le prix de l'eau et de l'assainissement (dans le cas du traitement).

A plus long terme, les coûts estimés et leur financement proposé pourraient être soumis à une analyse coût-bénéfice [57], en ayant au préalable effectué une enquête afin de valoriser le consentement à payer des consommateurs pour une réduction des risques associés aux substances dangereuses, différenciant les deux moyens de paiement (facture d'eau ou biens de consommation).

8. REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] A. Gouzy, C. Denize, and M. Jéhanne, "Classification des substances et programmes de mesure (PDM) Eléments d ' aide à la décision," 2014.
- [2] V. Dulio, "Propositions pour la sélection des substances de la feuille de route transition écologique (FRTE)," 2013.
- [3] F. Botta and V. Dulio, "Rapport INERIS-ONEMA: Etude sur les contaminants émergents dans les eaux françaises. Résultats de l'étude prospective 2012 sur les contaminants émergents dans les eaux de surface continentales de la Métropole et des DOM," Verneuil-en-Halatte, France, 2014.
- [4] INERIS, "RSDE Action nationale de recherche et de réduction des rejets de substances dangereuses dans les eaux." [Online]. Available: <http://www.ineris.fr/rsde/>.
- [5] B. Fribourg-Blanc, M. M. R. J., and B. Guéroux, "Etude de diagnostic des rejets de substances par l'utilisation des produits des ménages sur le bassin Seine-Normandie," 2012.
- [6] C. Abegglen and H. Siegrist, "Micropolluants dans les eaux usées urbaines," Berne, Suisse, 2012.
- [7] Ministère de l'écologie du développement durable et de l'énergie, "Arrêté du 7 août 2015 modifiant l'arrêté du 25 janvier 2010 établissant le programme de surveillance de l'état des eaux en application de l'article R. 212-22 du code de l'environnement," *Service public de la diffusion du droit*, 2015. [Online]. Available: <https://www.legifrance.gouv.fr/eli/arrete/2015/8/7/DEVL1513988A/jo/texte>. [Accessed: 28-Jun-2016].
- [8] Ministère de l'écologie du développement durable et de l'énergie, "Arrêté du 25 janvier 2010 relatif aux méthodes et critères d'évaluation de l'état écologique, de l'état chimique et du potentiel écologique des eaux de surface pris en application des articles R. 212-10, R. 212-11 et R. 212-18 du code de l'environnement," *Service public de la diffusion du droit*, 2010. [Online]. Available: <https://www.legifrance.gouv.fr/affichTexte.do?cidTexte=JORFTEXT000021865356>.
- [9] S. Besnault, S. Martin, S. Baig, H. Budzinski, K. Le Menach, M. Esperanza, N. Noyon, C. Gogot, C. Miège, L. Dherret, A. Roussel-Galle, and M. Coquery, "Réduction des micropolluants par les traitements complémentaires : procédés d ' oxydation avancée , adsorption sur charbon actif ARMISTIQ – Action A Rapport final," 2014.
- [10] Ministère de l'écologie du développement durable et de l'énergie, "Registre Français des Emissions Polluants," 2013. [Online]. Available: <http://www.irep.ecologie.gouv.fr/IREP/index.php>.
- [11] J. Margot and A. Magnet, "Elimination des micropolluants dans les eaux usées - Essais pilotes à la station d'épuration de Lausanne," *Gwa*, pp. 487–493, 2011.
- [12] S. Besnault, S. Martin-Ruel, S. Baig, B. Heiniger, M. Esperanza, H. Budzinski, C. Miège, K. Le Menach, L. Dherret, A. Roussel-Galle, and M. Coquery, "Evaluation technique, économique et environnementale de procédés de traitement complémentaire avancés pour l'élimination des micropolluants," *Tech. Sci. Méthodes*, vol. 3, pp. 67–83, 2015.
- [13] S. Binggeli, H. Diener, and S. Lindtner, "Coûts et prestations de l'assainissement," 2011.

- [14] J. Margot, "Micropollutant removal from municipal wastewater - From conventional treatments to advanced biological processes," Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2015.
- [15] V. Yangali-Quintanilla, a. Verliefde, T. U. Kim, a. Sadmani, M. Kennedy, and G. Amy, "Artificial neural network models based on QSAR for predicting rejection of neutral organic compounds by polyamide nanofiltration and reverse osmosis membranes," *J. Memb. Sci.*, vol. 342, no. 1–2, pp. 251–262, 2009.
- [16] J.-M. Choubert, S. Martin-Ruel, H. Budzinski, C. Miège, M. Esperanza, C. Soulier, C. Lagarrigue, and M. Coquery, "Evaluer les rendements des stations d'épuration. Apports méthodologiques et résultats pour les micropolluants en filières conventionnelles et avancées," *Tech. Sci. Méthodes*, vol. 1/2, pp. 44–62, 2011.
- [17] R. Mailler, "Devenir des micropolluants prioritaires et émergents dans les filières conventionnelles de traitement des eaux résiduaires urbaines (files eau et boues), et au cours du traitement tertiaire par charbon actif," University Paris-Est Ecole des Ponts, 2015.
- [18] European Union, "Risk assessment Hexabromocyclododecane," Luxembourg, 2008.
- [19] European Union, "European Union Risk Assessment Report 2-butoxyethanol," 2006.
- [20] European Union, "European Union Risk Assessment Report 2-(2-butoxyethoxy)ethanol," 2000.
- [21] European Union, "European Union Risk Assessment Report DINP," 2003.
- [22] N. Barco-Bonilla, R. Romero-González, P. Plaza-Bolaños, J. L. Martínez Vidal, and A. Garrido Frenich, "Systematic study of the contamination of wastewater treatment plant effluents by organic priority compounds in Almeria province (SE Spain)," *Sci. Total Environ.*, vol. 447, pp. 381–389, 2013.
- [23] M. J. García-Galán, M. S. Díaz-Cruz, and D. Barceló, "Occurrence of sulfonamide residues along the Ebro River basin: removal in wastewater treatment plants and environmental impact assessment.," *Environ. Int.*, vol. 37, no. 2, pp. 462–473, 2011.
- [24] T. Hillenbrand, F. Tettenborn, E. Menger-Krug, F. Marscheider-Weidemann, S. Fuchs, S. Toshovski, S. Kittlaus, S. Metzger, I. Tjoeng, P. Wermter, M. Kersting, and C. Abegglen, "Measures to reduce micropollutant emissions to water," Dessau-Roblau, 2015.
- [25] Joint Research Centre, "Best Available Techniques (BAT) Reference Document for Common Waste water and Waste Gas the Chemical Sector," 2014.
- [26] INERIS, "Fiches technico-économiques," *Portail substances chimiques*. [Online]. Available: <http://www.ineris.fr/substances/fr/page/14>. [Accessed: 16-Dec-2015].
- [27] Institute for Health and Consumer Protection, "Summary Risk Assessment Report on Chromium Compounds," 2005.
- [28] Societe Chimique de France, "Information sur le cuivre." [Online]. Available: <http://www.societechimiquedefrance.fr/extras/donnees/metaux/cu/textcu.htm>. [Accessed: 10-Dec-2015].
- [29] B. Bessagnet, "Modélisation simplifiée des dépôts de HAP avec CHIMERE: cartographie des dépôts," 2011.
- [30] J. Pacyna, "Source Control of Priority Substances in Europe Material Flow Analysis for selected Priority Substances," 2009.

- [31] Finnish Environment Institute, "Releases from the use of products," 2010.
- [32] Nickel Institute, "Le Nickel dans l'Union Européenne." [Online]. Available: http://www.nickelinstitute.org/~media/Files/MediaCenter/NiInEU/NICKEL_EUROPE_FR_FINALE.ashx?la=en. [Accessed: 10-Dec-2015].
- [33] Swedish Chemicals Agency, "Annex XV Restriction Report Proposal for a restriction NONYLPHENOL AND NONYLPHENOL ETHOXYLATE," 2012.
- [34] A. R. BERENS and C. A. DANIELS, "Prediction of Vinyl Chloride Monomer Migration from Rigid PVC Pipe," *Polym. Eng. Sci.*, vol. 16, no. 8, pp. 552–558, 1976.
- [35] ECHA, "Dossier de restriction sur les parabènes," 2015.
- [36] C. Brodie, "Persistently Clean?," *American Scientist*, 2007. [Online]. Available: <http://www.americanscientist.org/issues/pub/persistently-clean>. [Accessed: 11-Dec-2015].
- [37] ECHA, "Dossier d'autorisation de l'arsenic trioxyde II," 2015.
- [38] ECHA, "Dossier de restriction du cadmium dans les peintures d'artistes," 2013.
- [39] Danish Environmental Protection Agency, "Annex XV Report Proposal for a restriction Chromium (VI) compounds," 2012.
- [40] ECHA, "Dossier d'autorisation DEHP 2," 2014.
- [41] S. De Bruyn, M. Korteland, A. Markowska, M. Davidson, F. de Jong, M. Bles, and M. Sevenster, "Shadow Prices Handbook Valuation and weighting of emissions and environmental impacts," 2010.
- [42] ECHA, "Dossier d'autorisation HBCDD," 2014.
- [43] ECHA, "Annex XV Restriction Report Proposal for a restriction Mercury," 2010.
- [44] ECHA, "Background document to the opinions on the Annex XV dossier proposing restrictions on Mercury in measuring devices," 2011.
- [45] Swedish Chemical Agency, "Annex XV Restriction Report Proposal for a restriction Nonylphenol and Nonylphenoethoxylates in textiles," 2013.
- [46] ECHA, "Background document to the Opinion on the Annex XV dossier proposing restrictions on Lead and its compounds in articles intended for consumer use.," 2013.
- [47] Swedish Chemical Agency, "Annex XV Restriction Report Proposal for a restriction Lead and its compounds in articles intended for consumer use," 2012.
- [48] ECHA, "Dossier d'autorisation REACH Trichloroéthylène," 2014.
- [49] Agence Nationale de Sécurité du Médicament et des produits de santé, "Évolution des consommations d'antibiotiques en France entre 2000 et 2012," 2013.
- [50] Ministre des affaires sociales de la santé et des droits des femmes, "Décret n° 2014-1047 du 15 septembre 2014 relatif à l'expérimentation de la délivrance à l'unité de médicaments appartenant à la classe des antibiotiques," *Décret*, 2014. [Online]. Available: <http://www.legifrance.gouv.fr/affichTexte.do?cidTexte=JORFTEXT000029460754>. [Accessed: 16-Dec-2015].

- [51] ANSES, “Annex XV Restriction Report Proposal for a Restriction 4,4'-isopropylidenediphenol (bisphenol A; BPA),” 2014.
- [52] European Commission, “Impact Assessment Report amending Council Directive 76/769/EEC as regards restrictions on the marketing and use of certain dangerous substances and preparations 2-(2-methoxyethoxy)ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)ethanol, methylenediphenyl diisocyanate, cyclohexane,” 2007.
- [53] Norwegian Environment Agency, “Annex XV Restriction Report Proposal for a restriction Bis(pentabromophenyl) ether,” Helsinki, 2014.
- [54] ECHA, “Dossier de restriction de D4 et D5,” 2015.
- [55] C. Götz and J. Otto, “Überprüfung des Reinigungseffekts,” *Aqua Gas*, vol. 2, pp. 34–40, 2015.
- [56] M. Christa, “The first full scale advanced ozonation plant in the Dubendorf WWTP running : the new Swiss water protection act approved,” *Norman Bull.*, no. 4, pp. 36–37, 2015.
- [57] I. Logar, R. Brouwer, M. Maurer, and C. Ort, “Cost-Benefit Analysis of the Swiss National Policy on Reducing Micropollutants in Treated Wastewater,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 48, pp. 12500–12508, 2014.
- [58] Institut national de la santé et de la recherche médicale, “Méthodes d’études in silico,” in *Reproduction et environnement*, Paris, 2011, pp. 187–191.

9. LISTE DES ANNEXES

Repère	Désignation
Annexe 1	Description des substances du scénario de risque émergent
Annexe 2	Liste complète des substances examinées pour la construction du scénario de risque émergent
Annexe 3	Prédiction par modélisation QSAR du taux de rejection par nanofiltration

Annexe 1 Description des substances du scénario de risque émergent¹⁶

- 17B-ESTRADIOL

- Éléments d'identification : CAS 50-28-2 ; hormone.

Il s'agit d'une hormone féminine à la fois d'origine naturelle et présente en tant que résidu de médicaments (notamment des contraceptifs oraux de grande diffusion), L'étude prospective (Botta & Dulio, 2014) a détecté cette substance dans tous les échantillons avec un taux de quantification compris entre 0,1% et <10% et une concentration ≤ 2 ng/L. Il figure dans la nouvelle directive 2013/39/UE¹⁷ comme substance candidate dans la première liste de vigilance européenne.

- 4-TERT-BUTYLPHENOL

- Éléments d'identification : CAS 98-54-4 ; antioxydant.

Le 4-tert-butylphénol est utilisé comme monomère dans les polycarbonates, les résines phénol/formaldéhyde et les résines époxy, et comme additif dans les résines époxy. C'est donc un composé de diffusion très significative. Il est donc présent dans de nombreux produits de consommation (plastiques, adhésifs, peintures, revêtements, etc.).

L'agence européenne des produits chimiques (ECHA) a rendu en 2012 une opinion qui classait cette substance pour ses effets sur la fertilité. En cela, le 4-tert-butylphénol est susceptible d'affecter aussi bien la santé humaine que l'équilibre des populations dans les écosystèmes aquatiques.

- BENZO(A)ANTHRACENE

- Éléments d'identification : CAS 56-55-3

Il s'agit d'un HAP généralement repris dans les listes réglementaires et de surveillance en Europe et aux USA. Il est représentatif des autres HAP que ceux visés actuellement par la DCE.

- BISPHENOL A (BPA)

- Éléments d'identification : CAS 80-05-7 ; plastifiant.

Le bisphénol A (BPA) est une substance chimique de synthèse utilisée depuis plus de 50 ans. Ses deux principales utilisations sont la fabrication de plastique de type polycarbonate (ex. biberons) et celle de résines époxydes (boîtes de conserve, de canettes). Il est aussi utilisé comme composant d'autres polymères et résines (polyester, polysulfone, résines vinylisters...) et il intervient dans la synthèse de certains retardateurs de flamme et comme révélateur dans les papiers thermiques (tickets de caisse). Identifié comme perturbateur endocrinien, le bisphénol A a été interdit en 2010 en France dans la fabrication des biberons pour nourrissons. Son utilisation dans les contenants alimentaires sera interdite en France en 2015, et celle dans les tickets de caisse est en cours de discussion au niveau européen (www.ineris.fr/substitution-bpa).

- BUTYLGLYCOL (EGBE)

- Éléments d'identification : CAS 111-76-2 ;

Il s'agit d'un éther de glycol largement utilisé dans le domaine des peintures et des revêtements, avec des applications grand public¹⁸.

¹⁶ Pour les substances du scénario de risque actuel, on pourra se reporter à (Gouzy, 2014) pour des éléments sur ces substances.

¹⁷ Directive 2013/39/UE du 12 août 2013 modifiant les directives 2000/60/CE et 2008/1105/CE sur la définition de la nouvelle liste de substances prioritaires au niveau communautaire de la Directive Cadre Eau

¹⁸ Gouzy, 2012, « Principaux usages et possibilité de mesures de gestion des risques pour certains perturbateurs endocriniens avérés ou suspectés », Rapport INERIS DRC-12-115721-01528A.

- CARBAMAZEPINE

- Éléments d'identification : CAS 298-46-4 ; médicament, anti-convulsif.

Botta et Dulio (2014) signalent la carbamazépine comme la substance la plus quantifiée (72% d'analyses), ce qui s'explique par le haut niveau de consommation de ce médicament et par le faible taux d'élimination (<10%) dans les STEP. La carbamazépine a été quantifiée sur plus de 10% des analyses dans le cadre de la campagne exceptionnelle 2011 dans les eaux souterraines de l'étude de prospective. La présence de cette substance dans les eaux souterraines est référencée par plusieurs réseaux étrangers (résultats issus des réseaux NAQUA en Suisse, NAWQA aux USA, Baden-Württemberg en Allemagne et JRC pour l'Europe). Dans l'étude de l'ANSES (2011), la carbamazépine est fréquemment observée à la fois dans les eaux brutes et dans les traitées destinées à la consommation humaine. Cette substance est aussi un perturbateur endocrinien suspecté.

- CHLORURE DE VINYLE (CLOROETHYLENE)

- Éléments d'identification : CAS 75-01-4 ; gaz, extrêmement inflammable.

Il s'agit du monomère du PVC, émise potentiellement lors de la production, la transformation ou l'emploi de PVC. La Directive 93/72/CEE1 considère que le chlorure de vinyle toxique et cancérigène catégorie 1 (R453). En revanche, il n'est pas classé comme substance dangereuse pour l'environnement (Euro Chlor, 2001 ; INRS, 2002). Le chlorure de vinyle est également listé dans la Directive 76/464/CEE (transposée en législation française par l'arrêté du 2 février 1998) comme substance toxique ou néfaste à long terme pour l'environnement aquatique.

- DECA-BROMODIPHENYLETHER (BDE-209)

- Éléments d'identification : CAS 1163-19-5 ; produit industriel.

Le DecaBDE a été enregistré dans le cadre de REACH en août 2010. En Europe, il est encore largement utilisé comme retardateur de flamme dans le secteur du textile et des plastiques, entre autres pour les meubles rembourrés et les moyens de transport. Cette substance a été quantifiée sur 64% des analyses dans les sédiments, sur 100% des bassins dans l'étude prospective.

- DECAHYDRONAPHTALENE

- Éléments d'identification : CAS 91-17-8 ; produit industriel.

Cette substance est utilisée comme solvant dans des huiles, des cires, des carburants. Par exemple, elle peut être présente dans des cirages domestiques. Elle a été classée omniprésente selon l'étude prospective (Botta et Dulio (2014), c'est-à-dire, elle est retrouvée dans tous les bassins versants.

- DIAZEPAM

- Éléments d'identification : CAS 439-14-5 ; médicament.

Le diazépam est un médicament de la famille des benzodiazépines. Il est utilisé pour ses propriétés anxiolytiques et anti-convulsivantes. Le diazépam a été commercialisé sous la marque Valium et il est encore aujourd'hui un tranquillisant largement utilisé.

Les résultats de l'étude prospective montrent que ce médicament a été quantifié lors des trois campagnes avec un taux de quantification compris entre 0,1% et <10%. Le diazépam a été également quantifié dans les sédiments lors d'une étude conduite par le BRGM dans le bassin de l'agence de l'eau Loire-Bretagne (2008).

- DIBENZO(A,H)ANTHRACENE

- Éléments d'identification : CAS 53-70-3 ;

Il s'agit d'un HAP généralement repris dans les listes réglementaires et de surveillance en Europe et aux USA. Il est représentatif des autres HAP que ceux visés actuellement par la DCE.

- DIETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER (DEGBE)

- Éléments d'identification : CAS 112-34-5 ;

Il s'agit d'un éther de glycol largement utilisé dans le domaine des peintures et des revêtements, avec des applications grand public¹⁹.

- DIISONONYL PHTHALATE (DINP)

- Éléments d'identification : CAS 28553-12-0 ;

Cette substance a un dépassement significatif du seuil de concentration de 0,1 µg/L, identifié dans l'étude prospective comme seuil de préoccupation, particulièrement tous les phtalates. C'est le principal représentant de la famille des phtalates sur le marché, notamment du fait de la décroissance des usages du DEHP qui est en cours de substitution par l'industrie sous la pression réglementaire exercée par REACH.

- ESTRONE

- Éléments d'identification : CAS 53-16-7

L'estrone est souvent quantifié dans le milieu aquatique en raison de la conversion partielle du 17β-estradiol (ainsi que d'autres hormones estrogènes) en estrone. L'étude prospective l'a identifiée avec un taux de quantification compris entre 0,1% et <10% et elle a été retrouvée dans toutes les stations de référence.

- ETHYL-PARABENE

- Éléments d'identification : CAS 120-47-8 ; produit de soin corporels.

Il s'agit d'un représentant principal de la famille des parabènes, qui sont des conservateurs très employés notamment dans les cosmétiques. Les fréquences de quantification observées dans l'étude prospective sont proches de 100% pour cette substance dans les cours d'eau et dans les plans d'eau avec l'éthyl-parabène en tête de liste pour les produits de soin corporels.

- KETOPROFENE

- Éléments d'identification : CAS 22071-15-4 ; anti-inflammatoire.

Le ketoprofène appartient à la classe des médicaments appelés anti-inflammatoires non stéroïdiens (AINS). Il est utilisé également comme médicament vétérinaire. Cette substance est quantifiée à plus de 50% des échantillons dans l'étude prospective. Il a été identifié sur 100% des bassins investigués dans l'étude prospective à des niveaux de concentration supérieures à 0,1 µg/L, sur environ 4% des analyses. Il a été également quantifié dans les eaux souterraines (0,84% des analyses, à des niveaux de concentration supérieurs à 0,1 µg/L sur environ 0,1% des échantillons).

- METHYL-PARABENE

- Éléments d'identification : CAS 99-76-3 ; produit de soin corporels.

Le méthyl-parabène est très utilisé parmi les différents parabènes. Les tonnages de production déclarés par l'industrie pour ces composés (Portail de l'ECHA – REACH, <http://echa.europa.eu/fr/information-on-chemicals/registered-substances>) montrent des volumes de production en Europe compris entre 1000 et 10000 t/an.

¹⁹ Gouzy, 2012, « Principaux usages et possibilité de mesures de gestion des risques pour certains perturbateurs endocriniens avérés ou suspectés », Rapport INERIS DRC-12-115721-01528A.

- OFLOXACINE

- Eléments d'identification : CAS 82419-36-1 ; médicament, antibiotique.

Ce médicament est un antibiotique à large spectre. Les résultats de l'étude prospective montrent cette substance dans la liste des 10 substances avec les valeurs les plus élevées du percentile 95 dans les cours d'eau.

- O-PHENYLPHENOL

- Eléments d'identification : CAS 90-43-7 ; biocide.

Ce composé est un biocide utilisé comme additif alimentaire, comme désinfectant dans de nombreux secteurs (domestique, services hospitaliers, commerces, ...).

- OXAZEPAM

- Eléments d'identification : CAS 604-75-1 ; médicament.

L'oxazepam constitue à la fois une molécule mère et un métabolite de la famille des benzodiazépines. L'étude prospective remarque la présence de cette substance en cohérence avec les données de consommation des médicaments en France récoltées en 2005 lors d'une étude de l'IRSTEA. L'oxazepam avait été fréquemment retrouvé dans les eaux traitées lors de l'étude de l'ANSES (2011).

- SULFAMETHAZINE

- Eléments d'identification : CAS 57-68-1 ; médicament, antibiotique.

La sulfaméthazine est utilisée en élevage comme antibiotique et promoteur de croissance. Ce médicament a été retrouvé dans le cadre de l'étude prospective avec une fréquence de quantification dans les eaux souterraines supérieure à celle des eaux de surface.

- TRIBUTYLPHOSPHATE

- Eléments d'identification : CAS 126-73-8.

Ce composé est largement utilisé comme retardateur de flamme, ou comme plastifiant dans des résines vinyliques et cellulosiques, et comme solvant industriel.

- TRICLOSAN

- Eléments d'identification : CAS 3380-34-5 ; biocide.

Le triclosan est utilisé comme agent de conservation dans la formulation de savons, déodorants, dentifrices, literie, sacs poubelle, etc.

Le triclosan a été quantifié sur 40% des analyses dans l'étude prospective. Le triclosan est aussi plus fréquemment quantifié dans les eaux souterraines que dans les eaux de surface.

Le triclosan (fongicide et bactéricide) est parmi les substances pour lesquelles l'étude prospective observe la plus forte fréquence de dépassement de la PNEC.

Annexe 2 Liste complète des substances examinées pour la construction du scénario de risque émergent

Substance	N° CAS	Substance sélectionnée scénario de risque émergent	Etude considérée	Usage principal identifié	Réglementation identifiée	Fiche technico-économique INERIS	Fiche de données toxicologiques et environnementales	Fiche seuils de toxicité aiguë	Stratégie Suisse "Micropoll"
1	1,2,3,5 tetrachlorobenzene	-	RSDE - STEU		OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
2	1,1,1 Trichloroethane	-	RSDE - STEU		SIDS	oui	-	-	-
3	1,2 dichloroethylene	-	RSDE - STEU		sans information	-	oui	-	-
4	1,2,3,4,6,7,8-Heptachlorodibenzodioxine	-	FRTE		sans information	-	-	-	-
5	1,2,4,5 tetrachlorobenzene	-	RSDE - STEU		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	-
6	1,3,5-Benzenetriol	-	Etude prospective	produits industriels/médicaments	sans information	-	-	-	-
7	1,3-dichlorobenzene	-	AESN, RSDE-STEU		Circulaire DEB du 29 septembre 2010 (RSDE 2ème phase STEU)	oui	-	-	-
8	17β-estradiol	oui	Etude prospective	médicaments	OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	bêta-Estradiol
9	1-Methoxy-2-propanol	-	AESN		SIAR published	-	-	-	-
10	2 chlorophenol	-	RSDE - STEU		Arrêté du 17 juillet 2009 relatif aux mesures de prévention ou de limitation des introductions de polluants dans les eaux souterraines	-	-	-	-
11	2,3,5,6 Tetrachlorophenol	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
12	2,4-MCPA	-	Programme par bassin versant (CEP)	pesticides	Arrêté du 25 janvier 2010 - polluants spécifiques de l'état écologique	-	-	-	MCPA

13	2,4-D	94-75-7	-	Programme par bassin versant (CEP)	pesticides	Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	oui
14	2,4-Dichloroaniline	554-00-7	-	RSDE - STEU		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	-
15	2,4-Dichlorophenol	120-83-2	-	RSDE - STEU		Circulaire 5 janvier 2009 (RSDE 2ème phase ICPE)	-	oui	-	-
16	2,6-bis(1,1-diméthylethyl)-4-méthylphenol	128-37-0	-	AESN		SIAR published	-	-	-	-
17	2-chloroaniline	95-51-2	-	AESN		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	-
18	2-Propanol	67-63-0	-	AESN		SIAR published	-	-	-	-
19	3,4-Dichloroaniline	95-76-1	-	FRTE, Etude prospective	produits industriels	SIDS	-	oui	-	-
20	3-chloroaniline	108-42-9	-	AESN		Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
21	3-chlorotoluene	108-41-8	-	AESN		Circulaire DEB du 29 septembre 2010 (RSDE 2ème phase STEU)	-	-	-	-
22	4-(1,1,3,3-tetraméthylbutyl)phenol diethoxylate	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
23	4-(1,1,3,3-tetraméthylbutyl)phenol monoethoxylate	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
24	4-chloro-3-méthylphenol	59-50-7	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 17 juillet 2009 relatif aux mesures de prévention ou de limitation des introductions de polluants dans les eaux souterraines	-	-	-	-
25	4-chlorophenol	106-48-9	-	AESN		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	-
26	4-Méthylbenzylidene camphor	36861-47-9	-	Etude prospective	produits de soin corporels	OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
27	4-tert-butylphenol	98-54-4	oui	RSDE - STEU, FRTE	antioxydant	Circulaire DEB du 29 septembre 2010 (RSDE 2ème phase STEU)	oui	-	-	-

28	Acenaphtene	83-32-9	-	FRTE		Directive 76/464/CEE	-	oui	-	-
29	Acetazolamide	59-66-5	-	Etude prospective	médicaments	sans information	-	-	-	-
30	Acetochlore	34256-82-1	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
31	Acide 2 ethyl-hexanoïque	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
32	Acide niflumique	4394-00-7	-	Etude prospective	médicaments	OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
33	Acide perfluoro-decanoïque	335-76-2	-	Etude prospective		sans information	-	-	-	-
34	Acide perfluoro-n-undecanoïque	2058-94-8	-	Etude prospective		sans information	-	-	-	-
35	Acrylamide	79-06-1	-	AESN		Arrêté du 17 juillet 2009 relatif aux mesures de prévention ou de limitation des introductions de polluants dans les eaux souterraines	-	-	-	-
36	alpha Hexachlorocyclohexane	319-84-6	-	RSDE - STEU		Circulaire 5 janvier 2009 (RSDE 2ème phase ICPE)	oui	-	-	-
37	Aluminium	7429-90-5	-	RSDE - STEU		Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	oui	-	-
38	Aminotriazole	61-82-5	-	Programme par bassin versant	pesticides	Pesticides prioritaires	-	-	-	oui
39	AMPA	118896-96-1	-	FRTE	pesticides	sans information	-	-	-	oui
40	Aniline	62-53-3	-	RSDE - STEU		Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	-	-	oui
41	Anthracene	120-12-7	-	RSDE - STEU		Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	oui	oui	-	-
42	Antimoine	7647-18-9	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
43	Azoxystrobine	-	-	Programme par bassin versant	pesticides	sans information	-	-	-	-

44	Bentazone	25057-89-0	-	Programme par bassin versant	pesticides	Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
45	Benzo(a)anthracene	56-55-3	oui	FRTE		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	-
46	Benzophenone	119-61-9	-	AESN		sans information	-	-	-	-
47	Benzylbutylphthalate (BBP)	85-68-7	-	FRTE		OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
48	Biphenyle	-	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)		sans information	-	-	-	-
49	Bisphenol A	80-05-7	oui	Etude prospective	plastifiants	candidates DCE directive 2008/105/CE - Annexe III : substances candidates annexe X DCE	oui	-	-	oui
50	Boscalid	188425-85-6	-	Programme par bassin versant	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
51	Butyl benzyl phtalate	85-68-7	-	Etude prospective	plastifiants	OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
52	Butylglycol (EGBE)	111-76-2	oui	AESN		règl. CE/793/93 (liste 4)	-	-	-	-
53	C10-C13-Chloroalcanes	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
54	Carbamazepine	298-46-4	oui	Etude prospective	médicaments, antiépileptique	sans information	-	-	-	oui
55	Carbaryl	63-25-2	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
56	Carbendazime	10605-21-7	-	Etude prospective	biocide	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	oui
57	Carbofuran	1563-66-2	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-

58	Carbomere	-	-	AESN		sans information	-	-	-	-
59	Chlordane	57-74-9	-	RSDE - STEU		Convention de Stockholm : polluants organiques persistants (POP)	-	oui	-	-
60	Chloridazone	1698-60-8	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	oui
61	Chlorobenzene	108-90-7	-	RSDE - STEU	pesticides	Directive 76/464/CEE	oui	oui	-	-
62	Chlorprophame	101-21-3	-	Programme par bassin versant	pesticides	Arrêté du 12 novembre 2009 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
63	Chlorpyriphos-methyl	5598-13-0	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
64	Chlortoluron	15545-48-9	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)	pesticides	Pesticides prioritaires	-	-	-	oui
65	Chlorure de vinyle (Chloroethylene)	75-01-4	oui	RSDE - STEU	gaz, extrêmement inflammable	Directive 76/464/CEE	oui	oui	oui	-
66	Cobalt	7440-48-4	-	RSDE - STEU		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	oui	-	-
67	Colecalciferol	511-28-4	-	AESN		sans information	-	-	-	-
68	Cyanide	-	-	FRTE		sans information	-	-	-	-
69	Cyanures	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
70	Cyclophosphamide	50-18-0	-	Etude prospective	medicaments	sans information	-	-	-	-
71	Cyprodinil	121552-61-2	-	Programme par bassin versant	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
72	Decabromodiphenylether (BDE-209)	1163-19-5	oui	RSDE - STEU	produits industriels	Circulaire 5 janvier 2009 (RSDE 2ème phase ICPE)	oui	-	-	-
73	Decahydronaphtalene	91-17-8	oui	Etude prospective	produits industriels	sans information	-	-	-	-

74	Deisopropyl-desethyl-atrazine	-	-	FRTE	pesticides	sans information	-	-	-	Atrazine et Atrazine-desethyl
						Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)				
75	Deltamethrine	52918-63-5	-	Etude prospective	pesticides		-	-	-	-
76	Desmetryne	1014-69-3	-	RSDE - STEU	pesticides	sans information	-	-	-	-
77	Dextropropoxyphene	469-62-5	-	Etude prospective	médicaments	sans information	-	-	-	-
78	Diazepam	439-14-5	oui	Etude prospective	médicaments	sans information	-	-	-	oui
79	Dibenzo(a,h)anthracene	53-70-3	oui	FRTE		PNSE 2 - action 5	-	oui	-	-
						OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)				
80	Dibenzothiophene	132-65-0	-	Etude prospective			-	-	-	-
81	Dibutyletain	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
82	Dichloroethane	1300-21-6	-	RSDE - STEU	pesticides	sans information	-	-	-	-
83	Diethyl phtalate	84-66-2	-	FRTE, Etude prospective	plastifiants	sans information	-	-	-	oui
84	Diethylene glycol monobutyl ether (DEGBE)	112-34-5	oui	AESN		règl. CE/793/93 (liste 1)	-	-	-	-
						OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)				
85	Diethylstilbestrol	56-53-1	-	Etude prospective	médicaments		-	-	-	-
						Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)				
86	Diflufenicanil	83164-33-4	-	Programme par bassin versant	pesticides		-	-	-	-
						OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)				
87	Diisobutyl phthalate	84-69-5	-	Etude prospective	plastifiants		-	-	-	-
88	Diisononyl phtalate (DINR)	28553-12-0	oui	FRTE		SIDS	oui	-	-	-
89	Di-n-butylphthalate (DBP)	84-74-2	-	FRTE		SIDS	-	-	-	-
90	Dioxyde de Titane	-	-	AESN		sans information	-	-	-	-
91	EDTA	60-00-4	-	AESN, RSDE-STEU	pesticides	règl. CE/793/93 (liste 1)	oui	-	-	-
						OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)				
92	Estrone	53-16-7	oui	Etude prospective	medicaments, hormone œstrogène		-	-	-	oui

93	Etain	7646-78-8	-	RSDE - STEU		SIDS	-	-	-	-
94	Ethyl Hexyl Phtalate	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
95	Ethylbenzene	100-41-4	-	AESN, RSDE-STEU		SIDS	oui	oui	-	-
96	Ethyl-parabene	120-47-8	oui	FRTE, Etude prospective	produits de soin corporels	sans information	-	-	-	-
97	Fenarimol	60168-88-9	-	Etude prospective	pesticides	Pesticides prioritaires	-	-	-	oui
98	Fenthion	55-38-9	-	Etude prospective	pesticides	Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
99	Fer	7439-89-6	-	RSDE - STEU		Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	-	-	-
100	Fluor	7782-41-4	-	RSDE - STEU		Arrêté du 17 juillet 2009 relatif aux mesures de prévention ou de limitation des introductions de polluants dans les eaux souterraines	-	-	-	-
101	Flusilazole	85509-19-9	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
102	Formaldehyde	50-00-0	-	AESN	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	oui	oui	-
103	Glyphosate	1071-83-6	-	Programme par bassin versant, RSDE-STEU	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	oui	-	-	-
104	Heptabromodiphenylether (BDE 183)	68928-80-3	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
105	Hexabromobiphenyle	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
106	Hexabromodiphenylether (BDE 153)	67774-32-7	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
107	Hexabromodiphenylether (BDE 154)	207122-15-4	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
108	Hexachlorobutabiene	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-

109	Hydrazine	302-01-2	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	-	oui	-
110	Hydroquinone	123-31-9	-	AESN	pesticides	SIDS	-	-	-	-
111	Imidaclopride	-	-	Programme par bassin versant	pesticides	sans information	-	-	-	-
112	Indeno (1,2,3-cd) Pyrene	193-39-5	-	RSDE - STEU		Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	oui	oui	-	-
113	Iprodione	36734-19-7	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
114	Irganox 1076	2082-79-3	-	Etude prospective	antioxydants	sans information	-	-	-	-
115	Isopropylbenzene	98-82-8	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)		SIDS	-	-	-	-
116	Ketoprofene	22071-15-4	oui	Etude prospective	médicaments	sans information	-	-	-	oui
117	Lindane	58-89-9	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	oui	oui	-	-
118	Lithium	816-43-3	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
119	Lorazepam	846-49-1	-	Etude prospective	médicaments	sans information	-	-	-	-
120	Malathion	121-75-5	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
121	Manganese	7439-96-5	-	RSDE - STEU		Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	oui	-	-
122	Metaldehyde	-	-	Programme par bassin versant	pesticides	sans information	-	-	-	-
123	Metazachlore	67129-08-2	-	Programme par bassin versant	pesticides	Arrêté du 12 novembre 2009 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-

124	Methanol	67-56-1	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)	pesticides	Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	-	oui	-
125	Methomyl	16752-77-5	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 07 décembre 2007 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
126	Methoxychlor	72-43-5	-	FRTE	pesticides	OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
127	Methyl-parabene	99-76-3	oui	Etude prospective	produits de soin corporels	sans information	-	-	-	-
128	Metolachlore ESA	171118-09-5	-	Etude prospective	pesticides	sans information	-	-	-	Metolachlore
129	Metolachlore OXA	152019-73-3	-	Etude prospective	pesticides	sans information	-	-	-	Metolachlore
130	Monobutyletain cation	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
131	Monocrotophos	6923-22-4	-	Etude prospective	pesticides	sans information	-	-	-	-
132	Musc xylene	-	-	AESN, RSDE- STEU		sans information	-	-	-	-
133	Naphtalene	91-20-3	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)		règl. CE/793/93 (liste 1)	oui	oui	-	-
134	Naphtha, petroleum, alkylate lourd	-	-	AESN		sans information	-	-	-	-
135	n-Butyl Phtalate	84-74-2	-	Etude prospective	plastifiants	SIDS	-	-	-	-
136	Nicosulfuron	111991-09-4	-	Programme par bassin versant	pesticides	Arrêté du 12 novembre 2009 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
137	Norethindrone	68-22-4	-	Etude prospective	médicaments	sans information	-	-	-	-
138	o,p'-DDE	3424-82-6	-	FRTE		Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	oui	-	-	-
139	Octabromodiphenylether	32536-52-0	-	FRTE		SIDS	oui	-	-	-
140	Octachlorodibenzofuranne	-	-	FRTE		sans information	-	-	-	-

141	Octamethylcydotetrasiloxane	-	-	AESN		sans information	-	-	-	-
142	Octylphenol	27193-28-8	-	FRTE		SIDS	-	-	-	Tert-octylphenol
143	Ofloxacine	82419-36-1	oui	Etude prospective	médicaments, antibiotique	sans information	-	-	-	oui
144	Omethoate	1113-02-6	-	Etude prospective	pesticides	Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
145	o-Phenylphenol	90-43-7	oui	AESN	alimentation, agriculture, biocide	Arrêté du 12 novembre 2009 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
146	Oxadiazon	19666-30-9	-	Programme par bassin versant	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
147	Oxazepam	604-75-1	oui	Etude prospective	médicaments, antibiotique	sans information	-	-	-	oui
148	p,p'-DDD	72-54-8	-	FRTE		Arrêté du 25 janvier 2010 - Annexe 8 : état chimique	oui	-	-	-
149	p-Aminophenol	123-30-8	-	AESN		SIDS	-	-	-	-
150	Parathion ethyl	56-38-2	-	Etude prospective	pesticides	Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
151	Parathion methyl	298-00-0	-	Etude prospective	pesticides	Pesticides prioritaires	-	-	-	-
152	PCB	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	PCB-dl
153	Pendimethaline	40487-42-1	-	Programme par bassin versant	pesticides	Pesticides prioritaires	-	-	-	oui
154	Pentabromodiphenylether	32534-81-9	-	RSDE - STEU		Arrêté du 17 juillet 2009 relatif aux mesures de prévention ou de limitation des introductions de polluants dans les eaux souterraines	oui	-	-	-
155	Phenyl-etain	2406-68-0	-	Etude prospective	produits industriels	sans information	-	-	-	-
156	Phosphate de tributyle	126-73-8	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)		Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
157	Phoxime	14816-18-3	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	-	-	-	-
158	Piperonyl butoxyde	51-03-6	-	Etude prospective	pesticides	sans information	-	-	-	-

159	Plomb diethyl	24952-65-6	-	Etude prospective	additifs d'essence	sans information	-	-	-	-
160	Plomb triethyl	5224-23-7	-	Etude prospective	additifs d'essence	sans information	-	-	-	-
161	Polyethylene	9002-88-4	-	AESN		sans information	-	-	-	-
162	Polyvinyl alcool	-	-	AESN		sans information	-	-	-	-
163	Polyvinylpyrrolidone	9003-39-8	-	AESN		sans information	-	-	-	-
164	p-Phenylenediamine	106-50-3	-	AESN		SIDS	-	-	-	-
165	Prochloraz	67747-09-5	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 12 novembre 2009 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
166	Propyl-parabene	94-13-3	-	Etude prospective	produits de soin corporels	sans information	-	-	-	-
167	Quizalofop	76578-12-6	-	Etude prospective	pesticides	sans information	-	-	-	-
168	Sodium tetraborate anhydre	-	-	AESN		sans information	-	-	-	-
169	Spiroxamine	118134-30-8	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
170	Sulfamethazine	57-68-1	oui	Etude prospective	médicaments, antibiotique	sans information	-	-	-	oui
171	Sulfamethoxazole	723-46-6	-	Etude prospective	médicaments, antibiotique	sans information	-	-	-	oui
172	Sulfonate de perfluorooctane	-	-	Substances RSDE - STEU (sans DCE)		sans information	-	-	-	-
173	Tebuconazole	80443-41-0	-	Programme par bassin versant	pesticides	sans information	-	-	-	-
174	Tebufenozide	112410-23-8	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 06 novembre 2008 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
175	Tetrabromodiphenylether (BDE 47)	5436-43-1	-	RSDE - STEU		Circulaire 5 janvier 2009 (RSDE 2ème phase ICPE)	-	-	-	-
176	Tetrachlorethene (perchloroethylene)	127-18-4	-	AESN, RSDE-STEU		Arrêté du 25 janvier 2010 - Annexe 8 : état chimique	oui	oui	-	-

177	Titane	7550-45-0	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
178	Toluene	108-88-3	-	Programme par bassin versant, AESN, RSDE-STEU		règl. CE/793/93 (liste 2)	oui	oui	-	-
179	Toxaphene	8001-35-2	-	RSDE - STEU	pesticides	Arrêté du 31 janvier 2008 - Annexe II : polluants avec seuil de rejet dans l'eau	-	-	-	-
180	Triadimenol	55219-65-3	-	Etude prospective	pesticides	sans information	-	-	-	-
181	Tributylphosphate	126-73-8	oui	RSDE - STEU		Directive 76/464/CEE	-	-	-	-
182	Trichlorobenzene	108-70-3	-	RSDE - STEU		OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	oui	oui	-	-
183	Trichlorophenol	136-32-3	-	AESN		sans information	-	-	-	-
184	Triclocarban	101-20-2	-	AESN	biocide	OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	-	-	-	-
185	Triclosan	3380-34-5	oui	Etude prospective	produits de soin corporels, biocide.	sans information	-	-	-	oui
186	Triethanolamine	102-71-6	-	AESN		SIDS	-	-	-	-
187	Trifloxystrobine	141517-21-7	-	Etude prospective	pesticides	Arrêté du 12 novembre 2009 (substances soumises à redevance pour pollutions diffuses)	-	-	-	-
188	Triphenyletain cation	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
189	Vanadium	-	-	RSDE - STEU		sans information	-	-	-	-
190	Xylenes	1330-20-7	-	Programme par bassin versant, AESN, RSDE-STEU		Arrêté du 30 juin 2005 (PNAR) - substances pertinentes	oui	oui	-	-

Nomenclature de l'étude considérée

Etudes de référence

Etude prospective

Etude sur les contaminants émergents dans les eaux françaises (INERIS, 2014).

RSDE-STEU

Base de données INERIS.

Programme par bassin versant

Comité Experts Priorisation (CEP).

FRTE

Propositions pour la sélection des substances de la feuille de route transition écologique (INERIS, 2013).

AESN

Etude de diagnostic des rejets de substances par l'utilisation des produits des ménages sur le bassin Seine-Normandie (Office International de l'Eau, 2012).

Annexe 3 Prédiction par modélisation QSAR du taux de rejection par nanofiltration

Yangali-Quintanilla, et al. (2010) ont proposé un modèle linéaire (équation 1) qui prédit le taux de réjection par nanofiltration en fonction de cinq propriétés physicochimiques : la longueur d'une molécule (length), sa profondeur (depth) sa largeur équivalente (moyenne géométrique entre la largeur et la profondeur), le coefficient de distribution entre l'1-octanol et l'eau à pH 7.0 (Log D) et le taux de rejection saline de la membrane (SR) :

$$\begin{aligned} rejection &= 265.150 eqwidth - 117.536 depth + 81.662 length \\ &\quad - 5.229 \log D + 1358.090 SR - 1447.817 \quad (1) \\ (R^2 &= 0.74, F = 60.21, n = 106, Q^2_{loo} = 0.72, RMSE = 10) \end{aligned}$$

$$rejection = \begin{cases} 100 & \text{si la prédiction QSAR} \geq 100 \\ & \text{ou} \\ 0 & \text{si la prédiction QSAR} < 0 \\ & \text{ou} \\ \text{prédiction QSAR} & \text{pour toutes les autres valeurs} \end{cases}$$

Ce modèle peut être reproduit sur la base de l'information disponible dans l'article et il est caractérisé par les indicateurs statistique suivants : $R^2 = 0.74$, $F = 60.21$, $n = 106$, $Q^2_{loo} = 0.72$, $RMSE = 10$ points de pourcentage. Où : R^2 = coefficient de détermination, F = ratio du test de Fisher, n = nombre de valeurs de taux de rejection, Q^2_{loo} = coefficient de détermination par validation croisée « leave one out » et $RMSE$ = racine de l'erreur quadratique moyenne.

Dans le cadre de cette étude les dimensions moléculaires ont été calculées grâce au même logiciel adopté par les auteurs du modèle (MMPlus, ChemSW) après avoir optimisée la géométrie des molécules en fonction d'une minimisation de l'énergie des angles dièdres (recherche conformationnelle, logiciel VEGA ZZ²⁰), d'une minimisation globale de la molécule (Champ des forces « MM3 », gradient conjugué, logiciel VEGAZZ) et d'une optimisation finale des géométries par méthode MOPAC (PM3). La chiralité des molécules a été respectée selon les indications associées au nom ou CAS RN qui identifient les substances d'intérêt. La diastéréoisomérisation des molécules 1,2,5,6,9,10-Hexabromocyclododecane et 1,3,5,7,9,11-Hexabromocyclododecane a été attribuée de façon aléatoire car aucune information n'était associée aux CAS RN de ces deux substances.

Les valeurs expérimentales des coefficients de distribution Log D qui sont répertoriées dans la base de données ChemIDPlus²¹ ont été adoptées pour décrire les molécules analysées. En l'absence de données expérimentales, les coefficients de distributions ont été estimés grâce au module ChemAxon mis à disposition par ChemSpider²². L'acide perfluorooctanesulfonique (PFOS) n'est pas caractérisable en fonction d'un coefficient de partage 1-octanol/eau car il forme des émulsions (OECD, 2002). Pour cette molécule il a été impossible de dériver des prédictions.

Les analyses statistiques ont été effectuées grâce au logiciel R (R core team, 2015) et le package car (Fox and Weisber, 2011). Le test de permutation de la variable dépendante a été conduit grâce aux logiciels mis à disposition par le laboratoire de chémo-informatique DTC du Pr Roy²³

²⁰ A. Pedretti, L. Villa, G. Vistoli "VEGA – an open platform to develop chemo-bio-informatics applications, using plug-in architecture and script programming" J.C.A.M.D Vol. 18, 167-173 (2004)

²¹ <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidlite.jsp>

²² <http://www.chemspider.com/>

²³ <http://dtclab.webs.com/software-tools>

1. Définition du domaine d'application du modèle et validation externe

Un modèle QSAR peut prédire avec fiabilité les propriétés d'intérêt pour les substances chimiques qui ressemblent aux substances qui composent son jeu de calibration (Netzeva, et al., 2005). Cependant, l'article de Yangali-Quintanilla et al. (Yangali-Quintanilla, et al., 2010) ne définit pas un domaine d'application pour l'équation 1. Afin d'éviter une utilisation inappropriée du modèle (équation 1), dans le cadre de ce travail, le domaine d'application du modèle a été défini en fonction des plages de valeurs qui caractérisent ses descripteurs (Tab. 1). Selon cette définition une substance chimique appartient au domaine d'application du modèle si la valeur de chacun de ses descripteurs respecte la plage de valeurs déterminée par le jeu d'apprentissage.

Tableau 1. Plages de valeurs qui définissent le domaine d'application du modèle décrit par l'équation 1

	eqwidth	depth	length	log D	SR
MAX	0.79	0.75	1.79	5.88	0.96
min	0.53	0.42	0.93	-0.45	0.98

Le modèle a été qualifié par ces auteurs grâce à une validation interne qui a donné des résultats satisfaisants (Yangali-Quintanilla, et al., 2010) et reproductibles. Cependant, les auteurs n'ont pas vérifié le modèle en fonction du test de permutation de la variable dépendante (Eriksson, et al., 2003). Une vérification indépendante et effectuée en fonction de 100 permutations, a permis d'établir que le risque d'une corrélation fortuite entre descripteurs physicochimiques et taux de rejection peut être exclue. En effet, le coefficient de détermination du modèle se dégrade considérablement en fonction d'une permutation aléatoire de la variable dépendante.

Tous les coefficients du modèle sont significativement différents de zéro (p -value $< 10^{-4}$). Toutefois, les descripteurs eqwidth et depth sont corrélés ($R = 0.84$) et ils sont caractérisés par un facteur d'inflation de la variance (FIV) égal à 8.4 et 7.5 respectivement. Des valeurs de FIV compris entre 5 et 10 indiquent des modèles dont la stabilité peut être remise en cause par une colinéarité élevée (Legendre and Legendre, 2012).

Compte tenu de cette colinéarité, une analyse par bootstrap a été effectuée (2000 re-échantillonnages) afin de vérifier la robustesse du modèle. Cette analyse a mis en évidence une petite augmentation des erreurs standards associées aux coefficients et intercepte ($< 12\%$) et des intervalles de confiance à 95% qui ne contiennent pas la valeur zéro.

De plus, aucun changement des signes des coefficients n'a été mis en évidence lorsqu'un quart de données de rejection a été aléatoirement retiré du jeu d'apprentissage à plusieurs reprises (500 répétitions), et un nouveau modèle a été dérivé en fonction des trois quarts restants. Pour cette raison, la colinéarité entre ces deux descripteurs n'a pas été considérée comme problématique. En ce qui concerne la variable dépendante (taux de rejection) la figure 1 montre qu'au sein de ce jeu d'apprentissage les taux de rejection ($17.7\% \leq$ taux de rejection $\leq 99\%$) inférieurs à 70% sont sous-représentés (25% des données). Par conséquent le modèle devrait avoir une certaine tendance à prédire avec moins de fiabilité les faibles taux de rejection.

Une analyse des données publiées par Yangali-Quintanilla (Yangali-Quintanilla, et al., 2010) a aussi permis d'établir que la variabilité expérimentale qui caractérise la détermination du taux de rejection est égale, en moyenne, à 7 (SR =0.98, MWCO²⁴ = 200) et 18 points de pourcentage (SR =0.96, MWCO = 300). Cette variabilité expérimentale détermine la limite supérieure de précision qu'il est vraisemblable d'atteindre en fonction des prédictions calculées par le biais d'un modèle QSAR.

²⁴ « Molecular Weight Cut-Off ». Les membranes sont classées en fonction du poids moléculaire de la plus petite molécule qui correspond à un taux de rétention de 90%

Sur la base de la définition du domaine d'application adoptée pour cette étude le modèle décrit par l'équation 1 a été utilisé pour prédire le taux de rejection d'un jeu de validation externe (Tab. 2) composé par 32 substances chimiques (Yangali-Quintanilla, et al., 2010). Cette forme de validation représente le critère de validation le plus strict pour les modèles QSAR car il quantifie leur pouvoir prédictif en fonction de substances chimiques qui n'ont pas été utilisées lors de la calibration du modèle²⁵ (Gramatica, 2007).

La performance prédictive du modèle pour les substances du jeu de validation externe est exemplifiée par le graphique des valeurs observées de rejection en fonction des valeurs prédites (Fig. 2). Une analyse de cette figure montre que :

- le pouvoir prédictif du modèle a été testé surtout en fonction de taux de rejection compris entre 80% et 100%
- les erreurs de prédiction les plus élevées correspondent à une sûr-prédiction et se situent en correspondance des taux de rejection observés qui sont inférieurs à 80%. Ce comportement pouvait être raisonnablement anticipé en fonction de la distribution de la variable dépendante reportée sur la figure 1.

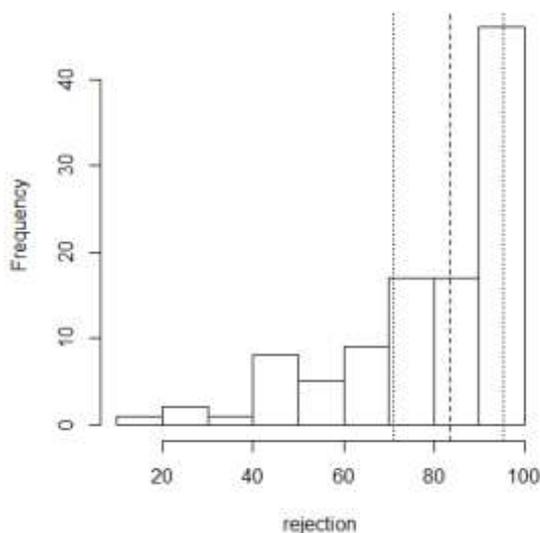


Figure 1. Distribution des taux de rejection expérimentaux qui composent le jeu d'apprentissage du modèle ($17.7\% \leq \text{taux de rejection} \leq 99\%$). Les trois lignes verticales indiquent le premier, le deuxième et le troisième quartile de la distribution.

²⁵ Trois substances (Carbamazépine, Atrazine et Estrone) du jeu de validation externe sont aussi contenues à l'intérieur du jeu de calibration du modèle mais elles ont été testées sur des membranes différentes.

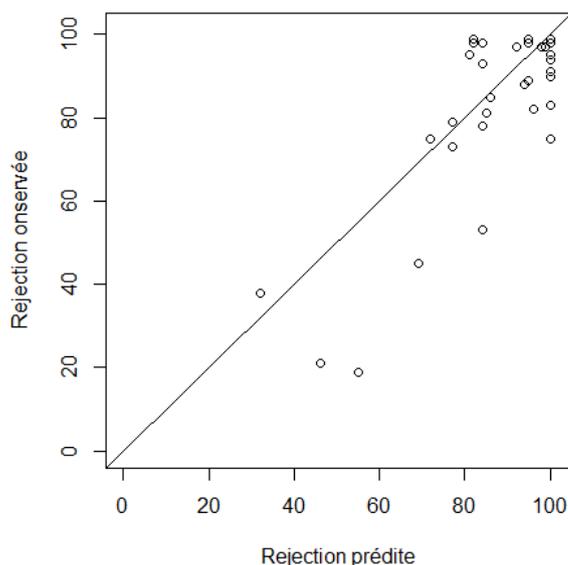


Figure 2. Valeurs observées de rejection en fonction des valeurs prédites par le modèle décrit par l'équation 1.

La performance prédictive du modèle peut être quantifiée par plusieurs indicateurs statistiques. Le coefficient de détermination par validation croisée $Q2_{ext}$, et le coefficient de corrélation de concordance CCC sont parmi les critères les plus utilisés (Chirico and Gramatica, 2011). D'habitude un modèle QSAR est considéré comme prédictif si $CCC \geq 0.85$ et $Q2_{ext} \geq 0.70$ (Chirico and Gramatica, 2012). Le modèle décrit par l'équation 1 ($CCC = 0.74$, $Q2_{ext} = 0.58$) ne respecte pas ces valeurs recommandées.

Selon ces critères de qualité généralement utilisés (Chirico and Gramatica, 2011), la validation externe indique que le modèle proposé par Yangali-Quintanilla et al. (Yangali-Quintanilla, et al., 2010) ne peut pas être considéré comme valide même s'il n'est pas complètement dépourvu de pouvoir prédictif. La racine de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) calculée pour le jeu de validation est égale à 14 points de pourcentage. Une analyse des erreurs de prédiction associées au jeu de validation externe a mis en évidence que la proportion de molécules dont les erreurs absolues de prédiction dépassent la variabilité expérimentale maximale (18 points de pourcentage) est plus élevée (36% contre 5%) parmi les substances caractérisées par des petits volumes (produit des variables eqwidth, depth et length $< 0.45 \text{ nm}^3$). Un test exact de Fisher corrobore cette observation en rejetant l'hypothèse H_0 d'un « Odd ratio » égal à 1 ($\alpha=0.05$, p-value = 0.04).

Les auteurs de l'article ont aussi mis en évidence certaines sûr-prédictions comme dans le cas du NDPA ou du Linuron (Yangali-Quintanilla, et al., 2010). La nature de la membrane (NF-90, Trisep TS-80, Desal HL) pourrait être à l'origine d'une source additionnelle de variabilité qui pourrait expliquer certaines prédictions particulièrement mauvaises mais cette variable n'est pas prise en compte de façon explicite par le modèle.

Cette tendance, est confirmée par les prédictions que les auteurs de l'article ont obtenues pour des substances qui n'appartiennent pas au domaine d'application de l'équation 1. Même si l'erreur qui caractérise ces prédictions peut être potentiellement très élevée, la proportion de prédictions dont l'erreur absolue de prédiction est supérieure à 18 points de pourcentage est toujours plus élevée (39% contre 5%) parmi les substances caractérisées par des petites volumes. La significativité de cette observation est corroborée par un test exact de Fisher qui permet de rejeter ($\alpha=0.05$, p-value = $4 \cdot 10^{-4}$) l'hypothèse H_0 d'un « Odd ratio » égal à 1.

Par conséquent les prédictions pour des molécules caractérisées par des petits volumes sont potentiellement assujetties à plus d'incertitude et, notamment, à des surestimations du taux de rejection (les taux de rejection sont surestimés dans 67% des cas). Une analyse plus approfondie que celle décrite dans ce rapport serait nécessaire pour comprendre si les erreurs élevées pourraient être expliquées par un profil physicochimique particulier des substances chimiques. Ce profil pourrait prendre en compte des propriétés moléculaires qui n'ont pas été analysées lors de la dérivation du modèle.

D'un point de vue conservateur la médiane des erreurs absolues du sous-ensemble des petites molécules dont l'erreur absolue dépasse les 18 points de pourcentage pourrait être adoptée comme indicateur d'incertitude pour les prédictions associées aux petits volumes moléculaires. Cette médiane correspond à une valeur de 32 points de pourcentage.

En ce qui concerne les autres molécules du jeu de validation externe (produit des dimensions moléculaires $> 0.45 \text{ nm}^3$) des indicateurs d'incertitude prédictive sont reportés dans le tableau 3 qui met aussi en évidence un biais pour la sûre-prédiction. Le fait que l'erreur absolue moyenne est inférieure à l'incertitude expérimentale ne doit pas induire en erreur et il est toujours recommandé d'utiliser la variabilité expérimentale comme limite supérieure de précision atteignable par le modèle.

2. Prédiction des taux de rejection pour les substances d'intérêt

Le tableau 4 reporte les taux de rejection prédits pour les substances d'intérêt. Plusieurs substances ne rentrent pas dans le domaine d'application du modèle (indiquées par la lettre N) et il est fortement recommandé de ne formuler aucune hypothèse en fonction de ces prédictions. Certaines substances (indiquées par la lettre L) se retrouvent en proximité immédiate du domaine d'application et leurs prédictions peuvent être prises en compte même si, potentiellement, elles sont plus incertaines que les prédictions qui peuvent être obtenues pour les substances qui respectent le périmètre de ce domaine.

Compte tenu de leurs dimensions moléculaires, le taux de rejection prédit pour six substances (EGBE, Decahydronaphtalène, Benzo(a)anthracène, o-Phénylphénol, Ethyl-parabène et Méthyl-parabène) pourrait largement surestimer le taux de rejection réel.

La valeur expérimentale du taux de rejection pour plusieurs substances d'intérêt est reportée dans l'article de Yangali-Quintanilla et al. (Yangali-Quintanilla, et al., 2010). Ces valeurs sont reportées dans le tableau 5.

3. Conclusion pour les prédictions QSAR des taux de rejection par nanofiltration

Le modèle proposé par Yangali-Quintanilla et al. (Yangali-Quintanilla, et al., 2010) ne satisfait pas les critères statistiques qui sont d'habitude associés aux modèles QSAR considérés comme valides (Chirico and Gramatica, 2011). Compte tenu de la valeur de ces indicateurs statistiques, son utilisation dans un contexte réglementaire serait, dans le meilleur des cas, uniquement possible au sein d'une approche du poids de la preuve. L'utilisation de ce modèle est, par conséquent, soumise à plusieurs limitations :

- Comme tout modèle QSAR, il est fortement recommandé de l'appliquer en respectant son domaine d'application.
- En aucun cas l'erreur de prédiction doit être considérée inférieure à l'incertitude expérimentale : 7 et 18 points de pourcentage selon les caractéristiques de la membrane.
- Les prédictions pour les molécules caractérisées par un petit volume moléculaire (produit des variables eqwidth, depth et length $< 0.45 \text{ nm}^3$) peuvent être associées à des erreurs de prédictions qui dépassent largement la variabilité expérimentale et, notamment, à des surestimations.

Références de l'Annexe 4

Chirico, N. and Gramatica, P. (2011) Real external predictivity of QSAR models: how to evaluate it? Comparison of different validation criteria and proposal of using the concordance correlation coefficient, *J Chem Inf Model*, **51**, 2320-2335.

Chirico, N. and Gramatica, P. (2012) Real external predictivity of QSAR models. Part 2. New intercomparable thresholds for different validation criteria and the need for scatter plot inspection, *J Chem Inf Model*, **52**, 2044-2058.

de Ridder, D.J., *et al.* (2010) Modeling equilibrium adsorption of organic micropollutants onto activated carbon, *Water Res*, **44**, 3077-3086.

Delgado, L.F., *et al.* (2012) QSAR-like models: a potential tool for the selection of PhACs and EDCs for monitoring purposes in drinking water treatment systems--a review, *Water Res*, **46**, 6196-6209.

Eriksson, L., *et al.* (2003) Methods for reliability and uncertainty assessment and for applicability evaluations of classification- and regression-based QSARs, *Environmental Health Perspectives*, **111**, 1361-1375.

Fox, J. and Weisber, S. (2011) *An {R} Companion to Applied Regression, Second Edition*. Sage, Thousand Oaks.

Gramatica, P. (2007) Principles of QSAR models validation: internal and external, *Qsar & Combinatorial Science*, **26**, 694-701.

Legendre, P. and Legendre, L. (2012) Numerical Ecology. In. Elsevier Science & Technology, Oxford UK, pp. 557-558.

Netzeva, T.I., *et al.* (2005) Current status of methods for defining the applicability domain of (quantitative) structure-activity relationships. The report and recommendations of ECVAM Workshop 52, *Altern Lab Anim*, **33**, 155-173.

OECD (2002) Co-operation on existing chemicals hazard assessment of perfluorooctane sulfonate (PFOS) and its salts.

R core team (2015) A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria.

Yangali-Quintanilla, V., *et al.* (2010) A QSAR model for predicting rejection of emerging contaminants (pharmaceuticals, endocrine disruptors) by nanofiltration membranes, *Water Res*, **44**, 373-384.

Tableau 2. Validation externe du modèle proposé par Yangali-Quintanilla (Eq. 1)

Substance	Eqwidth [nm]	Depth [nm]	Length [nm]	log D [nm]	SR	Taux rejection	de	Taux rejection observé	de	Erreur relative%
Metribuzin	0.74	0.64	1.17	0.47	0.98	99		97		2.1
Pindolol	0.76	0.72	1.46	-0.32	0.98	100		75		33.3
2-ethoxyethanol	0.53	0.52	1	-0.32	0.98	46		21		119.0
Aminopyrine	0.73	0.66	1.27	1	0.98	98		97		1.0
Antipyrine	0.66	0.56	1.17	0.38	0.98	86		85		1.2
Cyclophosphamide	0.78	0.63	1.12	0.63	0.98	100		94		6.4
Metoxuron	0.7	0.59	1.29	1.64	0.98	95		89		6.7
NDPA	0.6	0.53	1.16	1.36	0.98	69		45		53.3
Clofibric acid	0.73	0.68	1.2	-0.2	0.98	95		98		3.1
Gemfibrozil	0.78	0.65	1.58	2.3	0.98	100		98		2.0
Ibuprofen	0.71	0.7	1.33	0.77	0.98	95		99		4.0
Atrazine	0.74	0.55	1.26	2.61	0.98	100		91		9.9
Bentazon	0.76	0.73	1.18	2.34	0.98	82		98		16.3
Carbamazépine	0.73	0.58	1.2	2.45	0.98	94		88		6.8
Chlorotoluron	0.61	0.45	1.29	2.41	0.98	85		81		4.9
Diuron	0.56	0.42	1.31	2.68	0.98	77		73		5.5
Estrone	0.76	0.67	1.39	3.13	0.98	100		90		11.1
Isoproturon	0.66	0.63	1.42	2.87	0.98	84		93		9.7
Linuron	0.69	0.53	1.21	3.2	0.98	84		53		58.5
Metobromuron	0.61	0.5	1.34	2.38	0.98	84		78		7.7
Monolinuron	0.69	0.65	1.22	2.3	0.98	77		79		2.5
Simazin	0.64	0.48	1.37	2.18	0.98	96		82		17.1
Pindolol	0.76	0.72	1.46	-0.32	0.97	100		83		20.5
2-ethoxyethanol	0.53	0.52	1	-0.32	0.97	32		38		15.8
Aminopyrine	0.73	0.66	1.27	1	0.97	84		98		14.3

Tableau 2. Validation externe du modèle proposé par Yangali-Quintanilla (Eq. 1)

Substance	Eqwidth [nm]	Depth [nm]	Length [nm]	log D [nm]	SR	Taux rejection	de	Taux rejection	de	Erreur relative%
						prédit		observé		
Antipyrine	0.66	0.56	1.17	0.38	0.97	72		75		4.0
Cyclophosphamide	0.78	0.63	1.12	0.63	0.97	92		97		5.2
NDPA	0.6	0.53	1.16	1.36	0.97	55		19		189.5
Clofibric acid	0.73	0.68	1.2	-0.2	0.97	82		99		17.2
Gemfibrozil	0.78	0.65	1.58	2.3	0.97	100		99		1.0
Ibuprofen	0.71	0.7	1.33	0.77	0.97	82		99		17.2
Carbamazepine	0.73	0.58	1.2	2.45	0.97	81		95		14.7

Tableau 3. Caractérisation de l'incertitude prédictive du modèle de Yangali-Quintanilla pour les substances dont le produit des variables eqwidth, depth et length est supérieur à 0.45 nm³

Déviaton positive maximale	25
Déviaton négative maximale	-17
Erreur absolue moyenne	8
Erreur absolue médiane	6

Tableau 4. Prédiction du taux de rejection par nanofiltration. DA = domaine d'application du modèle : R = respecté, R(S) = respecté mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, L = substance située en proximité du domaine d'application, L(S) = substance située en proximité du domaine d'application mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, N = substance située à l'extérieur du domaine d'application, N** = substance très éloignée du domaine d'application. Eqwidth, depth, length, log D et SR = descripteurs physicochimiques du modèle QSAR. Les taux de rejection ont été prédits en fonction de l'équation 1 et de deux valeurs de la rejection saline (0.96 et 0.98) qui donnent lieu à des prédictions minimales et maximales des taux de rejection. Il est fortement recommandé de ne formuler aucune hypothèse en fonction des prédictions pour les substances qui n'appartiennent pas au domaine d'application du modèle (en gris dans le tableau).

ID	Nom	DA	Eqwidth [nm]	Depth [nm]	Length [nm]	log D (pH=7.0)	SR min	SR max	Rejection minimale prédite	Rejection maximale prédite
1	Di(2-éthylhexyl)phtalate (DEHP)	N**	1.12	0.99	1.83	7.45	0.96	0.98	100.0	100.0
2	Dichlorométhane HAP	N**	0.47	0.45	0.64	1.25	0.96	0.98	0.0	0.5
3a	Benzo (g,h,i) Pérylène : 191-24-2	N	0.65	0.37	1.16	6.63	0.96	0.98	45.5	72.7
3b	Indeno (1,2,3-cd) Pyrène : 193-39-5	N	0.58	0.35	1.34	5.61	0.96	0.98	48.7	75.8
3c	Benzo (b) Fluoranthène : 205-99-2	N	0.59	0.36	1.34	5.78	0.96	0.98	50.4	77.6
3d	Benzo (a) Pyrène : 50-32-8	N	0.58	0.37	1.35	6.13	0.96	0.98	44.6	71.7
3e	Benzo (k) Fluoranthène : 207-08-9	N	0.60	0.37	1.34	6.11	0.96	0.98	48.9	76.0
3f	Anthracène HAP : 120-12-7	N	0.54	0.36	1.15	4.45	0.96	0.98	27.5	54.7
3g	Fluoranthène : 206-44-0	N	0.58	0.36	1.1	5.16	0.96	0.98	29.1	56.3
3h	Naphtalène : 91-20-3	N	0.52	0.36	0.93	3.3	0.96	0.98	11.1	38.2
<i>HBCDD</i>										
4a	1,2,5,6,9,10-Hexabromocyclododecane (HBCDD)	N	0.84	0.67	1.25	6.56	0.96	0.98	67.5	94.7
4b	1,3,5,7,9,11-Hexabromocyclododecane (HBCDD)	N**	0.94	0.72	1.32	6.63	0.96	0.98	94.1	100.0
4c	α-HBCDD : 134237-50-6	N**	1.08	1.05	1.28	6.56	0.96	0.98	89.2	100.0
4d	β-HBCDD : 134237-51-7	N**	1.08	1.02	1.22	6.56	0.96	0.98	87.5	100.0
4e	γ-HBCDD : 134237-52-8	N**	1.09	1.03	1.22	6.56	0.96	0.98	89.0	100.0
<i>Nonyl phénols</i>										
5a	4-Nonylphénol	L	0.66	0.65	1.85	5.76	0.96	0.98	76.9	100.0
6	PFOS	N	0.67	0.66	1.6	ND	0.96	0.98	ND	ND

Tableau 4. Prédiction du taux de rejection par nanofiltration. DA = domaine d'application du modèle : R = respecté, R(S) = respecté mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, L = substance située en proximité du domaine d'application, L(S) = substance située en proximité du domaine d'application mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, N = substance située à l'extérieur du domaine d'application, N** = substance très éloignée du domaine d'application. Eqwidth, depth, length, log D et SR = descripteurs physicochimiques du modèle QSAR. Les taux de rejection ont été prédits en fonction de l'équation 1 et de deux valeurs de la rejection saline (0.96 et 0.98) qui donnent lieu à des prédictions minimales et maximales des taux de rejection. Il est fortement recommandé de ne formuler aucune hypothèse en fonction des prédictions pour les substances qui n'appartiennent pas au domaine d'application du modèle (en gris dans le tableau).

ID	Nom	DA	Eqwidth [nm]	Depth [nm]	Length [nm]	log D (pH=7.0)	SR min	SR max	Rejection minimale prédite	Rejection maximale prédite
7	Trichloroéthylène	N**	0.48	0.35	0.77	2.42	0.96	0.98	0.0	19.7
8	Trichlorométhane (chloroforme)	N**	0.53	0.47	0.64	1.97	0.96	0.98	-16.4	10.7
<i>Substances du scénario 2</i>										
9	17β-estradiol	R	0.77	0.74	1.4	4.01	0.96	0.98	67.7	94.9
10	4-Tert-butylphénol	R	0.69	0.65	1.02	3.31	0.96	0.98	28.3	55.5
11	Benzo(a)anthracène	L(S)	0.55	0.36	1.34	5.76	0.96	0.98	39.7	66.8
12	Bisphénol A	R	0.79	0.75	1.24	3.32	0.96	0.98	61.0	88.2
13	Butylglycol (EGBE)	R(S)	0.54	0.52	1.24	0.83	0.96	0.98	36.2	63.4
14	Carbamazépine	R	0.76	0.71	1.12	2.46	0.96	0.98	52.7	79.9
15	Chlorure de vinyle (Chloroethylene)	N**	0.43	0.35	0.65	1.2	0.96	0.98	0.0	3.0
16	Decabromodiphenylether (BDE-209; DecaBDE)	N**	0.94	0.87	1.5	11.16	0.96	0.98	66.5	93.7
17	Decahydronaphtalène	R(S)	0.64	0.55	0.93	3.67	0.96	0.98	18.5	45.6
18	Diazépam	L	0.81	0.63	1.28	2.82	0.96	0.98	86.4	100.0
19	Dibenzo(a,h)anthracène	N	0.43	0.38	1.48	6.75	0.96	0.98	10.2	37.3
20	Diéthylène glycol monobutyl éther (DEGBE)	R	0.55	0.54	1.62	0.56	0.96	0.98	67.7	94.9
21	Diisononyl phtalate (DINP)	N**	0.81	0.71	2.86	8.76	0.96	0.98	100.0	100.0
22	Estrone	R	0.74	0.65	1.41	3.13	0.96	0.98	74.4	100.0
23	Ethyl-parabène	R(S)	0.55	0.42	1.25	2.47	0.96	0.98	40.6	67.8
24	Kétoprofène	L	0.82	0.81	1.4	0.57	0.96	0.98	89.6	100.0
25	Méthyl-parabène	L(S)	0.53	0.41	1.11	1.96	0.96	0.98	28.2	55.4
26	Ofloxacine	N**	0.80	0.63	1.61	-1.46	0.96	0.98	100.0	100.0
27	o-Phénylphénol	R(S)	0.67	0.59	1.12	3.09	0.96	0.98	38.4	65.6

Tableau 4. Prédiction du taux de rejection par nanofiltration. DA = domaine d'application du modèle : R = respecté, R(S) = respecté mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, L = substance située en proximité du domaine d'application, L(S) = substance située en proximité du domaine d'application mais forte surestimation possible en raison des dimensions moléculaires, N = substance située à l'extérieur du domaine d'application, N** = substance très éloignée du domaine d'application. Eqwidth, depth, length, log D et SR = descripteurs physicochimiques du modèle QSAR. Les taux de rejection ont été prédits en fonction de l'équation 1 et de deux valeurs de la rejection saline (0.96 et 0.98) qui donnent lieu à des prédictions minimales et maximales des taux de rejection. Il est fortement recommandé de ne formuler aucune hypothèse en fonction des prédictions pour les substances qui n'appartiennent pas au domaine d'application du modèle (en gris dans le tableau).

ID	Nom	DA	Eqwidth [nm]	Depth [nm]	Length [nm]	log D (pH=7.0)	SR min	SR max	Rejection minimale prédite	Rejection maximale prédite
28	Oxazépam	R	0.77	0.57	1.18	2.24	0.96	0.98	78.8	100.0
29	Sulfaméthazine	N	0.86	0.77	1.36	0.58	0.96	0.98	100.0	100.0
30	Tributylphosphate	N**	0.99	0.76	1.5	4	0.96	0.98	100.0	100.0
31	Triclosan	L	0.80	0.77	1.35	4.76	0.96	0.98	64.2	91.3

Tableau 5. Valeurs expérimentales du taux de rejection. Le taux de rejection moyen a été reporté lorsque plusieurs valeurs étaient disponibles. SR = taux de rejection saline, MWCO = molecular weight cut-off.

Substance	SR	MWCO	Taux% de rejection expérimental
4-Nonylphénol	0.96	300	83.3
	0.98	200	95.3
Estrone	0.96	300	72.6
Estradiol	0.98	200	95.5
Bisphénol A	0.96	300	96.4
	0.98	200	94.3
Carbamazépine	0.96	300	72.6
	0.98	200	95.2
Trichloroéthylène	0.99	200	3
Chloroforme	0.99	200	0