

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE SALEH BOUBNIDER CONSTANTINE 3



**FACULTE GENIE DES PROCEDES
DEPARTEMENT GENIE PHARMACEUTIQUE**

N° d'ordre :.....

Série :.....

Mémoire de Master

Filière : **Génie des Procédés**

Spécialité : **Génie Pharmaceutique**

Thème

**Simulation d'un Procédé d'Oxydation Avancé pour le
Traitement des Eaux**

Dirigé par :

Dr. AMICHI Hayet

Présenté par :

DEBBAH Souheila

CHAREF Bouchra Sabrine

BAALI Rania Nada

BOUCHELOUCHE Aida

Année Universitaire 2024/2025.

Session : juin

Table des matières

REMERCIEMENTS	I
DÉDICACE.....	II
Liste des tableaux	ix
Liste des figures	x
Liste des abréviations	xii
Introduction générale.....	1
 CHAPITRE I ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	
PARTIE A POLLUTION DE L'EAU ET LES COLORANTS.....	5
I.A.1 Pollution de l'eau	5
I.A.1.1 Introduction	5
I.A.1.2 Définition de l'eau.....	5
I.A.1.3 Pollution des eaux	5
I.A.1.4 Classification de la pollution	6
I.A.1.5 Différents types de pollution des eaux	6
I.A.1.5.a Selon la durée de déversement.....	6
I.A.1.5.b. Selon la nature du Polluant	7
I.A.1.5.c. Selon l'origine du polluant.....	7
I.A.2 Colorants	7
I.A.2.1 Introduction	7
I.A.2.2 Définition des colorants.....	8
I.A.2.3 Classification des colorants	9
I.A.2.3.a Classification Chimique	9
I.A.2.3.b Classification tinctoriale	10
I.A.2.4 Impact des colorants sur l'environnement.....	11

I.A.2.5 Utilisation et application des colorants	11
I.A.2.6 Safranine (O)	11
I.A.2.7 Utilisation de la Safranine O	12
PARTIE B DIFFERENT PROCEDES D'OXYDATION AVANCES (POA).....	14
I.B.1 Introduction	14
I.B.2 Méthodes de traitement	15
I.B.2.1 Méthodes classiques	15
I.B.2.2 Avantages et Inconvénients	15
I.B.3 Procédés d'oxydation avancées.....	17
I.B.3.1 Définition.....	17
I.B.3.2 Avantages et Inconvénients des procédés d'oxydation avancée (POA).....	18
I.B.3.3 Différents procédés d'oxydation avancée (POA).....	18
I.B.4 Radical hydroxyle	19
I.B.4.1 Description et caractéristique	19
I.B.4.2 Réactivité du radical hydroxyle	20
I.B.4.3 Mécanismes d'oxydation par le radical hydroxyle.....	21
I.B.5 Radical $\text{SO}_4^{\cdot -}$	22
I.B.5.1 Description.....	22
I.B.5.2 Mécanismes d'oxydation par le radical sulfates.....	23
I.B.5.3 Génération des radicaux sulfate.....	24
I.B.5.3.a Activation thermique.....	24
I.B.5.3.b Activation par photolyse	24
I.B.5.3.c Activation par l'électron	24
I.B.5.3.d Activation par les métaux	25
I.B.6 Influence du pH.....	25

I.B.7 Conclusion.....	25
-----------------------	----

CHAPITRE II OUTILS DE SIMULATION

II.1 Introduction	28
II.2. Modèle cinétique et approche computationnelle	28
II.2.1. Chemins de décomposition de l'ion persulfate	28
II.3 Outil de simulation : Logiciel COPASI.....	31
II.4 Conclusion	33

CHAPITRE III RESULTATS ET DISCUSSION

III.1 Introduction	35
III.2 Simulation	35
III. 2.1 Cinétique de Dégradation de la safranine O	35
III.2.1.a Validation du modèle	35
III.2.1.b Espèces réactives	42
III.2.1.b.1 Radicaux hydroxyle et sulfate	42
III.2.1.b.2 Espèces oxygénées réactives.....	44
III.2.2 Effet de la concentration initiale de la SO	48
III.2.2.a Validation du modèle	48
III.2.2.b Espèces réactives	51
III.3 Conclusion.....	54
Conclusion générale	56
Références bibliographiques	59
ANNEXES.....	67
RESUME.....	

Résumé

Les rejets textiles sont généralement traités par des procédés physico-chimiques et biologiques, mais ces traitements ne suffisent pas toujours à atteindre la qualité exigée. Pour cette raison, les procédés d'oxydation avancés sont utilisés afin d'éliminer les micropolluants résiduels. Cette étude porte sur la dégradation du colorant Safranine O (SO), utilisé dans plusieurs industries, par activation thermique du persulfate. Une modélisation cinétique approfondie a permis d'explorer les espèces réactives impliquées et de déterminer les constantes de vitesse des mécanismes radicalaires et non radicalaires. En utilisant le logiciel COPASI® et un mécanisme cinétique composé de 44 réactions, le modèle a permis un ajustement précis aux données expérimentales. Les simulations ont été réalisées à 50 ± 1 °C, avec 2 g/L de persulfate, différentes concentrations initiales de micropolluant (1, 10 et 100 mg) et un pH contrôlé de 3,5.

Les résultats montrent que plus la concentration du polluant augmente, plus sa dégradation ralentit. Les radicaux $\cdot\text{OH}$ et $\text{SO}_4^{\cdot-}$ sont les principaux acteurs de cette dégradation. Le modèle permet de suivre l'évolution des ERO, la répartition des radicaux et d'estimer les constantes de vitesse liées à l'activation thermique du persulfate.

Mots-clés : Procédé d'oxydation avancé (POA) ; Safranine O ; Radical Persulfate ($\text{SO}_4^{\cdot-}$) ; Radical hydroxyle ($\cdot\text{OH}$) ; Dégradation.

Abstract

Textile effluents are generally treated by physico-chemical and biological processes, but these treatments do not always suffice to reach the required quality. For this reason, advanced oxidation processes are used to eliminate residual micropollutants. This study focuses on the degradation of the dye Safranine O (SO), used in various industries, by thermal activation of persulfate. An in-depth kinetic modeling allowed the exploration of reactive species involved and the determination of rate constants for radical and non-radical mechanisms.

Using the COPASI® software and a kinetic mechanism composed of 44 reactions, the model enabled precise fitting to experimental data. Simulations were conducted at 50 ± 1 °C, with 2 g/L persulfate, varying initial micropollutant concentrations (1, 10, and 100 mg), and a controlled pH of 3.5.

The results show that the higher the pollutant concentration, the slower its degradation. The radicals $\cdot\text{OH}$ and $\text{SO}_4^{\cdot-}$ are the main actors in this degradation. The model allows tracking the evolution of reactive oxygen species (ROS), the distribution of radicals, and estimating the rate constants related to the thermal activation of persulfate.

Keywords: Advanced Oxidation Process (AOP); Safranine O; Persulfate Radical ($\text{SO}_4^{\cdot-}$); Hydroxyl Radical ($\cdot\text{OH}$); Degradation.

الملخص

تُعالج المخلفات النسيجية عادةً بواسطة عمليات فيزيوكيميائية وبيولوجية، إلا أن هذه المعالجات لا تكون دائماً كافية لتحقيق الجودة المطلوبة. ولهذا السبب، تُستخدم عمليات الأكسدة المتقدمة للتخلص من الملوثات الدقيقة المتبقية.

تتناول هذه الدراسة تحليل الصبغة "سافرين O (SO)", المستخدمة في عدة صناعات، من خلال التنشيط الحراري للبروكسلفيت. سمحت نمذجة حركية متعمقة بدراسة الأنواع التفاعلية المشاركة وتحديد ثوابت سرعة الآليات الجذرية وغير الجذرية. وباستخدام برنامج COPASI® وآلية حركية تتضمن 44 تفاعلاً، سمح النموذج بضبط دقيق للبيانات التجريبية. أُجريت المحاكاة عند درجة حرارة 50 ± 1 درجة مئوية، مع تركيز 2 جم/لتر من البروكسلفيت، وتركيزات ابتدائية مختلفة من الملوث الدقيق (1 و 10 و 100 ملجم) ودرجة حموضة محكومة عند 3.5.

تُظهر النتائج أن زيادة تركيز الملوث تؤدي إلى إبطاء تحلله. وتُعتبر جذور $\text{SO}_4^{\cdot-}$ و $\cdot\text{OH}$ الفاعلين الرئيسيين في هذا التحلل، على عكس الأوزون الذي يلعب دوراً ثانوياً. كما يمكن النموذج من متابعة تطور أنواع الأكسجين النشطة، وتوزيع الجذور وحساب ثوابت السرعة المتعلقة بالتنشيط الحراري للبروكسلفيت.

الكلمات المفتاحية: عملية الأكسدة المتقدمة (POA) ؛ سافرين O ؛ جذور البروكسلفيت ($\text{SO}_4^{\cdot-}$) ؛ جذور الهيدروكسيل ($\cdot\text{OH}$) ؛ التحلل.