



Estimation quantitative des utilisations de produits phytopharmaceutiques par
les différents secteurs d'activité

Rapport annuel – CSC 03.09.00-21-3261

**Volume 2 – Caractérisation du risque pour l'environnement lié à l'utilisation de produits
phytopharmaceutiques par les différents secteurs d'activité agricole en Wallonie**

ASBL Corder

2025

Projet financé par le Service public de Wallonie Agriculture, Ressources naturelles et Environnement

Auteurs :

- Monseur Loïc,
- de Maere Jean-Baptiste,
- Guillitte Chloé
- Janssens Laurence

Table des matières

Table des matières	2
Éléments de contexte	5
Remerciements	6
Abréviations.....	7
1 État des lieux des indices et indicateurs existants	8
1.1 Contexte de développement et d'évolution des indices de suivi des pesticides.....	8
1.2 Classification des indices et indicateurs liés aux pesticides.....	8
2 Présentation des sources de données	11
2.1 Quantités de PPP utilisés	11
2.2 Données du parcellaire agricole	11
2.3 Données météorologiques de PAMESEB	11
2.4 Données sur les propriétés des pesticides	11
2.5 Données pédologiques, géologiques et hydrologiques spatialisées	11
2.5.1 Le taux de carbone organique du sol	11
2.5.2 Modèle numérique des pentes	12
2.5.3 Teneurs en eau des sols agricoles wallons et conductivité hydraulique proche de la saturation	12
2.5.4 Épaisseur de la zone non saturée - profondeur de l'aquifère	12
2.5.5 Cartes de la couverture du sol	12
2.5.6 Le facteur d'érodibilité des sols wallons issues de ERRUISSOL	12
3 Hypothèses de travail.....	13
4 Méthodologie	14
4.1 Principe général du modèle Phytorisque	14
4.1.1 Objectifs du Phytorisque	14
4.1.2 Compartiments de l'environnement analysés.....	14
4.1.3 Concept méthodologique.....	15
4.2 Évaluation des conditions hydropédologiques et géographiques selon un scénario du plus probable.	18
4.2.1 Méthodologie de paramétrisation des conditions environnementales	18
4.3 Facteur T : la toxicité.....	19
4.3.1 Concepts méthodologiques.....	19

4.3.2	Méthode de calcul du facteur T	20
4.3.3	Limites méthodologiques	22
4.4	Facteur B : la bioaccumulation	24
4.4.1	Concept méthodologique.....	24
4.4.2	Méthode de calcul du facteur B	24
4.5	Facteur Q : la quantité utilisée	27
4.5.1	Saison d'application des substances actives.....	27
4.5.2	Quantités utilisées de substance active par secteur agricole.....	28
4.5.3	Dose d'application.....	28
4.6	Facteur M : la mobilité.....	30
4.6.1	Concept méthodologique.....	30
4.6.2	Facteur d'interception.....	31
4.6.3	Facteur M pour les eaux de surface	33
4.6.4	Facteur M pour les eaux souterraines	33
4.6.5	Facteur M pour le milieu terrestre	33
4.6.6	Facteur M pour le compartiment sol cultivé.....	38
4.7	Facteur P : la persistance	39
4.7.1	Concept méthodologique.....	39
4.7.2	Approche cinétique de la persistance	39
4.7.3	Facteur P pour les eaux souterraines	40
4.7.4	Facteur P pour les eaux de surface	41
4.7.5	Facteur P pour le milieu terrestre	44
4.7.6	Facteur P pour les sols cultivés	48
4.8	Indices du Phytorisque.....	54
4.8.1	Indice d'usage des substances actives : la surface impactée à la dose de référence.....	54
4.8.2	Indices établis par substance caractérisant la sensibilité, l'exposition des écosystèmes et indice de risque.....	55
5	Résultats.....	61
5.1	Cadre de l'analyse	61
5.1.1	Résultats sur une sélection de substances actives utilisées en 2022	61
5.1.2	Analyse de sensibilité des facteurs d'exposition aux paramètres physico-chimiques...	61
5.2	Présentation des substances actives analysées	62
5.3	Contexte pédoclimatique considéré pour l'étude	64
5.3.1	Contexte pédologique et hydrologique.....	64
5.3.2	Contexte climatique.....	64

5.4	Présentation des résultats	65
5.4.1	Toxicité.....	65
5.4.2	Bioaccumulation.....	67
5.4.3	Quantité utilisée et indice d'usage.....	70
5.4.4	Mobilité	72
5.4.5	Persistance	79
5.4.6	Indice de risque global (IRG) et indice d'exposition globale (IEG)	86
6	Conclusion et perspectives	90
7	Bibliographie	91
Annexe I:	Modélisation des processus de transfert des substances actives.....	96
I.1.	Potentiel de transfert des pesticides par ruissellement	96
I.1.1.	Transfert de pesticide par ruissellement dans la phase dissoute (PD) et dans la phase particulaire (PP).....	96
I.1.2.	Transfert de pesticide par ruissellement dans la phase dissoute (PD)	97
I.1.3.	Transfert de pesticide par ruissellement dans la phase particulaire (PP).....	108
I.2.	Potentiel de transfert des pesticides dans les eaux souterraines	117
I.2.1.	Modèle de transfert par lixiviation du Phytorisque	117
I.3.	Potentiel de transfert des pesticides par volatilisation	125
I.3.1.	Volatilisation des pesticides depuis le couvert végétal et le sol	125
I.3.2.	Volatilisation des pesticides depuis le couvert végétal	126
I.3.3.	Volatilisation depuis le sol	126
I.4.	Potentiel de transfert des pesticides par dérive durant l'application	130

Éléments de contexte

Le Livre 1^{er} du Code de l'environnement¹ (partie IV relative à la planification environnementale dans le cadre du développement durable) prévoit l'élaboration d'un rapport annuel sur l'état de l'environnement wallon. Ce rapport dresse un bilan des différentes composantes du milieu et des pressions exercées par les activités humaines en Wallonie et analyse la gestion menée en matière d'environnement par les pouvoirs publics, les entreprises et les associations volontaires. Il comporte également un état de transposition des directives européennes et de conformité aux engagements internationaux en matière d'environnement, ainsi qu'un bilan des actions réalisées en Région wallonne. Ce rapport est élaboré par la Direction de l'Etat environnemental (DEE) du Département de l'étude du milieu naturel et agricole (DEMNA).

Les différents rapports sur l'état de l'environnement wallon qui se sont succédé depuis 2006 ont systématiquement présenté un ou plusieurs indicateurs relatifs à l'utilisation des produits phytopharmaceutiques. Ces indicateurs permettent d'objectiver les pressions exercées par les activités humaines, principalement le secteur agricole, sur l'environnement et la santé.

La Directive « pesticides » 2009/128/CE² instaure un cadre pour parvenir à une utilisation des pesticides compatible avec un développement durable en réduisant les risques et les effets des pesticides sur la santé humaine et sur l'environnement. L'article 4 de cette Directive impose aux États membres de l'UE d'adopter des plans d'action nationaux pour fixer leurs objectifs quantitatifs, leurs cibles, leurs mesures et leurs calendriers en vue de réduire les risques et les effets de l'utilisation des pesticides sur la santé humaine et l'environnement. En Belgique, le National Actie Plan d'Action National (NAPAN) comprend un plan d'action fédéral et un programme d'action par Région. En Wallonie, le troisième Programme wallon de réduction des pesticides (PWRP III) 2023 – 2027 a été adopté par le Gouvernement wallon le 20/10/2022. Il prévoit la sélection et le développement d'indicateurs pertinents relatifs à l'utilisation des produits phytopharmaceutiques.

D'une part, connaître les quantités vendues et utilisées de substances actives (s.a.) dans le cadre de la protection des végétaux est nécessaire à l'analyse des mesures mises en place en matière de réglementation des produits phytopharmaceutiques (PPP). D'autre part, elle constitue une étape importante dans l'établissement de bilans et d'évaluation du risque lié à leurs utilisations.

À cette fin, le SPW-ARNE a soumis l'**estimation quantitative des utilisations de produits phytopharmaceutiques par les différents secteurs d'activité** en Wallonie à un marché public, contracté par l'ASBL Corder. Ce marché prévoit l'établissement d'un rapport annuel qui caractérise l'évolution de l'utilisation de PPP en Wallonie dans les différents secteurs d'activité. Ce rapport est divisé en deux volumes :

1. Volume 1 : Estimation quantitative des utilisations de produits phytopharmaceutiques par les utilisateurs professionnels en Wallonie ;
2. Volume 2 : Caractérisation du risque pour l'environnement lié à l'utilisation de produits phytopharmaceutiques par les différents secteurs d'activité agricole en Wallonie.

¹ <https://environnement.wallonie.be/home/legislation/code-environnement.html>

² <http://data.europa.eu/eli/dir/2009/128/2019-07-26>

Remerciements

L'ASBL Corder remercie chaleureusement le Service Public de Wallonie, à travers la Direction de l'état environnemental et la Cellule d'intégration agriculture et environnement, d'avoir financé l'intégralité de ce projet et de lui avoir accordé sa confiance.

L'équipe de recherche tient à exprimer toute sa reconnaissance envers les membres du Comité d'accompagnement qui, par leur contribution, ont permis de mener à bien les missions prévues dans le cadre du projet de recherche par l'intermédiaire de comités de suivi, de réunions de groupe de travail, d'entrevues et de relectures :

BRAGARD	Claude	ASBL Corder/UCLouvain
CUVELIER	Christine	SPW-DGARNE-DEMNA-DEE
DELAUNOIS	Philippe	SPW-DGARNE-DD-DRD
VANDERSTEEN	Joëlle	CABINET DU MINISTRE DE L'ENVIRONNEMENT
GODEAUX	Denis	SPW-DGARNE-DEE-CIAE
JANSSENS	Laurence	ASBL Corder
MISERQUE	Olivier	SPW-DGARNE-DEMNA-DAEA
NADIN	Pierre	SPF-SPSCAE
VAN BOL	Vincent	SPF-SPSCAE

Nous tenons également à remercier Yannick Agnan, de la faculté AGRO et professeur à l'UCL, ainsi que Daniel Drimmer, ingénieur en géosciences et environnement, pour leur contribution à la réflexion menée lors de la conception du modèle.

Nous exprimons enfin notre gratitude à l'équipe de l'ASBL Corder pour son soutien, ainsi qu'à toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à l'élaboration de cette étude.

Abréviations

PPP	Produit phytopharmaceutique
SA	Substance active
NAPAN	National Actie Plan d'Action Nationale
PWRP	Programme wallon de réduction des pesticides
EPA	Agence de Protection de l'Environnement
SIGeC	Système Intégré de Gestion et de Contrôle
PAC	Politique Agricole Commune
IRG	Indice de Risque Global
MT	Milieu Terrestre
SC	Sol Cultivé
T	Toxicité
B	Bioaccumulation
Q	Quantité utilisée
M	Mobilité
P	Persistante
SSD	Distribution de la Sensibilité des Espèces
IPT	Indice du Potentiel de Toxicité
BCF	Facteur de Bioconcentration
BAF	Facteur de Bioaccumulation
BMF	Facteur de Biomagnification
QSAR	Quantitative Structure-Activity Relationship
I	Facteur d'Interception
FE	Facteur d'Exposition
SID	Superficie Impactée à la Dose de référence
IRN	Indice de Risque Normalisé
IRP	Indice de Risque Potentiel
IRA	Indice de Risque Agrégé
MO	Teneur en Matière Organique

1 État des lieux des indices et indicateurs³ existants

1.1 Contexte de développement et d'évolution des indices de suivi des pesticides

Dès l'après-guerre, l'introduction des pesticides de synthèse a transformé l'agriculture en menant à l'augmentation des rendements. Toutefois, la prise de conscience des effets négatifs des PPP, notamment avec la publication du livre Silent Spring de Rachel Carson en 1962, a conduit à la mise en place de mesures réglementaires plus strictes, à l'image de la création de l'Agence de Protection de l'Environnement (EPA) aux États-Unis en 1970 et de l'émergence progressive d'un cadre réglementaire en Europe [1].

Les premières approches d'évaluation des risques dans les années 1960 se sont concentrées sur les propriétés physico-chimiques et toxicologiques des s.a., aboutissant aux modèles QSAR. Les années 1980 ont vu le développement de modèles mathématiques de transfert des pesticides dans l'environnement, posant les bases des outils d'évaluation actuels.

L'Europe a consolidé son cadre réglementaire avec la Directive 91/414/CEE en 1991, introduisant des critères d'autorisation de mise sur le marché plus stricts qui ont conduit à une réduction significative du nombre de s.a. disponibles [2]. Parallèlement, plusieurs États membres ont mis en place des plans nationaux de réduction des pesticides, à commencer par le Danemark en 1986, suivi par d'autres pays, dont la Belgique en 2005. Dans ce contexte, le besoin d'évaluer l'efficacité des politiques publiques a conduit au développement d'indices de suivi allant au-delà du simple suivi des quantités de pesticides vendues. Au Danemark, un Indice de Fréquence de Traitement (IFT) a été mis en place, basé sur les s.a. vendues afin de mieux refléter l'intensité d'utilisation des pesticides [3]. En Belgique, l'indicateur de risque PRIBEL, dérivé de POCER, a été adopté en 2005 pour mesurer l'impact des politiques de réduction des pesticides [4]. Toutefois, son utilisation n'a pas été maintenue par la suite.

L'harmonisation européenne s'est poursuivie avec le règlement REACH en 2007 et le Paquet Pesticides en 2009, établissant un cadre réglementaire renforcé et favorisant la collecte de données harmonisées. Plus récemment, la Directive (UE) 2019/782 a introduit des indicateurs de risque harmonisés (HRI1 et HRI2) afin d'évaluer l'impact des produits phytopharmaceutiques à l'échelle européenne [5]. Toutefois, leur pertinence fait aujourd'hui l'objet de débats et de remises en question [6]. En Belgique, le NAPAN (Nationaal Actie Plan d'Action National) a été mis en place en 2013. Il englobe le deuxième programme fédéral de réduction des pesticides, qui a remplacé l'Arrêté Royal du 22 février 2005, ainsi que les plans régionaux, dont le PWRP (Plan Wallon de Réduction des Pesticides). Depuis 2013, trois plans d'action successifs ont été adoptés au niveau wallon, chacun d'une durée de cinq ans. Cependant, à ce jour, le suivi de ces plans repose uniquement sur les quantités de pesticides vendues et utilisées, un indicateur jugé insuffisant pour évaluer l'évolution réelle du risque associé à leur usage.

1.2 Classification des indices et indicateurs liés aux pesticides

La diversité des indicateurs et indices de suivi des pesticides résulte de la multiplicité des objectifs poursuivis, des échelles spatiales et temporelles étudiées ainsi que des données disponibles. Afin de

³ Il convient de faire la différence entre un indicateur, variable chiffrée qui permet de suivre l'évolution d'un système, et un indice, qui est une mesure ou une représentation numérique qui synthétise et résume l'information provenant de plusieurs variables et/ou indicateurs différents. Ce document se tient à cette différence. Toutefois, une certaine ambiguïté persiste dans la littérature, et certains indices sont dénommés indicateurs.

structurer ces approches, on distingue deux grandes catégories : les indices de pression et d'impact [7]. Chacun de ces types d'indices repose sur des objectifs spécifiques qui reflètent différents aspects de l'évaluation du risque lié aux produits phytopharmaceutiques :

1) Les indices de pression

Les indices de pression visent à quantifier l'intensité d'usage des PPP sans tenir compte de leurs impacts potentiels sur l'environnement. Ils reposent sur des données telles que le nombre de traitements, les doses d'application et les quantités de s.a. utilisées ou commercialisées. Certains de ces indices permettent une répartition selon des critères spécifiques (type de culture, région, nature des substances, etc.). Lorsque les quantités de s.a. sont rapportées à une dose de référence (ex. : Nombre de Doses Unités – NODU, Indice de Fréquence de Traitement – IFT), ces indices offrent une mesure de la dépendance des agriculteurs aux pesticides [3]. Ces outils sont donc particulièrement pertinents pour suivre l'évolution des pratiques agricoles.

2) Les indices d'impact

En combinant des données d'utilisation des PPP avec leurs propriétés physico-chimiques et écotoxicologiques, les indices d'impact caractérisent les effets potentiels des PPP sur l'environnement et/ou la santé humaine. Deux approches principales structurent ces indices [8], [9] :

a) Les indices basés sur des scores :

Ces indices attribuent une note aux s.a. en fonction de plusieurs variables liées aux propriétés physico-chimiques et toxicologiques et aux conditions d'applications. Chaque substance reçoit un score spécifique, et le risque global est estimé en pondérant ces scores par les quantités appliquées ou les doses d'application. Un exemple est le Pesticide Load Indicator (PLI) développé au Danemark, qui classe les s.a. selon leur impact potentiel sur différents compartiments [10].

b) Les indices basés sur une approche quantitative du risque :

Ces indices permettent une évaluation plus fine de l'exposition aux pesticides en s'appuyant sur des modèles de transfert et de dégradation des s.a. dans l'environnement. Contrairement aux indices fondés sur des scores simples, ces outils — de complexité variable — simulent les processus physiques de déplacement des pesticides (infiltration, volatilisation, ruissellement, etc.), afin d'estimer les flux entre la quantité appliquée et celle réellement transférée vers différents compartiments environnementaux. Parmi les indices utilisant cette approche, on peut citer SYNOPS (utilisé en Allemagne) [11] ou POCER [12] (développé par l'Université de Gand). Ces outils reposent notamment sur des modèles de transfert reconnus tels que PRZM, PESTLA, PEARL, GLEAMS, SWAT, et bien d'autres.

De nombreux indices basés sur le score adoptent une approche hybride, en intégrant des scores issus de modèles de transfert pour établir une notation simplifiée, fondée sur des scénarios prédéfinis qui ne sont pas ajustés en fonction des conditions réelles d'application. C'est le cas du Quotient d'Impact Environnemental (QIE) [13] développé aux États-Unis, qui utilise le modèle GLEAMS pour estimer le potentiel de lessivage, ou encore *l'Indicateur de Risque du Québec* (IRPeQ) [14], qui repose sur des ratios exposition-toxicité établis à partir d'équations de transfert simplifiées et conservatrices. Ces outils permettent une estimation semi-quantitative du risque, mais conservent une approche basée sur le score.

Les indices de pression, et plus particulièrement ceux évaluant la dépendance aux pesticides, permettent d'analyser les pratiques des agriculteurs en matière de gestion phytosanitaire. À l'inverse, les indices d'impact ne mesurent pas cette dépendance, mais visent à quantifier les risques environnementaux liés à l'usage des pesticides. Complémentaires, ces deux catégories d'indices contribuent à une évaluation globale du risque environnemental.

Pour appréhender le risque, différentes approches méthodologiques ont été développées, avec leurs avantages et leurs inconvénients (Tableau 1). Les indices basés sur des scores sont plus simples à mettre en œuvre et nécessitent peu de données, ce qui les rend facilement adoptables par divers acteurs. Cependant, le système de classification entraîne une perte de précision et ne permet pas toujours de refléter le risque de manière proportionnelle [15]. En revanche, les indices fondés sur une évaluation quantitative du risque, bien que plus précis et objectifs, exigent souvent plus de données sur les conditions réelles d'application et leurs résultats sont plus difficiles à vulgariser. Le tableau suivant résume les avantages et inconvénients de ces deux approches.

Tableau 1 : Comparaison des avantages et des inconvénients des différentes conceptions d'indices de risque liés aux pesticides

Type d'indice	Basé sur des scores	Basé sur le risque
Fonctionnement	<i>Établissement de « scores » indépendants des conditions réelles d'application pour les différentes variables impliquées et combinaison de ces scores pour obtenir un score global.</i>	<i>Evaluation précise de l'exposition et combinaison de celle-ci par la toxicité.</i>
Avantages	<i>Facile à appliquer, généralisable, nécessite peu de données, simple à communiquer</i>	<i>Évaluation plus précise et complète du risque, approche objective et transparente</i>
Inconvénients	<i>Moins précis, non proportionnel au risque réel, conditions réelles peu prises en compte</i>	<i>Exigeant en données, plus difficile à mettre en œuvre et à généraliser</i>

2 Présentation des sources de données

2.1 Quantités de PPP utilisés

Les données exactes des quantités de s.a. utilisées par culture ne sont pas disponibles à l'échelle régionale. Aussi, une méthode d'extrapolation sur base d'un échantillon représentatif d'exploitations agricoles sélectionné par la Direction de l'Analyse Économique Agricole (DAEA) a été réalisée [16]. Cette extrapolation a permis d'estimer les quantités de s.a. appliquées en Région wallonne pour 16 secteurs agricoles.

2.2 Données du parcellaire agricole

Le Système Intégré de Gestion et de Contrôle (SIGeC) est un outil mis en place dans le cadre de la Politique Agricole Commune (PAC) pour gérer et contrôler les aides accordées aux agriculteurs. Il inclut une composante cartographique, qui permet aux agriculteurs de déclarer les cultures établies sur chaque parcelle.

Depuis la digitalisation du processus en 2015, les déclarations de superficie se font en ligne et les parcelles sont géoréférencées avec précision. Par ailleurs, les parcelles gérées en agriculture biologique sont également déclarées dans le SIGeC. Toutefois, certaines surfaces certifiées bio peuvent ne pas être reprises dans le SIGeC, notamment si elles sont notifiées après les délais de déclaration ou si elles ne font pas l'objet d'une demande d'aide. Malgré cela, environ 97 % des surfaces bio recensées par Biowallonie sont identifiables dans le SIGeC, ce qui indique la bonne couverture spatiale des cultures biologiques au sein du parcellaire agricole.

2.3 Données météorologiques de PAMESEB

Le réseau Pameseb, géré par le Centre wallon de Recherches agronomiques, constitue une infrastructure de collecte de données météorologiques en Wallonie [17]. Composé de 32 stations réparties sur l'ensemble du territoire, il fournit des mesures de température, d'humidité de l'air, de précipitations, de température du sol à différentes profondeurs, de vitesse et direction du vent, d'ensoleillement et d'humectation du feuillage. Ces données sont accessibles via la plateforme Agromet.be.

2.4 Données sur les propriétés des pesticides

La PPDB, ou Pesticide Properties DataBase, est une base de données qui rassemble des informations sur les caractéristiques des s.a. utilisées dans les produits phytosanitaires [18]. Elle fournit des données relatives aux propriétés physico-chimiques, écotoxicologiques et environnementales des pesticides.

Les données qu'elle contient proviennent de différentes sources, notamment de la littérature scientifique, des rapports d'agences de régulation européennes comme l'EFSA, ou encore de documents d'homologation issus des autorités nationales et internationales.

2.5 Données pédologiques, géologiques et hydrologiques spatialisées

2.5.1 Le taux de carbone organique du sol

Les données relatives au taux de carbone organique du sol sont issues de la cartographie des teneurs moyennes en carbone organique total (COT) des sols agricoles en Wallonie pour la période 2015-2019

du Service public de Wallonie [19]. Les données produites sont des couches raster, représentant les teneurs moyennes prédictes en COT exprimées en grammes de carbone par kilogramme de terre sèche. Ces valeurs correspondent à la teneur moyenne en carbone organique mesurée dans la couche arable des sols, soit de 0 à 30 cm de profondeur.

2.5.2 Modèle numérique des pentes

Le modèle numérique des pentes représente une cartographie des pentes du territoire wallon, dérivée du Modèle Numérique de Terrain Lidar acquis par le Service public de Wallonie entre 2012 et 2014 [20]. Le modèle de pente produit une couche raster à résolution fine (1 mètre), exprimant la pente moyenne du sol en pourcentage, calculé à partir des variations d'altitude entre les points voisins. Il s'agit d'une représentation de l'inclinaison du sol, qui conserve les microreliefs statistiquement significatifs (talus, fossés, dépressions), tout en atténuant les irrégularités dues aux erreurs de mesure ou aux structures temporaires (comme les sillons de labour).

2.5.3 Teneurs en eau des sols agricoles wallons et conductivité hydraulique proche de la saturation

Les données « Propriétés hydrauliques – Teneurs en eau des sols wallons et conductivité hydraulique proche de la saturation » du Service public de Wallonie fournissent une cartographie détaillée des propriétés hydrauliques des sols agricoles de Wallonie [21]. Les paramètres hydrauliques modélisés incluent les teneurs en eau à saturation (porosité totale), à la capacité au champ, au point de flétrissement, pour le sol séché à l'air, ainsi que la conductivité hydraulique proche de la saturation.

2.5.4 Épaisseur de la zone non saturée - profondeur de l'aquifère

L'« Épaisseur de la zone non saturée – profondeur de l'aquifère » est une couche de donnée qui fournit une cartographie estimative de l'épaisseur de la zone non saturée dans le premier horizon géologique rencontré en Wallonie [22]. Cette zone, située entre la surface du sol et la nappe phréatique, joue un rôle crucial dans la filtration de l'eau et la protection des ressources souterraines contre les pollutions diffuses. Cette cartographie repose sur une reconstruction géospatiale à partir de données hétérogènes, selon cinq niveaux de précision ou de fiabilité. Ces niveaux vont de calculs appuyés sur des cartes piézométriques réelles ou modélisées (classes 4 et 5), à des extrapolations basées sur des sources ou des valeurs médianes observées (classes 2 et 3), jusqu'à des estimations par jugement d'expert lorsque les données sont rares (classe 1).

2.5.5 Cartes de la couverture du sol

La cartographie « Land Cover » de la base de données Lifewatch-WB fournit une information détaillée sur l'occupation du sol en Wallonie et mise à jour chaque année pour refléter les changements d'occupation du sol. La résolution spatiale des données est de 2 mètres. Ce produit a été développé dans le cadre du projet Lifewatch par l'UCLouvain.

2.5.6 Le facteur d'érodibilité des sols wallons issues de ERRUISSOL

Le facteur K est l'un des cinq paramètres de l'équation universelle des pertes en sol (USLE), utilisée pour estimer l'érosion hydrique des sols. Il représente la sensibilité d'un sol à l'érosion. Sa valeur dépend de caractéristiques du sol telles que la texture, la teneur en matière organique, la structure et la perméabilité. Dans le contexte wallon, le facteur K a été cartographié dans le cadre du projet ERRUISSOL, visant à identifier les zones à risque de ruissellement et d'érosion [23].

3 Hypothèses de travail

Le modèle Phytorisque est un outil d'évaluation du risque environnemental des s.a. utilisées en grandes cultures et en prairies permanentes conventionnelles, conçu pour une application à l'échelle régionale.

Il s'agit d'un modèle hybride, combinant à la fois des modèles mécanistiques reconnus et des approches empiriques et statistiques. Bien qu'il s'appuie sur des concepts théoriques solides, il intègre des simplifications méthodologiques rendues nécessaires pour garantir une mise en œuvre concrète. Le Phytorisque a ainsi été développé de manière à reconnaître la complexité des systèmes environnementaux tout en l'abordant à travers des hypothèses simplificatrices justifiées, portant sur les conditions du système étudié et les processus retenus. Ces simplifications ont été choisies pour faciliter la compréhension et l'appropriation par les parties prenantes, mais aussi pour permettre une application à grande échelle, même en l'absence de données localisées.

Le modèle ne cherche donc pas à prédire des concentrations absolues dans l'environnement, mais vise plutôt à fournir des ordres de grandeur réalistes des transferts de s.a. entre les différents compartiments environnementaux et un indice de risque relatif pertinent.

4 Méthodologie

4.1 Principe général du modèle Phytorisque

4.1.1 Objectifs du Phytorisque

Le Phytorisque est une boîte à outils conçue pour diagnostiquer les risques liés à l'utilisation des pesticides en agriculture, en particulier en grandes cultures, sur différents compartiments de l'environnement. Il propose un ensemble d'indices permettant d'évaluer à la fois l'exposition et la sensibilité des écosystèmes environnementaux aux s.a. utilisées chaque année en grandes cultures en Wallonie. L'outil Phytorisque poursuit un triple objectif :

1) Suivre l'évolution temporelle du risque environnemental lié à l'utilisation de s.a. en grandes cultures en Wallonie :

L'objectif est de mesurer l'évolution du risque que représente l'usage des s.a. en grandes cultures sur différents compartiments de l'environnement, en assurant une comparaison d'année en année. Cette évaluation vise à refléter de manière proportionnée l'évolution du risque, en considérant l'effet des variations interannuelles des conditions climatiques.

2) Identifier les substances les plus à risque pour orienter les actions de réduction :

Il s'agit de repérer, pour une année donnée, les s.a. qui contribuent le plus fortement aux risques environnementaux. Cette identification permet de cibler les s.a. prioritaires à encadrer, afin d'orienter les mesures de gestion vers une réduction efficace et ciblée des risques.

3) Prédire les risques liés aux alternatives dans des scénarios de substitutions :

L'objectif est d'anticiper les effets environnementaux potentiels des substitutions de s.a., avant leur mise en œuvre sur le terrain. Cette approche prospective permet de comparer différents scénarios de remplacement afin d'éviter que certaines alternatives ne génèrent des risques plus élevés pour certains compartiments de l'environnement.

4.1.2 Compartiments de l'environnement analysés

Le modèle évalue différents indices pour quatre compartiments environnementaux :

- 1) Les eaux de surface (ESU)** : Ce compartiment comprend les cours d'eau et les plans d'eau associés aux écosystèmes aquatiques.
- 2) Les eaux souterraines (ESO)** : Ce compartiment englobe l'ensemble des nappes phréatiques, notamment celles utilisées comme sources d'eau potable. Contrairement aux autres compartiments, celui-ci n'est pas directement associé à un écosystème.
- 3) Le milieu terrestre hors des zones cultivées (MT)** : Ce compartiment englobe les écosystèmes terrestres situés en dehors des parcelles cultivées et des milieux aquatiques. Il intègre l'exposition indirecte liée aux déplacements d'espèces vivant en dehors des zones cultivées, mais susceptibles de fréquenter les milieux agricoles.
- 4) Les sols de culture (SC)** : Il concerne exclusivement les sols cultivés et leur biote associé.

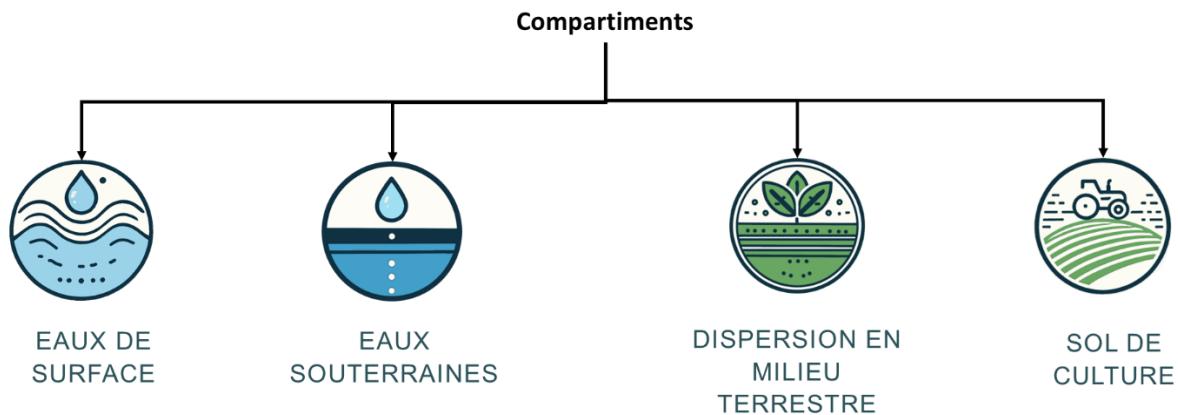


Figure 1 : Compartiments étudiés dans le Phytorisque

4.1.3 Concept méthodologique

L'évaluation du risque environnemental des s.a. composant les PPP repose sur l'analyse de deux composantes : le danger représenté par les s.a. pour les organismes de l'environnement et leur exposition à ces substances. Le danger est calculé par le produit des potentiels de toxicité (T) et de bioaccumulation (B) des s.a. L'exposition est composée du produit de la quantité de s.a. utilisée (Q), de la mobilité (M) et de la persistance (P) de ces dernières dans l'environnement. Ces composantes sont ensuite reprises dans le calcul de l'Indice de Risque (IR), qui représente l'ossature du Phytorisque (équation (1)). Cet indice est calculé pour chaque s.a. et pour chaque compartiment environnemental sur une année donnée.

$$IR = T \cdot B \cdot Q \cdot M \cdot P \quad (1)$$

Où

- *T est le facteur de toxicité de la s.a. pour les organismes non-cibles ;*
- *B est le facteur de bioaccumulation de la s.a. ;*
- *Q est la quantité utilisée de s.a. ;*
- *M est le facteur de mobilité de la s.a. vers les différents compartiments de l'environnement ;*
- *P est le facteur de persistance de la s.a. dans les différents compartiments de l'environnement.*

Cette approche s'applique aux différents compartiments environnementaux, à l'exception des eaux souterraines, qui ne sont pas directement liées à un écosystème. Pour ces dernières, seule l'évaluation de l'exposition est réalisée. L'évaluation conceptuelle du danger et de l'exposition sont repris aux points ci-dessous.

A. Danger des substances actives pour les écosystèmes :

La sensibilité des écosystèmes aux s.a. est évaluée par des indices prenant en compte leur toxicité pour les organismes⁴ (facteur T décrit à la section 4.3) et leur potentiel de bioaccumulation (facteur B décrit à la section 4.4). Ces indices sont calculés à exposition égale pour différentes espèces avant d'être extrapolés à l'ensemble de l'écosystème concerné.

⁴ Ces organismes n'incluent pas les êtres humains

B. Exposition des écosystèmes aux pesticides

L'approche classique d'évaluation du risque lié aux pesticides repose sur l'estimation de la concentration environnementale prédictive (PEC, Predicted Environmental Concentration), c'est-à-dire la concentration attendue d'une substance dans un compartiment donné. Cette valeur est ensuite comparée à des seuils de toxicité pour déterminer le niveau de risque. Toutefois, cette approche présente plusieurs limites, tant sur le plan méthodologique que conceptuel :

- **Contraintes liées aux données disponibles**

Le modèle Phytorisque se base sur les quantités de pesticides appliquées à l'échelle régionale, mais ne dispose pas de données précises sur la localisation exacte ni sur la date d'application. En l'absence de ces informations, il est impossible d'estimer une concentration environnementale prédictive, car celle-ci dépendrait d'une distribution spatiotemporelle des données d'utilisation, inconnue à ce jour.

- **Difficultés pratiques liées à la définition d'un volume de référence**

Le calcul d'une concentration nécessite de définir le volume du milieu récepteur. Or, dans les milieux naturels, cette dimension est extrêmement variable : un pesticide présent dans un lac, un ruisseau ou un fleuve se répartira dans des volumes très différents, rendant toute estimation cohérente difficile. De plus, ces volumes fluctuent selon les conditions hydrologiques (qui varient en fonction du temps), ce qui complique davantage le calcul d'une concentration représentative.

- **Limites conceptuelles de la concentration comme indicateur unique de l'exposition**

L'exposition d'un écosystème à un pesticide ne se résume pas à sa concentration locale et momentanée. Elle dépend également de la quantité totale introduite et de la durée d'exposition. Pour illustrer cette complexité, comparons deux scénarios opposés où la même quantité de pesticide est appliquée :

- Application unique sur une parcelle → Génère des pics de concentration élevés, mais avec une exposition localisée et temporaire ;
- Applications fractionnées et sur plusieurs parcelles → Produit des concentrations plus faibles, mais une exposition chronique et spatialement plus étendue.

En ne considérant que la concentration instantanée pour évaluer le niveau d'exposition, le premier scénario semble moins favorable que le second. La comparaison du risque global entre ces deux situations n'est toutefois pas triviale. D'une part, la relation entre toxicité et concentration n'est pas linéaire : à faibles doses, les organismes activent des mécanismes de défense (excrétion, détoxification), tandis qu'au-delà d'un seuil critique, la toxicité s'intensifie jusqu'à saturation des défenses naturelles. D'autre part, une exposition prolongée, même à faible dose, peut altérer des fonctions physiologiques essentielles (ex. reproduction), compromettant la résilience des populations et perturbant l'équilibre des écosystèmes à moyen et long terme.

Enfin, l'accumulation progressive doit être prise en compte. Une application à faible concentration peut s'additionner aux apports successifs d'une même substance sur différentes parcelles. Cela entraîne un transfert et une dispersion vers un même compartiment environnemental, rendant l'évaluation basée uniquement sur la concentration inadaptée.

Compte tenu de ces limites, le modèle Phytorisque adopte une approche alternative où le risque environnemental est évalué en fonction de la quantité totale de pesticide transférée aux écosystèmes. Cette méthodologie offre plusieurs avantages :

- Elle s'affranchit des incertitudes liées aux variations spatiotemporelles de concentration, en considérant les flux de s.a. à l'échelle des grands ensembles écologiques, plutôt que des valeurs de concentration ponctuelles difficiles à quantifier.
- Elle reflète mieux les dynamiques d'exposition réelle, notamment les effets différés des faibles doses s'étendant sur de longues périodes.

L'exposition se compose alors de trois facteurs : la quantité de s.a. appliquées sur les parcelles cultivées (facteur Q décrit à la section 4.5), la mobilité de ces s.a. vers les différents compartiments de l'environnement (facteur M décrit à la section 4.6) et enfin, la persistance des s.a. dans les compartiments atteints (facteur P décrit à la section 4.7).

En privilégiant une approche basée sur les flux de contamination plutôt que sur les concentrations instantanées, le Phytorisque propose une évaluation plus cohérente et pragmatique du risque environnemental lié aux pesticides.

4.2 Évaluation des conditions hydropédologiques et géographiques selon un scénario du plus probable.

Le comportement des s.a. dans l'environnement dépend fortement des conditions dans lesquelles elles sont appliquées. Des facteurs tels que la météorologie, les caractéristiques des sols, l'hydrologie ou encore la topographie influencent non seulement leur transfert et leur dispersion, mais également leur persistance dans les différents compartiments environnementaux où elles se retrouvent.

Or, la base de données utilisée pour estimer les quantités de s.a. en Wallonie dans les secteurs des grandes cultures et des prairies ne fournit pas d'informations précises sur la localisation de leur application. À l'échelle régionale et même au sein d'un même bassin versant, les conditions pédologiques, hydrologiques et géographiques peuvent varier considérablement d'une parcelle à l'autre, rendant difficile une évaluation homogène du risque.

Pour surmonter cette hétérogénéité, l'outil Phytorisque adopte une approche probabiliste, qui permet de paramétriser les conditions d'application en fonction des situations les plus probables. Contrairement à une approche fondée sur un scénario de type "worst case", cette méthode vise à représenter la réalité de terrain de manière plus équilibrée.

En effet, bien que les scénarios de pire cas puissent être pertinents pour déterminer si une substance présente un risque indépendamment des conditions d'application, ils montrent leurs limites dans le cadre d'une analyse comparative entre s.a. Se fonder exclusivement sur un scénario extrême peut fausser l'évaluation : certains produits apparaîtront exagérément à risque parce qu'ils sont sensibles à des conditions très défavorables, tandis que d'autres, problématiques dans des situations plus courantes, seront sous-évalués. Ce biais peut mener à une hiérarchisation du risque peu représentative et disproportionnée, amplifiant l'effet de variables très discriminantes dans des contextes extrêmes, mais beaucoup moins influents dans des conditions réalistes.

4.2.1 Méthodologie de paramétrisation des conditions environnementales

La prise en compte des paramètres hydropédologiques et topographiques dans l'approche probabiliste de Phytorisque repose sur deux étapes principales :

1. Extraction des paramètres pour les grandes cultures et prairies permanentes

Les matrices associées aux différents paramètres environnementaux sont d'abord découpées à l'aide de masques spécifiques représentant, d'une part, les grandes cultures en agriculture conventionnelle, et d'autre part, les prairies permanentes en agriculture conventionnelle. Cette étape permet de distinguer les zones selon ces deux types de cultures.

2. Calcul de statistiques pour la Région wallonne

Dans un second temps, des statistiques (moyenne, variance, etc.) sont calculées pour chaque paramètre environnemental, à l'échelle de la région agricole. Ces statistiques sont déclinées par type cultural (grandes cultures ou prairie permanente).

4.3 Facteur T : la toxicité

4.3.1 Concepts méthodologiques

Le Facteur T vise à quantifier la toxicité des s.a. sur les organismes non-cibles appartenant aux différents compartiments environnementaux. Dans le contexte d'une évaluation globale du risque, il faut privilégier une analyse à l'échelle des écosystèmes plutôt que sur des espèces isolées. Pour ce faire, ce facteur s'appuie sur une approche probabiliste, la Distribution de la Sensibilité des Espèces (SSD), introduite par Kooijman en 1987 [24] et approfondie par Aldenberg et Slob en 1993 [25]. Cette approche détermine un seuil de concentration d'une substance en dessous duquel 95 % des espèces d'un écosystème ne sont pas impactées. Cette méthode a l'avantage de prendre en compte la diversité de sensibilité entre espèces plus ou moins résistantes, et offre ainsi une estimation plus représentative de la vulnérabilité d'un écosystème.

Une difficulté principale dans l'évaluation de la toxicité des s.a. est la faible disponibilité de données toxicologiques. Cette absence de données complique la comparaison des s.a. entre elles et rend difficile une évaluation exhaustive du danger posé par l'ensemble des pesticides utilisés. Pour pallier ces lacunes, différentes méthodes de substitution au départ de valeurs de toxicité d'autres espèces disponibles peuvent être employées, comme une imputation⁵ moyenne ou multiple ou encore l'utilisation de la valeur la plus défavorable. Cependant, ces approches introduisent inévitablement des biais. L'imputation génère des valeurs de toxicité artificielles, et le recours systématique à la situation la plus défavorable peut conduire à une estimation de la toxicité davantage conditionnée par la disponibilité des données que par la dangerosité réelle des substances.

Face à ces limites, le facteur T a été construit en suivant les deux principes méthodologiques suivants :

- **Proportionnalité de la toxicité sur une échelle continue :** L'utilisation d'une échelle continue permet de représenter la toxicité de manière proportionnelle, c'est-à-dire que les différences entre les valeurs traduisent fidèlement les écarts réels de toxicité entre substances. Cette approche évite les ruptures arbitraires liées aux classements catégoriels et permet d'exprimer les variations de toxicité sur un spectre gradué, où chaque variation numérique correspond à une variation significative et mesurable de l'effet toxique. Cela assure une meilleure cohérence dans l'agrégation des données et dans l'évaluation du risque global, en respectant la continuité et les rapports réels entre les différentes substances.
- **Prise en compte de l'incertitude liée aux données manquantes :** L'utilisation d'une substance dont les effets environnementaux sont mal connus représente un risque en tant que tel. Ainsi, ce facteur inclut un coefficient supplémentaire lié à cette incertitude.

La méthode développée ci-dessous combine plusieurs approches existantes et exploite les données écotoxicologiques issues de la PPDB. Les sections suivantes présentent les étapes du calcul du potentiel de toxicité. Ce potentiel de toxicité peut également être transformé en un Indice du Potentiel de Toxicité (IPT) afin de faciliter l'interprétation des résultats, notamment lors d'une analyse indépendante de l'IRG (voir section 4.8.2.2).

⁵ En statistique, l'imputation désigne le remplacement d'une donnée manquante par une donnée substituée déterminée au départ d'autres données supposées corrélées.

4.3.2 Méthode de calcul du facteur T

4.3.2.1 Sélection des variables de toxicité

Les données disponibles dans la PPDB intègrent des données de toxicité aigües et chroniques. Bien que les données de toxicité chronique soient une information pertinente de la sensibilité des écosystèmes, ces données sont encore très lacunaires. Intégrer ces données créerait un biais dans l'évaluation comparative des s.a., en surestimant systématiquement le potentiel de toxicité des s.a. pour lesquelles des données de toxicité chronique sont disponibles par rapport à celles pour lesquelles ce n'est pas le cas. Il a donc été décidé de se limiter aux données de toxicité aiguë pour l'évaluation du potentiel de toxicité. Ces tests mesurent la concentration ou la quantité de s.a. ingérée induisant la mort ou altérant une fonction biologique essentielle pour 50% des individus de l'espèce considérée. Dès lors, au plus cette valeur est faible, au plus la s.a. est toxique pour l'espèce considérée.

4.3.2.2 Standardisation des variables écotoxicologiques

Pour assurer une comparabilité entre les différents tests toxicologiques, les variables écotoxicologiques sont standardisées en les divisant par des seuils de référence, définis comme correspondant à un risque toxicologique faible [18]. Ces valeurs de références proviennent principalement de classifications réglementaires des s.a., notamment dans le cadre du règlement CLP (Classification, Labelling and Packaging) [26]. Elles sont issues de différentes sources réglementaires internationales, notamment des agences comme l'EPA (États-Unis), la FAO (Organisation des Nations Unies pour l'alimentation et l'agriculture), l'OCDE et l'EFSA (Autorité européenne de sécurité des aliments). Elles sont établies dans un cadre méthodologique standardisé, basé sur une exposition contrôlée et normalisée.

$$\frac{a_k}{a(\text{lowrisk})_k} \quad (2)$$

Où

- a_k représente la variable écotoxicologique associée à l'espèce « k » appartenant au taxon « j » ;
- $a(\text{low risk})_k$ représente le seuil écotoxicologique de référence, correspondant à un faible risque toxicologique pour l'espèce k.

4.3.2.3 Potentiel de toxicité taxonomique

Cette étape vise à déterminer un potentiel de toxicité pour chaque taxon « j » en appliquant une transformation inverse des valeurs écotoxicologiques standardisées afin de convertir ces valeurs sur une échelle croissante, où une valeur plus élevée indique une toxicité accrue de la substance.

Dans le cas d'un taxon pour lequel des tests sur plusieurs espèces sont disponibles, la moyenne des potentiels de toxicité de ces espèces est calculée afin d'obtenir une valeur unique pour le taxon correspondant. Cette dernière opération évite d'accorder un poids plus important aux taxons disposant de plusieurs données de base, garantissant ainsi une pondération équitable entre les différentes espèces. Ainsi, pour une substance donnée, le potentiel de toxicité associé à un taxon est donné par l'équation suivante :

$$T_j = \frac{\sum_{k \in j}^n \frac{a(\text{lowrisk})_k}{a_k}}{n_j} \quad (3)$$

Où

- T_j représente le potentiel de toxicité associé au taxon « j » [-] ;
- a_k représente la variable écotoxicologique associée à l'espèce « k » appartenant au taxon « j » ;
- $a(\text{low risk})_k$ représente le seuil écotoxicologique de référence, correspondant à un faible risque toxicologique pour l'espèce k ;
- n_j est le nombre d'espèces appartenant au taxon « j ».

4.3.2.4 Potentiel de toxicité pour un compartiment

Le potentiel de toxicité d'une substance pour un compartiment environnemental est calculé à partir des potentiels de toxicités taxonomiques des espèces associées à l'écosystème du compartiment considéré. Ceux-ci sont repris dans le tableau ci-dessous.

Tableau 2 : Taxons considérés dans l'établissement d'un potentiel de toxicité des compartiments environnementaux

Eau de surface	Milieu terrestre	Sol cultivé
Poissons		
Invertébrés aquatiques (hors crustacés)	Mammifères	
Crustacés	Oiseaux	
Organismes sédimentaires	Pollinisateurs	Vers de terre
Plantes aquatiques		
Algues	Vers de terre	

L'ensemble des potentiels de toxicité taxonomiques associés à un compartiment constitue les variables utilisées pour calculer son potentiel de toxicité global (à l'échelle du compartiment). Conformément au principe de la méthode SSD, la sensibilité des espèces est supposée suivre une distribution log-normale [24]. Ainsi, les potentiels de toxicité taxonomiques sont d'abord transformés en valeurs logarithmiques, puis la moyenne arithmétique de ces valeurs est calculée pour chaque compartiment.

Afin d'intégrer l'incertitude liée à la représentativité des données, la méthodologie adoptée applique une marge d'erreur à la moyenne empirique, calculée selon la loi de Student. Cette approche permet de mieux quantifier l'incertitude associée aux faibles effectifs d'espèces testées et à la variabilité de la sensibilité interspécifique. Ainsi, pour une substance donnée, le potentiel de toxicité d'une substance « i » pour un compartiment « c » est exprimé par l'équation suivante :

$$\text{Log}(T_c) = \frac{\sum_{j \in c}^n \log(T_j)}{n} + CI_c \quad (4)$$

Où

- T_c représente le potentiel de toxicité associé au compartiment « c » [-] ;
- T_j représente le potentiel de toxicité taxonomique associé au taxon « j » [-] ;
- n est le nombre de taxons utilisés pour calculer la moyenne ;
- CI représente le coefficient d'incertitude [-].

Le coefficient d'incertitude (CI) est calculé à partir de l'écart type des potentiels de toxicité spécifique sous leur forme logarithmique et du nombre de taxons utilisés pour effectuer cette moyenne. Ce coefficient se calcule selon la formule suivante :

$$CI_c = t_{\alpha} \cdot \frac{s}{\sqrt{n}} \quad (5)$$

Où

- *s représente l'écart-type de la série des logarithmes des T_j pour un compartiment donné ;*
- *n est le nombre de taxons utilisés pour calculer le potentiel de toxicité associé à un compartiment ;*
- *t_{α} est la valeur critique de la loi de Student disponible dans les tables statistiques, correspondantes à un niveau de confiance de $(1-\alpha)$ et à un degré de liberté $k=n-1$.*

Une diminution du nombre de taxons testés, ou une augmentation de la variabilité des potentiels de toxicité taxonomiques induira un coefficient d'incertitude plus important. Cependant, une surestimation excessive de cette incertitude pourrait conduire à exagérer la toxicité des s.a. pour lesquelles les données sont limitées. Un ajustement du niveau de confiance $(1 - \alpha)$ est donc appliqué. Un niveau de confiance plus faible réduit la marge d'erreur, limitant ainsi l'impact des données manquantes sur la valeur du potentiel. Après plusieurs tests, un niveau de confiance de 80 % a été retenu comme compromis optimal. Ce choix permet de minimiser l'influence des données manquantes, tout en assurant une meilleure interprétation du potentiel toxicologique des s.a. étudiées.

Pour le compartiment des sols cultivés, la toxicité n'a pu être évaluée qu'à partir des tests de toxicité aiguë sur les vers de terre sol (voir Tableau 2), faute de données suffisantes concernant d'autres espèces associées au biote du sol. Étant donné que le calcul du potentiel de toxicité repose sur une seule variable, il n'est pas possible d'y associer un coefficient d'incertitude.

4.3.2.5 Potentiel de toxicité

Afin de garantir que le potentiel de toxicité d'une substance (i) soit proportionnel à la vulnérabilité d'un écosystème face à cette substance, le facteur T est exprimé sous sa forme anti logarithmique.

4.3.3 Limites méthodologiques

Les points d'attention et les limites méthodologiques soulevés dans l'évaluation du potentiel de toxicité du Phytorisque sont les suivants :

- **Potentiel relatif**

D'un point de vue statistique, la validité des résultats est limitée par le faible nombre d'échantillons au sein d'un même compartiment. Toutefois, l'objectif de cette approche n'est pas d'estimer une valeur absolue de toxicité, mais de fournir un indice relatif permettant la comparaison entre substances. L'utilisation d'outils statistiques permet ainsi de quantifier l'incertitude relative, sans attribuer aux valeurs obtenues une signification intrinsèque en dehors du cadre comparatif.

- **Une évaluation à l'échelle de l'écosystème, non de l'espèce**

Le potentiel de toxicité d'une s.a. est évalué à l'échelle d'un écosystème et représente une moyenne globale. Certaines s.a. peuvent néanmoins présenter un risque spécifiquement plus élevé pour une espèce donnée, malgré une valeur moyenne modérée.

Par ailleurs, dans la construction du Phytorisque, l'exposition aux s.a. est supposée identique pour les espèces considérées. Cependant, cette exposition varie selon les espèces, car chacune peut être exposée à des quantités différentes en fonction de ses comportements (consommation d'aliments contaminés, contact direct avec la substance, etc.). L'approche du Phytorisque compare la toxicité intrinsèque des substances en supposant une exposition identique pour toutes les espèces, ce qui permet de construire un indice indépendant des modalités d'exposition.

4.4 Facteur B : la bioaccumulation

4.4.1 Concept méthodologique

Le facteur de bioaccumulation évalue le potentiel de certaines s.a. à s'accumuler dans les organismes vivants, pouvant entraîner des effets biologiques significatifs. Une s.a. présentant un fort potentiel de bioaccumulation est, à exposition et toxicité égales, plus dangereuse pour l'environnement qu'une substance qui ne s'accumule pas [1]. Même à faibles concentrations environnementales, la bioaccumulation peut induire des effets toxiques, affectant la physiologie, la reproduction, la croissance ou la survie des organismes.

Dans l'environnement, les s.a. peuvent être absorbées par les organismes via l'eau, l'air ou les sols contaminés, et pénétrer dans l'organisme par ingestion, respiration ou contact cutané. Une fois assimilées, elles peuvent se répartir différemment dans les tissus des organismes vivants selon leurs propriétés chimiques. Dans les organismes vivants, ces s.a. peuvent également être éliminées par diverses voies métaboliques ou par excrétion. Si leur élimination est plus lente que leur absorption, elles s'accumulent progressivement.

On distingue trois phénomènes, selon les voies d'expositions considérées :

- La bioconcentration, lorsque l'accumulation s'effectue par diffusion passive (respiration et contact cutané) ;
- La bioaccumulation lorsque l'accumulation passive et l'ingestion sont prises en compte ;
- La biomagnification (ou bioamplification), lorsqu'on considère l'augmentation de concentration en s.a. dans les individus le long de la chaîne alimentaire.

Le coefficient de partage octanol-eau (K_{ow}) est une propriété physicochimique souvent utilisée pour évaluer la capacité d'une substance à s'accumuler dans les tissus lipidiques des organismes vivants. En effet, l'octanol est un solvant qui possède une polarité très similaire à celle des lipides.

Cependant, les facteurs de bioconcentration (BCF), de bioaccumulation (BAF) et de biomagnification (BMF) sont considérés comme des indicateurs plus pertinents que le $\log K_{ow}$, car ils tiennent compte des processus biologiques réels, notamment la capacité des organismes à métaboliser et éliminer les s.a. De plus, ils intègrent dans certains cas la biodisponibilité des substances, ce qui permet une évaluation plus précise du risque de bioaccumulation. Ces facteurs peuvent être déterminés par des expérimentations directes ou estimés à l'aide de modèles QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship), qui prédisent le comportement des s.a. en fonction de leur structure moléculaire et de leurs propriétés physico-chimiques. Ce sont donc ces facteurs qui seront utilisés dans le modèle du Phytorisque.

4.4.2 Méthode de calcul du facteur B

Le modèle Phytorisque évalue le potentiel de bioaccumulation des s.a. en se basant sur des modèles QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship). Dans les sols cultivés, le facteur de bioconcentration (BCF) est jugé plus approprié pour estimer l'accumulation des s.a. dans les organismes du sol. En milieu terrestre et dans les eaux de surface, le facteur de biomagnification (BMF) est privilégié, car il appréhende mieux l'accumulation des s.a. dans la chaîne trophique.

Dans le cas du milieu aquatique, le facteur B est estimé à l'aide d'un modèle QSAR d'Arnot et Gobas [27] pour déterminer le BMF chez les poissons d'un niveau trophique supérieur. L'équation utilisée est la suivante :

$$\log \text{BMF}_{\text{poisson}} = (1 - L_B) + \left(\frac{(k_1 \cdot \Phi + (k_D \cdot \beta \cdot \tau \cdot L_D \cdot K_{OW}))}{k_2 + k_E + k_G + k_M} \right) \quad (6)$$

Où

- L_B est la fraction lipidique de l'individu ;
- k_I est le taux d'absorption chimique via la surface respiratoire [j^{-1}] ;
- Φ est la fraction de la concentration totale de la substance chimique dans l'eau qui est librement dissoute et qui peut traverser les membranes de la surface respiratoire ;
- k_D est le taux d'absorption chimique via l'alimentation [j^{-1}] ;
- β est un paramètre obtenu en calibrant le modèle à des données empiriques ;
- τ est le paramètre de dilution trophique ;
- L_D est la fraction lipidique du plus petit organisme dans la chaîne trophique ;
- K_{OW} représente le coefficient de partage octanol-eau de la substance ;
- k_2 est le taux d'élimination chimique via la surface respiratoire [j^{-1}] ;
- k_E est le taux d'excrétion fécale [j^{-1}] ;
- k_G est le taux de dilution par la croissance [j^{-1}] ;
- k_M est le taux de transformation métabolique [j^{-1}].

Dans le cas du milieu terrestre hors culture, le facteur B est estimé par un modèle QSAR de Gobas, Kelly et Arnot [28] qui estime le BMF chez le loup arctique (*Canis lupus*) en tenant compte notamment du coefficient de partage octanol-eau ainsi que du coefficient de partage octanol-air :

$$BMF_{loup} = \frac{k_{diet}}{k_{air} + k_{urine} + k_{bile} + k_{fecal} + k_{milk} + k_{growth} + k_{metabolism}} \quad (7)$$

Où

- k_{diet} représente la constante de taux d'absorption alimentaire [j^{-1}] ;
- Les autres constantes représentent les taux d'élimination du contaminant par les différentes voies existantes (respiration, urine, bile, défécation, lactation, croissance et métabolisme) [j^{-1}].

Dans les milieux terrestres cultivés, le facteur B est évalué en considérant le vers de terre comme organisme modèle. Pflugmacher et al. (1992) ont développé un modèle QSAR [29] pour estimer la bioconcentration (BCF) à partir de la constante de partage octanol-eau.

$$\log \text{BCF}_{vdt} = \begin{cases} 1,098 \cdot \log(K_{ow}) - 2,2917 & \text{si } \log(K_{ow}) \leq 6 \\ 1,098 * 6 - 2.2917 & \text{sinon} \end{cases} \quad (8)$$

Où K_{ow} correspond au coefficient de partage octanol eau.

Une adaptation a été réalisée par rapport au modèle de Pflugmacher et al. (1992), qui a tendance à surévaluer la bioconcentration lorsque le $\log(K_{ow})$ est supérieur à 6. Pour corriger cette surestimation, une valeur maximale du BCF a été attribuée lorsque le $\log(K_{ow})$ est égal à 6, reflétant plus fidèlement le potentiel réel de bioaccumulation.

La bioaccumulation (BCF ou BMF) de chaque s.a. est évaluée au sein des trois compartiments étudiés. Toutefois, l'absence de bioaccumulation ne signifie pas nécessairement l'absence de risque pour les organismes exposés. En effet, bien que la bioaccumulation constitue un facteur aggravant du risque écotoxicologique global, une molécule毒ique peut demeurer dangereuse même si elle ne s'accumule pas dans les organismes. Par ailleurs, les valeurs de ces facteurs peuvent s'étendre sur plusieurs ordres de grandeur, et la réponse des écosystèmes à ces variations n'est pas linéaire. Une relation logarithmique est donc souvent plus appropriée pour mieux refléter ces interactions. Le facteur B représente un facteur d'intensification de la toxicité. Par conséquent, la valeur minimale de ce facteur est fixée à 1, valeur à laquelle il n'y a pas de bioaccumulation.

$$Eau de surface \quad B_{esu}(i) = 1 + \log(1 + BMF(i)_{poisson}) \quad (9)$$

$$Milieu terrestre \quad B_{mt}(i) = 1 + \log(1 + BMF(i)_{loup}) \quad (10)$$

$$Sol cultivé \quad B_{sc}(i) = 1 + \log(1 + BCF(i)_{vdt}) \quad (11)$$

4.5 Facteur Q : la quantité utilisée

Le facteur Q représente l'un des déterminants clés de l'exposition des compartiments environnementaux aux s.a. En effet, plus la quantité de substance appliquée sur les parcelles agricoles est élevée, plus la probabilité d'exposition des organismes des écosystèmes terrestres et aquatiques augmente. Le choix de la variable correspondant au facteur Q dépend toutefois du type d'indice de risque :

- Dans le cadre d'un indice de risque sur l'usage historique des s.a. l'échelle de la Wallonie, le facteur Q correspond aux quantités annuelles de substances appliquées par secteur agricole sur l'ensemble du territoire.
- Pour un indice de risque lié à l'application d'une s.a. sur une culture spécifique, le facteur Q correspond à la dose homologuée pour cette application.

4.5.1 Saison d'application des substances actives

Le devenir environnemental des pesticides dépend fortement de la saison à laquelle ils sont appliqués. En effet, la période d'application influence directement leur potentiel de transfert d'un compartiment environnemental à l'autre (par ruissellement ou lixiviation) ainsi que leur persistance dans ces compartiments. Ces variations sont notamment liées aux conditions climatiques saisonnières (l'humidité des sols, la température moyenne, la pluviométrie, le degré de couverture végétale, etc.).

Afin d'estimer cette variabilité saisonnière, des enquêtes ont été menées auprès de centres de recherche et de centres pilotes. Ces investigations ont permis d'associer à chaque s.a. des périodes d'application ainsi qu'une intensité d'utilisation (faible, moyenne ou forte, selon l'appréciation des experts) propre aux différents secteurs agricoles. Ces données ont ensuite été traduites sous forme de matrices de fréquence d'utilisation, présentées à titre illustratif dans le tableau ci-dessous (Tableau 3).

Tableau 3 : Exemple de l'importance relative de l'utilisation de substances actives par saison et par secteur agricole

Secteur agricole	Substance active (s.a.)	Hiver	Printemps	Été	Automne	Total
Secteur A	A	0	1	0	0	1
	B	0,25	0	0,75	0	1
	C	0,33	0,67	0	0	1
	D	0	0	1	0	1
Secteur B	E	0	0,5	0,5	0	1
	F	0,083	0,167	0	0,75	1
	G	0	0,2	0,2	0,6	1

L'importance relative de l'utilisation d'une s.a. « i » au cours d'une saison « s » ($f_{us}(i)$) est calculée en rapportant la somme pondérée des utilisations mensuelles au cours de la saison à la somme pondérée des utilisations au cours des douze mois de l'année : :

$$f_{us}(i) = \sum_{j \in i}^3 \frac{u_j}{\sum_{j=1}^{12} u_j} \quad (12)$$

Où

- *s est la saison considérée ;*
- *u_j est l'utilisation de la substance pour le mois j (0 : pas d'utilisation ; 1 : faible utilisation ; 2 : utilisation moyenne ; 3 : forte utilisation) ;*
- *n est le nombre de mois considérés [-].*

Par simplification, les mois ont été répartis en saisons selon les quatre trimestres calendaires de l'année (la période du 01/01 au 31/03 correspond donc à l'hiver, celle du 01/04 au 01/07 au printemps, etc.). Enfin, lorsque la donnée sur la période d'application n'a pas été fournie par un expert, une valeur par défaut est utilisée sur base du groupe auquel appartient la substance (fongicides, herbicides, etc.) et du type de culture sur lequel elle a été appliquée (culture de printemps ou culture d'hiver).

4.5.2 Quantités utilisées de substance active par secteur agricole

Les données précises sur les quantités de s.a. utilisées par culture ne sont pas directement disponibles à l'échelle régionale. Afin de pallier ce manque, une méthode d'extrapolation a été appliquée, basée sur les données issues d'un échantillon représentatif d'exploitations agricoles sélectionné par la DAEA [30].

Cette extrapolation repose sur les déclarations d'un panel d'agriculteurs répartis dans 15 secteurs agricoles de grandes cultures ainsi qu'un secteur associé aux prairies permanentes. Les données issues de cet échantillon ont été analysées, extrapolées et redressées afin d'estimer les quantités totales utilisées en culture conventionnelle. Sur cette base, une estimation des quantités de chaque s.a. appliquées a été produite pour 16 secteurs agricoles, à l'échelle de la Région wallonne.

4.5.3 Dose d'application

Lorsque l'analyse porte sur l'évaluation du risque associé à l'usage d'un produit phytopharmaceutique ciblé, pour une culture donnée et une cible identifiée, la dose homologuée pour ce couplage (produit-culture -cible) est privilégiée. Ces informations sont disponibles sur le site officiel Phytoweb⁶.

Lorsque l'analyse ne porte pas sur un produit spécifique, mais vise à comparer le risque associé à différentes s.a. de manière plus générale — par exemple pour comparer le risque entre s.a. lié à leurs usages —, il est nécessaire de définir une *dose de référence (D_{ref})*. Plusieurs modalités sont envisagées pour déterminer cette dose, selon que la culture concernée ou la cible visée est spécifiée ou non, celles-ci sont résumées aux équations suivantes :

⁶ <https://phytoweb.be>

$$Cible et culture spécifiées \quad D_{ref}^{c,k}(i) = \text{MAX}\left(D_h^{c,k}(i,j)\right) \quad (13)$$

$$Cible non spécifiée et culture spécifiée \quad D_{ref}^k(i) = \text{MAX}\left(D_{ref}^{c,k}(i)\right) \quad (14)$$

$$Cible et culture non spécifiées \quad D_{ref}(i) = \frac{\sum Qu(i,k) \cdot D_{ref}^k(i)}{\sum Qu(i,k)} \quad (15)$$

Où

- *MAX $D_h^{c,k}(i,j)$ est la dose maximale autorisée de la s.a. i par application pour un produit j, une cible c et une culture k ;*
- *Qu(i,k) correspond à la quantité utilisée (pour une année donnée) de la substance i sur la culture k.*

Comme le montrent l'équation (13), la dose de référence par substance est basée sur la dose maximale autorisée de la substance pour une application. Ce choix permet d'éviter de prendre comme référence des produits contenant plusieurs s.a., alors que des produits à substance unique existent pour ces mêmes substances. En effet, dans les formulations multisubstances de même nature, chaque substance est généralement présente à une dose inférieure à sa dose maximale autorisée, ce qui pourrait fausser la comparaison entre substances.

Notons que certaines s.a. doivent être appliquées plusieurs fois au cours d'une saison pour assurer un contrôle efficace et durable, tandis que d'autres, plus persistantes, peuvent atteindre le même effet avec une seule application. Dans ces cas particuliers, la dose efficace par application peut apparaître comme biaisée. Toutefois, dans la plupart des situations, la dose réellement efficace correspond généralement à la quantité appliquée lors d'un seul traitement, et non à la dose maximale cumulée autorisée sur l'ensemble du cycle cultural.

Enfin, comme le montre l'équation (15), dans le cas où la culture n'est pas spécifiée, la dose de référence de la substance i correspond à la moyenne pondérée des doses de références de cette substance dans les différentes cultures, en utilisant comme poids les quantités totales de la substance utilisées dans chacune des cultures.

4.6 Facteur M : la mobilité

4.6.1 Concept méthodologique

Le facteur M évalue la mobilité des s.a., soit leur propension à se disperser dans les différents compartiments de l'environnement. Pour les eaux de surface et souterraines, ce facteur estime la probabilité qu'une substance soit transportée depuis sa zone d'application jusqu'au compartiment étudié. Dans le milieu terrestre, le facteur M résulte, d'une part, de la dispersion des s.a. en dehors des zones cultivées et, d'autre part, de l'exposition directe des organismes lorsqu'ils se déplacent sur les cultures traitées pour s'y nourrir ou s'y réfugier. Enfin, dans le compartiment du sol cultivé, ce facteur correspond à la fraction de pesticide appliquée qui n'a pas été interceptée par le couvert végétal de la culture en place.

Les équations suivantes reprennent les variables utilisées pour calculer ce facteur à l'échelle des différents compartiments.

$$\begin{array}{ll} \text{Eau} & M_{eso} = f(I, F_{eso}) \\ \text{souterraine} & \end{array} \quad (16)$$

$$\begin{array}{ll} \text{Eau de surface} & M_{esu} = f(I, F_{esu,pp}, F_{esu,dp}) \\ & \end{array} \quad (17)$$

$$\begin{array}{ll} \text{Milieu} & M_{mt} = f(I, F_{esu,pp}, FE, F_{der}, F_{vol}) \\ \text{terrestre} & \end{array} \quad (18)$$

$$\begin{array}{ll} \text{Sol cultivé} & M_{sc} = f(I) \\ & \end{array} \quad (19)$$

Où

- *I correspond au facteur d'interception par la culture en place ;*
- *F_{eso} correspond au potentiel de transfert par lixiviation dans les eaux souterraines ;*
- *F_{esu,pp} correspond au potentiel de transfert vers les eaux de surface par ruissellement en phase particulaire ;*
- *F_{esu,dp} correspond au potentiel de transfert vers les eaux de surface par ruissellement en phase dissoute ;*
- *FE correspond au facteur d'exposition ;*
- *F_{der} correspond au transfert par dérive aérienne ;*
- *F_{vol} correspond au potentiel de transfert dans l'atmosphère par volatilisation.*

Le facteur *M* associé à chaque compartiment est évalué sur base de l'importance de différents phénomènes de transfert ou de dissipation des s.a. Le modèle Phytorisque prend en considération quatre types de transfert (Figure 2) : le transport par ruissellement (F_{esu}), la lixiviation (F_{eso}), la dérive (F_{der}) et la volatilisation (F_{vol}). Il prend également en compte l'interception des s.a. par le couvert végétal. La méthodologie relative à la modélisation des facteurs de transfert est expliquée dans l'Annexe I.

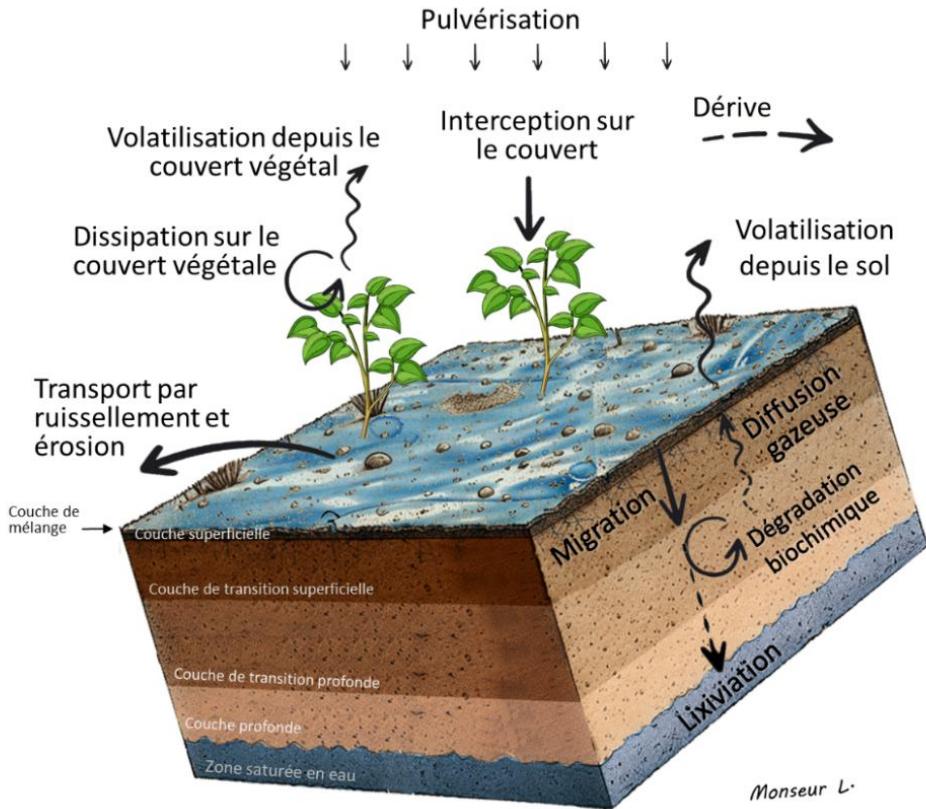


Figure 2 : processus de transfert et de dissipation des substances actives appliquées en grande culture pris en compte dans le modèle Phytosorique

4.6.2 Facteur d'interception

Le facteur d'interception (I) correspond à la fraction de s.a. interceptée par le couvert végétal, qui dépend du stade de développement de la culture et de la saison d'application. De façon générale, ce facteur est minimal à l'émergence de la culture. Il augmente avec le développement du couvert végétal pour atteindre sa valeur maximale lors du stade de maturation de la culture. Au moment de la sénescence/récolte, il diminue à nouveau jusqu'à sa valeur minimale (Figure 3).

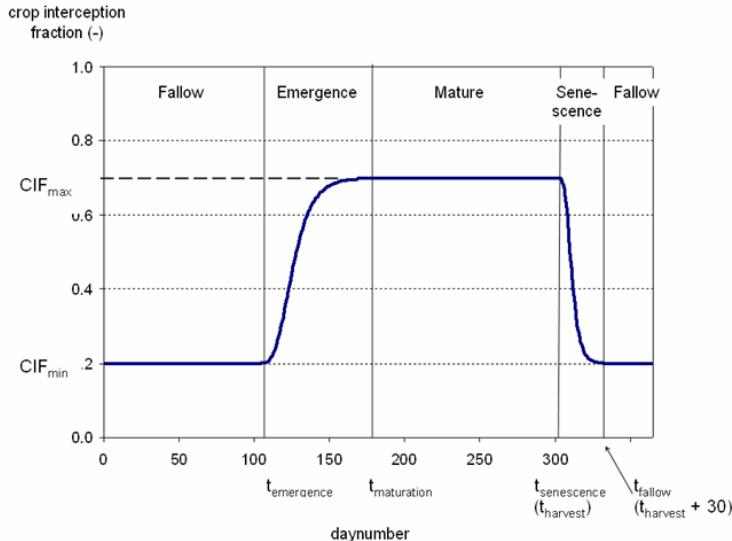


Figure 3 : Modèle d'évolution du facteur d'interception au cours d'un cycle de développement d'une culture [31].

Afin de tenir compte de ce facteur, un tableau reprenant la saisonnalité des stades de développement des cultures a été élaboré à l'aide de calendriers phénologiques issus du modèle HAIR (2010) [31], affiné par les codes BBCH⁷ [32], [33]. Ces tableaux ont été soumis aux centres pilotes selon leurs domaines d'expertise. Ensuite, un facteur d'interception a été attribué pour chaque stade de développement sur base d'un tableau de conversion présenté dans FOCUS [34]. Le Tableau 4 présente un exemple de résultat pour les céréales d'hiver.

Tableau 4 : Exemple de table d'attribution du facteur d'interception aux différents stades de développement des céréales d'hiver.

Date	01-01	01-02	01-03	01-04	01-05	01-06	01-07	01-08	01-09	01-10	01-11	01-12
Nombre de jours	1	32	60	91	121	152	182	213	244	274	305	335
Code BBCH	10-19	20-29	20-29	30-39	30-39	40-69	70-89	70-89	0-09	0-09	10-19	10-19
Facteur d'interception (%)	0	20	20	80	80	90	80	80	0	0	0	0

⁷ Échelle destinée à identifier les stades de développement phénologique d'une plante

4.6.3 Facteur M pour les eaux de surface

Le facteur M, défini pour le compartiment des eaux de surface, représente la fraction du pesticide appliqué sur une parcelle agricole qui est transférée vers les milieux aquatiques. Dans le modèle du Phytorisque, les apports de substance par volatilisation suivie de dépôt atmosphérique sur les cours d'eau sont considérés comme négligeables à l'échelle régionale, en raison de la faible proportion des surfaces en eau par rapport aux terres agricoles dans le paysage wallon.

Par ailleurs, bien que la dérive puisse localement constituer une voie de transfert importante, notamment lorsque les parcelles sont en bordure de cours d'eau, cette contribution est également jugée négligeable à l'échelle du paysage, compte tenu de la distance moyenne relativement importante entre les zones traitées et les milieux aquatiques. Cette hypothèse est d'ailleurs également formulée dans le modèle SYNOPS, dans le contexte paysager suisse [35]. Ainsi, le facteur M reflète essentiellement le potentiel de transfert de la fraction du pesticide non interceptée par le couvert végétal et transportée par ruissellement, sous forme dissoute et particulaire. Il est défini par l'équation :

$$M_{esu} = (1 - I) \cdot F_{esu} \quad (20)$$

Où

- *I désigne le facteur d'interception par la culture [-] ;*
- *F_{esu} est la fraction de substance transportée par ruissellement [-].*

Le facteur d'interception (I) par la culture, défini à la section 4.6.1, dépend de la saison d'application tandis que la fraction transportée par ruissellement est calculée à l'aide de l'équation (58).

4.6.4 Facteur M pour les eaux souterraines

Le facteur M estime la fraction de s.a. non interceptée par le couvert susceptible d'être lixivieré au-delà de deux mètres de profondeur, seuil à partir duquel la substance est considérée comme ayant quitté la zone active du sol, c'est-à-dire la zone encore susceptible de contribuer significativement à sa dégradation biologique :

$$M_{eso} = (1 - I) \cdot F_{eso} \quad (21)$$

Où

- *I désigne le facteur d'interception par la culture [-] ;*
- *F_{eso} est la fraction de substance lixivieré à plus de deux mètres de profondeur de sol [-].*

Dans cette équation, le facteur d'interception par la culture (I), qui dépend de la saison d'application, est défini à la section 4.6.1 et la fraction de s.a. transférée vers les nappes (F_{eso}) est calculée à l'aide de l'équation (111).

4.6.5 Facteur M pour le milieu terrestre

Le facteur M pour le milieu terrestre est construit afin de prendre en compte l'hétérogénéité entre les parcelles agricoles et le milieu environnant. Il nécessite donc de considérer les dynamiques d'interaction entre ces deux milieux, gouvernées par les mécanismes suivants :

- 1. La mobilité écologique.** Les organismes vivants sont susceptibles de se déplacer dans les zones cultivées pour se nourrir ou se réfugier, ce qui conduit à leur exposition directe aux résidus de PPP présents sur les cultures.
- 2. La dispersion dans le milieu terrestre.** Les s.a. peuvent être emportées en dehors des zones de culture sous l'action de la dérive, de la volatilisation après application ou du ruissellement (en Wallonie, on estime que seuls 11,5% des sédiments érodés atteignent les eaux de surface [36], ce qui implique que près de 90% sont redéposés en milieu terrestre).

Le facteur M en milieu terrestre se calcule selon la formule suivante :

$$M_{mt} = FE_1 \cdot I + FE_2 \cdot f_d \quad (22)$$

Où

- *FE₁ correspond au facteur d'exposition écologique associé à la mobilité des organismes terrestres depuis leur zone d'habitat vers les parcelles cultivées [-] ;*
- *I désigne le facteur d'interception par la culture de substances actives [-] ;*
- *FE₂ correspond au facteur d'exposition écologique associé à la dispersion des substances actives dans l'environnement [-].*
- *f_d représente la fraction de substance dispersée ayant migré hors de la zone d'application [-].*

Dans cette équation, le facteur d'interception (*I*) représente la fraction de pesticide appliquée qui est susceptible d'interagir directement avec les organismes du milieu terrestre (hors biote du sol cultivé), en raison de leur mobilité depuis leur habitat naturel vers les zones cultivées (FE₁. *I*). En effet, on émet l'hypothèse que ces organismes interagissent essentiellement avec la fraction de s.a. retenue sur le couvert végétal et non pas avec celle ayant atteint le sol de culture. Le terme de droite (FE₂. *f_d*), quant à lui, exprime l'exposition associée à la dispersion des substances dans l'environnement. En particulier, cette équation fait intervenir les facteurs suivants :

- ***Le facteur d'exposition écologique associé à la mobilité des organismes terrestres depuis leur zone d'habitat vers les parcelles cultivées « FE₁ » :***

Le déplacement des organismes terrestres vers les zones cultivées constitue un mécanisme d'exposition aussi important que la dispersion des s.a.. De nombreuses espèces se déplacent depuis leur habitat vers les parcelles agricoles pour se nourrir, s'abreuver ou trouver refuge.

La probabilité de présence d'organismes dans une parcelle et l'abondance des espèces observées sont fortement corrélées à la proximité des habitats non cultivés et à la connectivité écologique du paysage [37]. Aussi, plus une culture est située à proximité de milieux riches en biodiversité, plus la probabilité d'exposition des espèces non-cibles aux s.a. appliquées augmente.

Pour refléter la diversité des milieux environnants, chaque classe d'occupation du sol est pondérée à l'aide d'un proxy représentant son potentiel écologique moyen. Le potentiel écologique des différentes classes d'occupation du sol a été évalué suivant cinq critères :

- 1) La richesse spécifique attendue ;
- 2) La diversité fonctionnelle attendue ;
- 3) La complexité structurelle de l'habitat ;
- 4) La présence potentielle d'organismes appartenant à différents règnes ;
- 5) Le niveau de pression anthropique sur le milieu.

Un score a été attribué à chacun des 5 critères pour chaque classe d'occupation du sol, assisté par un outil d'intelligence artificielle sur base d'une revue de la littérature. Le proxy global du potentiel écologique de chaque classe d'occupation du sol a ensuite été calculé comme la moyenne de ces 5 scores.

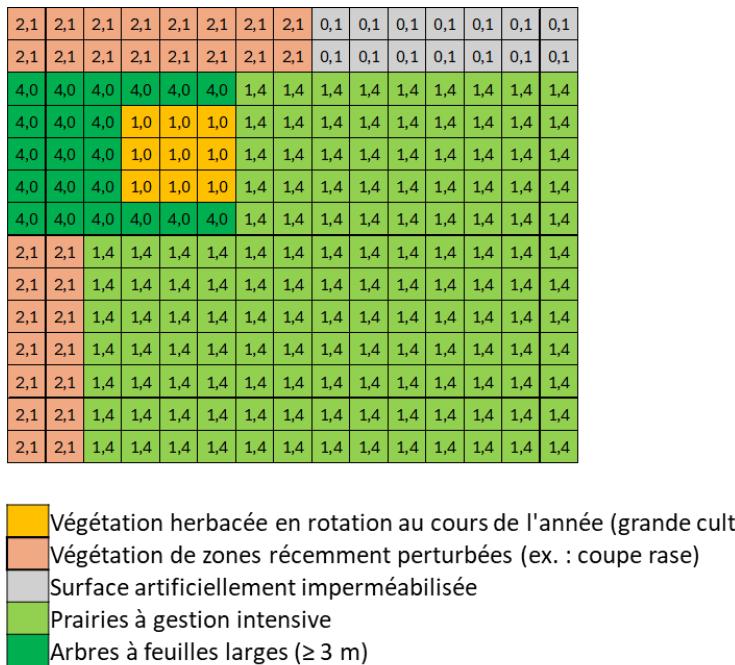


Figure 4 : Schéma conceptuel de la matrice du proxy du potentiel écologique

À partir de la carte d'occupation des sols, une matrice est réalisée en associant à chaque classe d'occupation du sol son proxy du potentiel écologique (Figure 4). Le facteur d'exposition FE_i est calculé par une analyse spatiale effectuée à partir de la carte du proxy du potentiel écologique, en considérant un rayon d'action de 1 km autour des parcelles agricoles concernées (grandes cultures ou prairies permanentes). Ainsi, la contribution relative d'un élément est linéairement dépendante de la distance à laquelle se trouve cet élément par rapport aux zones de traitement. Dès lors, plus l'élément est éloigné, moins sa contribution est importante et au-delà de 1 km, son importance devient nulle (Figure 5).

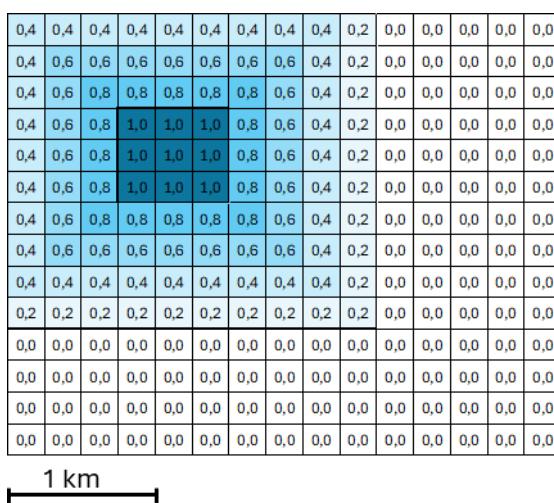


Figure 5 : Schéma conceptuel de la matrice de pondération (w_i) associée à la distance des parcelles cultivées (carré bleu)

Appliquée à une région agricole, cette méthode consiste à délimiter une surface reprenant l'ensemble des parcelles de la région dédié au type cultural (grandes cultures ou prairies permanentes) ainsi que les zones limitrophes jusqu'à 1km autour de celles-ci. Cette surface est découpée en pixel de 5 m, et un poids est appliqué à chaque pixel en fonction de sa classe d'occupation du sol. Le facteur FE_1 est ensuite calculé pour l'ensemble des pixels selon la méthode suivante :

$$FE_1 = \frac{\sum_{i=1}^n P_i \cdot w_i}{\sum_{i=1}^n w_i} \quad (23)$$

Où

- P_i , la valeur du proxy du potentiel écologique de la maille i ;
- w_i , le poids spatial de la maille i (dépendant de sa distance à la zone traitée) ;
- n est le nombre de pixels de la matrice cartographique qui couvre la Région wallonne ;

Le facteur FE_1 d'une parcelle est inférieur à 1 si celle-ci est entourée de zones présentant un potentiel écologique moyen plus faible. Plus les parcelles voisines présentent une valeur écologique supérieure à celle de la parcelle considérée, plus le facteur FE_1 sera élevé.

- ***Le facteur d'exposition écologique associé à la dispersion des substances actives dans l'environnement (FE_2)***

Le facteur d'exposition écologique FE_2 , associé à la dispersion des s.a. dans l'environnement, permet d'évaluer, de façon relative, la sensibilité écologique des milieux situés autour de la zone traitée. Il ne mesure pas l'intensité de l'exposition en soi — qui existe dès qu'il y a dispersion —, mais il renseigne sur le niveau de sensibilité des milieux exposés par rapport à celui des cultures traitées. Une valeur positive de FE_2 indique que les s.a. se dispersent vers des milieux présentant un potentiel écologique plus élevé, ce qui soulève un enjeu écologique accru. Une valeur négative, en revanche, signifie que les milieux exposés sont moins sensibles que les cultures traitées.

Le potentiel écologique des milieux environnants est évalué à partir de la classe d'occupation des sols, selon le même proxy que celui utilisé pour le calcul du facteur FE_1 , décrit ci-dessus. Le facteur d'exposition est ensuite calculé par une analyse spatiale effectuée en considérant un rayon d'action de 1 km autour des parcelles agricoles concernées. Ainsi, la contribution relative d'un élément est linéairement dépendante de la distance à laquelle se trouve cet élément par rapport aux zones de traitement ainsi plus un élément est éloigné, moins sa contribution est importante. Au-delà de 1 km, sa contribution est considérée comme nulle. La matrice de pondération est représentée à la figure suivante :

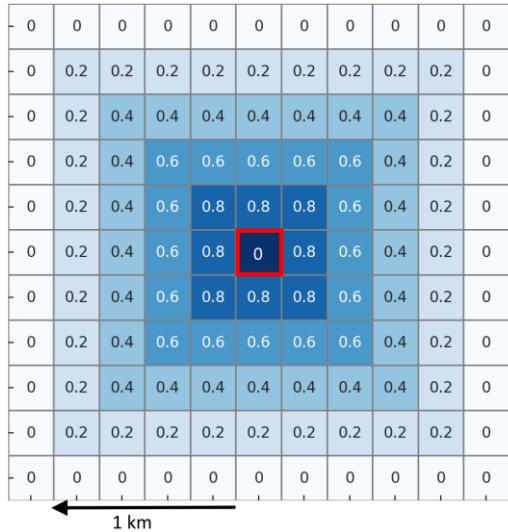


Figure 6 : Schéma conceptuel de la matrice de pondération (w_i) associée à la distance des parcelles cultivées (carré rouge)

Contrairement à la matrice exposée à la Figure 5, les zones de culture se voient attribuer un poids nul afin de n'évaluer que le voisinage de ces zones.

La valeur du facteur d'exposition FE_2 est ensuite évaluée par un calcul matriciel selon la méthode suivante :

$$FE_2 = \text{MAX} \left(\frac{\sum_{i=1}^n P_i \cdot w_i}{P_{tc} \cdot \sum_{i=1}^n w_i} - 1,0 \right) \quad (24)$$

Où

- P_i correspond à la valeur du proxy du potentiel écologique de la maille i ;
- P_{tc} , la valeur du proxy du potentiel écologique de la culture traitée (grandes cultures ou prairies permanentes) ;
- w_i , le poids spatial de la maille i (dépendant de sa distance à la zone traitée) ;
- n est le nombre de pixels de la matrice cartographique qui couvre la Région wallonne.

Un facteur FE_2 égal à zéro implique que les milieux non agricoles avoisinant les cultures présentent un potentiel écologique équivalent ou inférieur au potentiel écologique des zones traitées. Dans ce cas, la dispersion de la s.a. autour de son environnement n'a pas d'impact sur l'exposition globale. En revanche, une valeur supérieure à zéro indique que les milieux avoisinants possèdent un potentiel écologique plus élevé, traduisant un effet accru de l'exposition aux substances dispersées hors de la zone d'application.

Appliquée à une région agricole, cette méthode consiste à délimiter l'ensemble des parcelles dédiées aux grandes cultures ou aux prairies permanentes) et à créer une matrice spatiale couvrant un rayon de 1 km autour de ces parcelles.

- ***La fraction dispersée « f_d » :***

La fraction dispersée désigne la fraction de s.a. transportée hors de la zone traitée sous l'action de différents processus, soit la dérive, la volatilisation et le transport par érosion sous forme particulaire⁸. Elle est obtenue via l'équation suivante :

$$f_d = I \cdot F_{vol,cv} + (1 - I) \cdot (F_{vol,sol} + \gamma \cdot F_{esu,pp}) + F_{der} \quad (25)$$

Où

- *I est la fraction de la quantité appliquée interceptée par le couvert végétal lors de l'application ;*
- *$F_{vol,cv}$ est la fraction totale de pesticide volatilisée depuis le couvert végétal ;*
- *$F_{vol,sol}$ est la fraction totale de pesticide volatilisée depuis le sol ;*
- *γ est un paramètre d'ajustement représentant le rapport entre la fraction de substance transportée par érosion n'atteignant pas les cours d'eau et celle atteignant les cours d'eau. Sa valeur est fixée à 7,7, de manière à refléter qu'en moyenne, seuls 11,5 % des sédiments érodés parviennent aux eaux de surface ;*
- *$F_{esu,pp}$ est la fraction de la substance transportée par ruissellement sous forme particulaire ;*
- *F_{der} est la fraction totale de pesticide transportée par dérive.*

Le facteur d'interception par la culture, qui dépend de la saison d'application, est défini à la section 4.6.1 tandis que

- la fraction totale de pesticide volatilisée depuis le couvert végétal ($F_{vol,cv}$) est définie à l'équation (115) ;
- la fraction totale de pesticide volatilisée depuis le sol ($F_{vol,sol}$) est définie à l'équation (116) ;
- la fraction de la substance transportée par ruissellement sous forme particulaire ($F_{esu,pp}$) est définie à l'équation (92) ;
- la fraction totale de pesticide transportée par dérive (F_{der}) est définie à l'équation (122).

4.6.6 Facteur M pour le compartiment sol cultivé

Le facteur M pour le compartiment sol cultivé est directement équivalent à la fraction non interceptée, étant donné que la fraction de la substance appliquée qui n'est pas interceptée atteint directement le sol cultivé. Ainsi, il peut être exprimé par l'équation suivante :

$$M_{sol} = 1 - I \quad (26)$$

Où *I désigne le facteur d'interception par la culture.*

Le facteur d'interception par la culture, qui dépend de la saison d'application, est défini à la section 4.6.1

⁸ La fraction de s.a. dissoute emportée par l'eau de ruissellement n'est pas considérée, car elle est sensiblement moins retenue par les éléments du paysage. On considère donc qu'elle est entièrement transférée au milieu aquatique.

4.7 Facteur P : la persistance

4.7.1 Concept méthodologique

Le facteur de persistance estime la durée moyenne pendant laquelle une substance demeure dans un des compartiments de l'environnement étudiés. Ce facteur est essentiel dans l'évaluation de l'exposition, car la persistance d'une substance dans un compartiment augmente la probabilité d'interaction avec les organismes qui y résident.

La dissipation des s.a. au sein d'un compartiment environnemental résulte de l'action conjointe de processus biologiques, chimiques et physiques. Ces mécanismes peuvent transformer les s.a. en composés plus simples et généralement moins toxiques, ou les transférer vers d'autres compartiments. Ils conditionnent la persistance des pesticides dans les milieux étudiés. Les principaux processus de dissipation sont :

1) La dégradation biochimique

Ce processus se déroule dans les sols et dans le milieu aquatique. Il implique l'action conjointe des micro-organismes (biodégradation) et de réactions abiotiques. La matière organique, le taux d'oxygène, la température, l'humidité, le pH et la présence de nutriments influencent fortement ce processus.

2) L'hydrolyse

L'hydrolyse est une réaction chimique en milieu aqueux qui décompose les pesticides par rupture de liaisons sous l'effet de l'eau, générant des métabolites plus hydrophiles. Ce processus est modulé par le pH, la température et la présence de catalyseurs.

3) La photolyse en milieu aqueux

Sous l'effet du rayonnement solaire, notamment UV, les pesticides dissous dans l'eau peuvent être dégradés. L'efficacité de ce processus dépend du spectre d'absorption de la molécule, de l'intensité lumineuse, de la profondeur de la colonne d'eau, du pH, et de la présence de substances photosensibilisatrices telles que la matière organique dissoute.

4) La photodégradation

Principalement en surface (feuilles, sol), la photodégradation résulte de l'absorption de la lumière par la s.a., provoquant sa fragmentation. Ce processus dépend de la structure chimique de la molécule, de l'intensité lumineuse et des caractéristiques de la surface exposée.

5) Les processus de transfert (volatilisation, lixiviation et transport par ruissellement)

Si la volatilisation, la lixiviation ou encore le transport par ruissellement ne constitue pas un mécanisme de dégradation en tant que tel, elle entraîne la disparition de la molécule d'un compartiment environnemental par son transfert vers l'atmosphère ou les milieux aquatiques. Ces processus sont influencés par les propriétés physicochimiques des s.a. et les conditions pédoclimatiques.

6) L'oxydation

L'oxydation est un processus chimique par lequel une substance réagit avec des agents oxydants présents dans le sol, l'eau ou l'air. Cette réaction peut modifier la structure de la molécule et faciliter sa dégradation.

4.7.2 Approche cinétique de la persistance

Le facteur de persistance, noté P, correspond à la durée moyenne pendant laquelle une s.a. reste présente dans un compartiment environnemental avant d'être dissipée. La dissipation d'une s.a. est généralement décrite par un modèle cinétique qui décrit l'évolution de sa concentration au cours du temps. Dans le Phytorisque, différents modèles cinétiques sont utilisés selon le compartiment de l'environnement considéré. L'évolution de la fraction d'une substance non dissipée dans un compartiment au cours du temps est donc obtenue suivant une fonction qui peut être généralisée comme suit :

$$f(t) = \frac{C(t)}{C_0} \quad (27)$$

Où

- C_t est la concentration de la substance à l'instant t ;
- C_0 est la concentration initiale de la substance ;
- t est le temps.

Le facteur de persistance correspond alors à l'espérance mathématique de cette fonction, obtenue en calculant son moment d'ordre 1 :

$$P = \int_0^{+\infty} t \cdot f'(t) dt \quad (28)$$

Où $f'(t)$ est la dérivée de la fonction $f(t)$ par rapport au temps

4.7.3 Facteur P pour les eaux souterraines

Les eaux souterraines forment un compartiment fermé en milieu aqueux dans lequel la dégradation des s.a. est principalement gouvernée par l'hydrolyse. La dégradation des s.a. suit donc une cinétique d'ordre 1, décrit par la relation suivante :

$$C(t) = C_0 \cdot e^{-k_{hy,l}(T)t} \quad (29)$$

Où $k_{hy,l}(T)$ est la constante de dégradation par hydrolyse à la température de l'eau [J^{-1}].

Ainsi, la persistance moyenne de la substance dans ce compartiment, obtenue suivant l'équation (28), peut être décrite par l'expression suivante :

$$P_{eso} = \frac{1}{k_{hy,l}(T)} \quad (30)$$

Où $k_{hy,l}(T)$ est la constante de dégradation par hydrolyse à la température de l'eau [J^{-1}].

La constante de dégradation par hydrolyse ($k_{hy,l}$) correspond au taux de dégradation apparent d'une substance en milieu aqueux. Cette constante établit à une température de référence (20°C) peut être

ajustée à la température moyenne des eaux souterraines, estimée à 11°C⁹, à l'aide de l'équation d'Arrhenius. Cette dernière est une formule qui décrit la dépendance de la vitesse d'une réaction chimique à la température :

$$k(T_m) = k(T_{ref}) \cdot e^{\frac{E_a(T_m - T_{ref})}{R \cdot T_m \cdot T_{ref}}} \quad (31)$$

Où

- $k(T_{ref})$ est la constante de dégradation mesurée à la température de référence [J^{-1}] ;
- T_{ref} correspond à la température de référence (293,15 K) ;
- T_m est la température représentative du milieu considéré [K] ;
- R est la constante des gaz parfaits [$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$] ;
- E_a correspond à l'énergie d'activation nécessaire à la réaction.

La valeur de l'énergie d'activation dépend de la s.a., elle varie typiquement entre 50 et 100 kJ/mol pour les réactions biologiques ou chimiques de transformation, l'EFSA recommande d'utiliser une valeur moyenne de 65,4 kJ/mol lorsque cette valeur n'est pas connue[38]. Il est à noter que cette formule est également utilisée pour ajuster les différentes constantes de dégradation d'une substance, en fonction des processus de dégradation présents dans les compartiments étudiés.

4.7.4 Facteur P pour les eaux de surface

Le compartiment des eaux de surfaces est caractérisé comme étant un milieu ouvert, soumis à l'irradiation solaire. Dans ce compartiment, les s.a. peuvent être dissipées par hydrolyse, photolyse ou biodégradation en milieu aqueux. Étant donné le manque de données expérimentales sur la biodégradation en milieu aquatique, le Phytorisque modélise exclusivement sur les processus abiotiques (hydrolyse et photolyse) pour estimer la persistance des s.a. dans ce compartiment. Ces deux mécanismes agissent simultanément et de manière compétitive.

Si les réactions d'hydrolyse se produisent dans tout le volume d'eau, la photolyse est fortement influencée par la profondeur du plan d'eau. En effet, l'atténuation de l'intensité lumineuse avec la profondeur affecte significativement la photolyse, la vitesse de réaction pouvant être réduite de plus de 50% des 10 cm de profondeur dans les eaux typiques de rivière [39].

Ainsi, dans un scénario abiotique (sans dégradation biologique), la cinétique de dégradation d'une s.a. est décrite par le modèle SFO (*Single first-order*) [15] et est donnée par l'équation suivante, qui permet de calculer la concentration d'une substance dans un milieu en fonction du temps ($C(t)$) en tenant compte des différents processus de dégradation en jeu :

⁹ La température naturelle des eaux souterraines proches de la surface avoisine la moyenne annuelle de la température de l'air qui est d'environ 11°C en Wallonie

$$C(t) = C_0 \cdot e^{-(k_{hy,l} + \epsilon \cdot k_{ph,l}) \cdot t} \quad (32)$$

Où

- C_0 est la concentration initiale de la substance ;
- $k_{ph,l}(IL)$ est la constante de dégradation par photolyse, dépendante de l'irradiation lumineuse [j^{-1}] ;
- $k_{hy,l}(T)$ est la constante de dégradation par hydrolyse, dépendante de la température de l'eau [j^{-1}] ;
- ϵ est un coefficient correcteur tenant compte de l'atténuation du rayonnement solaire en fonction de la profondeur fixée à 0,075 ;
- t est le temps [j].

La persistance d'une substance dans les eaux de surface est régie à la fois par sa biodégradation et par le temps de résidence de l'eau, lui-même conditionné par le régime d'écoulement fluvial. On fait ainsi l'hypothèse qu'une molécule, en moyenne, ne demeure pas dans les cours d'eau au-delà d'une saison, et ce même en l'absence des processus de dégradations abiotiques : elle sera soit biodégradée, soit entraînée vers les milieux marins, où les conditions environnementales diffèrent fortement. Afin de refléter cette dynamique, une constante de dissipation est introduite de manière à ce que la persistance dans les eaux de surface n'excède pas la saison d'application, fixée à 90 jours.

La persistance d'une s.a. dans les eaux de surface est alors calculée suivant l'équation (28) :

$$P_{\text{esu}}(i) = \frac{1}{k_{hy,l}(T) + \epsilon \cdot k_{ph,l}(IL) + R} \quad (33)$$

Où

- $k_{ph,l}(IL)$ est la constante de dégradation par photolyse, dépendante de l'irradiation lumineuse [j^{-1}] ;
- $k_{hy,l}(T)$ est la constante de dégradation par hydrolyse, dépendante de la température de l'eau [j^{-1}] ;
- ϵ est un coefficient correcteur tenant compte de l'atténuation du rayonnement solaire en fonction de la profondeur fixée à 0,075 ;
- R : constante de dissipation minimale de la substance, représentant son temps maximal de résidence dans les eaux de surface avant évacuation vers le milieu marin ou biodégradation. Sa valeur est fixée à 0,011 [j^{-1}].

La constante de dégradation par hydrolyse est ajustée selon la température de l'eau de surface à l'aide de l'équation d'Arrhenius (équation (31)). La constante de dégradation par photolyse est sensible à l'irradiation solaire, qui varie en fonction de la saison, de la latitude, de la turbidité et de la profondeur d'eau. Ces adaptations sont reprises à la section suivante. En se basant sur les travaux de Zepp et Cline (1977) [39], le déclin de la photolyse en fonction de la profondeur a été modélisé par un modèle de décroissance de type "loi puissance". Ainsi, en supposant une distribution uniforme de la substance sur une colonne d'eau de 1,5 mètre - considérée comme une valeur moyenne de la profondeur des cours d'eau de Wallonie - il a été possible de calculer un coefficient correcteur de la photolyse tenant compte de l'atténuation du rayonnement solaire en fonction de la profondeur moyenne de ce compartiment.

Prise en compte de la saison d'application pour calculer le facteur P en eaux de surface

La saison à laquelle une substance est appliquée influence les conditions environnementales qu'elle rencontre lors de son transfert vers les eaux de surface. Les conditions d'irradiation solaire et de température caractéristiques de chaque saison modulent les processus de dégradation abiotique. De plus, la persistance d'une substance dans les eaux de surface est limitée par le temps de résidence de l'eau, déterminé par le régime d'écoulement fluvial. On pose donc l'hypothèse qu'une molécule ne résidera pas dans les cours d'eau au-delà d'une seule saison.

Comme expliqué à la section I.1, le transfert d'une substance depuis la parcelle traitée vers les eaux de surface peut se faire dans la phase dissoute ou dans phase particulaire. Le transport en phase dissoute a majoritairement lieu durant la saison d'application. Par conséquent, les conditions utilisées pour estimer les constantes de dégradation pour cette fraction sont celles de la saison d'application. En revanche, le transport en phase particulaire peut être différé dans le temps, et s'étendre sur plusieurs saisons. Dans ce cas, l'équation (93) permet de calculer les variables climatiques représentatives en fonction des coefficients de contribution saisonnière (D_s).

Les constantes de dégradation par hydrolyse et par photolyse sont ajustées en fonction des conditions environnementales caractéristiques de chacune des quatre saisons :

1) Constante de dégradation par hydrolyse

La constante de dégradation par hydrolyse est ajustée à la température saisonnière à l'aide de l'équation d'Arrhenius (équation (31)).

En s'appuyant sur les travaux de Georges et al. (2019) [40], les moyennes saisonnières représentatives des eaux de surface en Wallonie ont été déterminées à partir d'un modèle sinusoïdal de température, dérivé de la solution analytique de l'équation de la chaleur. Ces auteurs ont étudié les variations thermiques des cours d'eau wallons sur la période 2013–2016, ce qui a permis de caractériser les fluctuations saisonnières. Les moyennes saisonnières issues de ce modèle sont présentées dans le tableau suivant :

Tableau 5 Températures moyennes saisonnières des cours d'eau de Wallonie

Saison	Température moyenne des eaux de surface [C°]
Hiver	6,6
Printemps	9,9
Été	15,4
Automne	12,1

2) Constante de dégradation par photolyse

L'irradiation lumineuse incidente est le paramètre saisonnier présentant la plus grande influence sur la cinétique de la photolyse. À partir des travaux de Zepp et Cline (1977) [39], des facteurs d'irradiation saisonniers ont pu être estimés, pour une latitude représentative de la Wallonie (50° Nord). Ces facteurs permettent d'ajuster la constante de dégradation par photolyse standard en fonction des variations saisonnières (Tableau 6).

Tableau 6 : facteur d'irradiation saisonnier établi sur base de l'étude de Zepp et Clive (1997)

Saison	Facteur d'irradiation saisonnier (latitude 50° nord)
Hiver	0.2
Printemps	0.7
Été	0.6
Automne	0.2

La constante de dégradation par photolyse ($k_{ph,l}(IL)$) est ainsi ajustée selon l'équation suivante :

$$k_{ph,l}(IL) = f_{ir} \cdot k_{ph,l} \quad (34)$$

Où

- $k_{ph,l}$ correspond à la constante de dégradation par photolyse basée sur la demi-vie ($DT50$) en conditions standardisées [j^{-1}] ;
- f_{ir} est le facteur d'irradiation saisonnier.

Ainsi, la température moyenne saisonnière de l'eau et le facteur d'irradiation saisonnier sont calculés en utilisant l'équation suivante, où "X" est une variable générique pouvant représenter l'une ou l'autre de ces grandeurs :

$$X = \frac{F_{esu,pp}}{F_{esu}} \cdot \frac{\sum_{s=0}^3 D_s \cdot X_s}{\sum_{s=0}^3 D_s} + \frac{F_{esu,pd}}{F_{esu}} \cdot X_s \quad (35)$$

Où

- $F_{esu,pp}$ et $F_{esu,pd}$ sont les fractions de substance transportées par ruissellement respectivement dans la phase particulaire et dans la phase dissoute ;
- F_{esu} est la fraction totale de substance transportée par ruissellement ;
- X_s correspond à la valeur de la variable climatique calculée pour la période saisonnière « s » ;
- D_s correspond au coefficient de contribution saisonnier.

Dans cette équation $F_{esu,pd}$, $F_{esu,pp}$ et F_{esu} correspondent aux fractions transportées par ruissellement et sont calculées via les équations (92) et (58) respectivement, tandis que les coefficients de contribution saisonnière (D_s) sont calculés à l'aide de l'équation (108). La variable climatique X ainsi calculée est alors utilisée pour ajuster les constantes de dégradation :

- Si X représente la température moyenne saisonnière, elle est utilisée comme valeur de T_m dans l'équation d'Arrhenius pour calculer la constante de dégradation par hydrolyse $k_{hy,l}(T_m)$;
- Si X représente le facteur d'irradiation saisonnier, il est utilisé comme valeur de f_{ir} dans l'ajustement de la constante de dégradation par photolyse $k_{ph,l}(IL)$.

4.7.5 Facteur P pour le milieu terrestre

Le compartiment du milieu terrestre est caractérisé par une forte hétérogénéité et des interactions multiples entre ses composantes.

Dans le milieu terrestre (hors zone cultivée), une s.a. peut se retrouver :

- **Sur le couvert végétal** (végétation des zones non cultivées), suite au transport atmosphérique des s.a. (volatilisation et dérive), où elle est soumise à des processus de dissipation tels que la revolatilisation, le lessivage foliaire, la photodégradation et l'assimilation par les plantes.
- **Dans l'atmosphère**, suite à la volatilisation et la dérive, où elle est susceptible d'être transportée

sur des distances variables, de se redéposer ou encore d'être dégradée par photodégradation ou oxydation.

- **Dans les sols hors de la zone traitée¹⁰,** suite au phénomène d'érosion-sédimentation principalement, ou plus marginalement par déposition atmosphérique ou par le lessivage des couverts végétaux. Toutefois, la déposition atmosphérique directe sur le sol reste très limitée en zones non agricoles, du fait de la présence quasi permanente d'une couverture végétale. Par ailleurs, en zone tempérée, le lessivage des pesticides depuis les couverts végétaux demeure peu probable, en raison de la faible occurrence d'épisodes de pluie intense [41]. Par conséquent, seule la fraction de substance transportée par érosion sera prise en compte. Dans les sols hors de la zone traitée, les s.a. sont principalement soumises au processus de dissipation par biodégradation.

La durée de résidence d'une s.a. dans le milieu terrestre varie fortement en fonction des surfaces sur lesquelles elle se dépose, notamment en raison des transferts dynamiques entre compartiments et sous-compartiments. Ces échanges rendent difficile une évaluation globale de la persistance environnementale. Ainsi, le facteur P pour le milieu terrestre est évalué de façon restreinte via la persistance sur les couverts végétaux et la persistance dans les sols hors de la zone traitée, en raison de l'importance de ces sous-compartiments dans les interactions entre les s.a. et les organismes du milieu terrestre.

Étant donné la subdivision du milieu terrestre en ces deux sous-compartiments, un modèle cinétique DFOP (*Double First-Order in Parallel*) [15] est utilisé pour simuler la dissipation globale et déterminer ainsi l'évolution de la concentration d'une substance au fil du temps :

$$C(t) = C_0 (a \cdot e^{-k_1 \cdot t} + (1 - a) \cdot e^{-k_2 \cdot t}) \quad (36)$$

Où

- *C_t* est la concentration de la substance à l'instant *t* ;
- *C₀* est la concentration initiale de la substance ;
- *k₁* et *k₂* sont les constantes de dissipation dans le milieu 1 et dans le milieu 2 respectivement ;
- *a* est la fraction de la substance soumise au processus *k₁* ;
- *t* est le temps.

¹⁰ À noter que la persistance dans les sols agricoles est traitée séparément en section 4.7.6

La persistance d'une s.a. dans le compartiment du milieu terrestre est alors calculée suivant l'équation (28) :

$$P_{mt} = \frac{a}{k_d} + \frac{(1-a)}{k_{cv}} \quad (37)$$

Où

- *k_d est la constante de dégradation biochimique dans le sol [j⁻¹] ;*
- *k_{cv} est la constante de dissipation depuis le couvert végétal [j⁻¹] ;*
- *a représente la fraction de la substance transportée jusqu'aux sols hors de la zone traitée par érosion par rapport à la fraction totale à laquelle les organismes du milieu terrestre sont potentiellement susceptibles d'être exposés (fraction interceptée par le couvert végétal et fraction transportée vers les sols hors de la zone traitée) ;*
- *(1 - a) représente la fraction de la substance interceptée par le couvert végétal, par rapport à la fraction totale à laquelle les organismes du milieu terrestre sont potentiellement susceptibles d'être exposés (fraction interceptée par le couvert végétal et fraction transportée vers les sols hors de la zone traitée).*

Dans cette équation, la première partie représente la durée moyenne pendant laquelle la substance reste dans les sols hors de la zone de traitement, pondérée par la proportion de substance qui s'y est effectivement déposée. La seconde partie représente la durée moyenne pendant laquelle la substance reste sur le couvert végétal, pondérée par la proportion de la substance qui s'est déposée sur cette végétation.

A. Calcul du paramètre a

Le paramètre *a* de l'équation (37) représente la fraction de substance transportée jusqu'aux sols hors de la zone traitée par ruissellement sous forme particulaire (érosion) par rapport à la fraction totale à laquelle les organismes du milieu terrestre sont potentiellement susceptibles d'être exposés (fraction interceptée par le couvert végétal et fraction transportée vers les sols hors de la zone traitée par érosion).

Inversement, la fraction *(1 - a)* représente la fraction de la substance interceptée par le couvert végétal, par rapport à la fraction totale à laquelle les organismes du milieu terrestre sont potentiellement susceptibles d'être exposés (fraction interceptée par le couvert végétal et fraction transportée vers les sols hors de la zone traitée). Cette part est soumise à divers processus de dissipation (volatilisation, photodégradation, assimilation par la plante, etc.).

Le paramètre *a* est alors calculé comme suit :

$$a = \frac{\gamma \cdot (1 - I) \cdot F_{esu,pp}}{\gamma \cdot (1 - I) \cdot F_{esu,pp} + I} \quad (38)$$

Où

- I représente le facteur d'interception de la culture [-];
- $(1 - I)$ représente la part qui n'est pas interceptée par la culture [-] ;
- $F_{esu,pp}$, la fraction de substance transportée par ruissellement sous forme particulaire vers les eaux de surface [-] ;
- γ est un paramètre qui représente la fraction de la s.a. transportée par ruissellement sous forme particulaire n'atteignant pas les eaux de surface. Sa valeur est fixée à 7,7, de manière à refléter qu'en moyenne, seuls 11,5 % des sédiments érodés parviennent aux eaux de surface.

Dans cette équation, la fraction de substance transportée par ruissellement sous forme particulaire vers les eaux de surface ($F_{esu,pp}$) est calculée à partir de l'équation (92). Dans l'équation ci-dessus, le numérateur représente la fraction de la s.a. emportée par ruissellement sous forme particulaire vers les eaux de surface et redéposée avant d'atteindre celles-ci. Le dénominateur représente quant à lui l'ensemble des fractions auxquelles les organismes du milieu terrestre sont susceptibles d'être exposés (fraction interceptée par le couvert végétal et fraction transportée vers les sols hors de la zone traitée).

B. Paramétrisation des constantes de dégradation biochimique dans le sol

La constante de dégradation biochimique dans le sol est calculée à partir de la demi-vie dans le sol et peut être ajustée par l'équation d'Arrhenius en fonction de la température moyenne et du taux d'humidité moyen (équation (31)).

C. Paramétrisation des constantes de dissipation k_{cv}

La dissipation des pesticides sur les feuilles résulte principalement de quatre processus : photodégradation, volatilisation, lessivage, et adsorption foliaire. Toutefois, ces processus sont très peu documentés et les valeurs fournies dans la PPDB ne sont pas standardisées. En revanche, des données sur la volatilisation peuvent être générées à l'aide du modèle de transfert détaillé à la section I.3

Pour approcher la persistance sur le couvert végétal de manière généralisée, les demi-vies des résidus foliaires issues de la PPDB ont été analysées. Elles montrent que pour 80% des 180 s.a. analysées, la durée de vie moyenne des s.a. sur le feuillage se situe entre 2 et 14 jours (avec une médiane de 6,7 jours) et dépasse très rarement 20 jours. Il est également établi que la volatilisation domine largement les processus de dissipation pour les s.a. volatiles à très volatiles [42]. Toutefois, une faible volatilité n'implique pas nécessairement une forte persistance, car d'autres voies de dissipation peuvent devenir prépondérantes (notamment la photodégradation pour les molécules photosensibles).

Dans ce contexte, il a été décidé d'estimer la constante de dissipation sur le couvert végétal distinctement, selon le caractère volatil des s.a. Pour les s.a. à fort potentiel de volatilisation, la dissipation est considérée comme étant principalement gouvernée par la volatilisation. À l'inverse, pour les s.a. moins volatiles, la constante de dissipation est estimée à partir de la médiane des durées de vie moyennes (DT_{50}) observées dans la base de données PPDB, sur la base des valeurs disponibles :

$$k_{cv} = \begin{cases} \frac{-\ln(1 - F_{vol,cv})}{7} & \text{si } F_{vol,cv} > 65\% \\ k_{plante-m} & \text{sinon} \end{cases} \quad (39)$$

Où

- $F_{vol,CV}$ représente la fraction volatilisée depuis le couvert végétal après 7 jours [-] ;
- $k_{plante-m}$ représente le taux médian de dissipation sur le couvert végétal (estimé à 0,15¹¹) [j^{-1}].

La fraction volatilisée après 7 jours depuis le couvert végétal est calculée à partir de l'équation (113). La valeur médiane de k_{plante} repose sur une distribution issue de la PPDB ($n = 180$), corroborée par les données reprises du modèle PRZM, qui indiquent des gammes similaires de dissipation sur les matrices végétales pour différentes familles moléculaires de pesticide.

D. Prise en compte de la saison d'application pour calculer le facteur P dans le milieu terrestre

Les taux de dissipation sont ajustés en fonction des conditions environnementales spécifiques à la saison d'application :

- 1) Pour la dissipation sur les feuilles (processus rapide), on considère la température moyenne saisonnière afin d'ajuster la pression de vapeur via l'équation d'Arrhenius (équation (31)) et de recalculer la volatilisation sur le couvert végétal (équation (115)).
- 2) En ce qui concerne l'adaptation de la dégradation biochimique, le transport par érosion peut être étalé dans le temps, et la dégradation biochimique dans les sols tend à être plus lente que sur le couvert végétal, rendant difficile l'attribution précise à une saison spécifique. Ainsi, pour modéliser la dégradation biochimique des pesticides transportés à travers le sol, les conditions de température et d'humidité sont fixées sur des moyennes annuelles. Ces paramètres servent ensuite à ajuster le taux de dégradation biochimique via l'équation (43).

4.7.6 Facteur P pour les sols cultivés

La persistance d'une s.a. dans les sols hors de la zone traitée correspond à la durée moyenne pendant laquelle il reste dans la zone biologiquement active du sol, où il peut interagir avec les micro-organismes du sol. La dégradation biochimique, assurée par les micro-organismes et certains processus abiotiques, est le principal mécanisme de dissipation. Les processus de volatilisation et de lixiviation contribuent également à la dissipation des s.a. du compartiment du sol.

Les processus de dissipation dépendent fortement de la profondeur à laquelle se trouve la substance en fonction du temps : plus la molécule s'enfonce, moins elle est sujette à se volatiliser et être biodégradée. De même, l'exposition aux organismes du sol est en effet réduite, étant donné la diminution de présence d'organisme avec la profondeur. La dégradation des s.a. ne peut donc plus être modélisée par une cinétique à taux constant, comme c'était le cas pour les autres compartiments de l'environnement. La vitesse de dissipation n'étant pas constante dans le temps, l'utilisation d'un modèle cinétique à taux variable est nécessaire.

¹¹ Ce paramètre est calculé sur base d'une DT50 de 6,7 jours, qui représente la DT50 médiane de la matrice plante des substances de la PPDB pour lesquelles les données sont disponibles.

Le modèle Phytorisque repose donc sur une cinétique à taux variable. Elle est basée sur une généralisation du modèle dit « hockey-stick », qui postule une rupture nette entre deux phases temporelles [15]. Le Phytorisque généralise alors ce modèle en considérant que chaque pas de temps journalier constitue une phase distincte. Ainsi, chaque jour est associé un taux de dissipation. L'évolution de la concentration résiduelle est ainsi décrite par la relation suivante :

$$C(t) = C_0 \cdot e^{-\int_0^t (k_d(u) + k_v(u) + k_e(u)) du} \quad (40)$$

Où

- C_t est la concentration de la substance à l'instant t ;
- C_0 est la concentration initiale de la substance ;
- $k_d(t)$ est le taux de dégradation biochimique en fonction du temps ;
- $k_v(t)$ est le taux de volatilisation depuis le sol en fonction du temps ;
- $k_e(t)$ est le taux d'atténuation de l'exposition de la substance au biote du sol en fonction du temps t .

La durée moyenne d'exposition de la substance au biote du sol cultivé (P_{sc}) peut être interprétée comme l'espérance mathématique de cette distribution temporelle (équation (28)). Dans ce cas, l'intégration analytique n'est pas envisageable, aussi est-elle réalisée numériquement en discrétilisant le temps en pas journaliers. La persistance est donc estimée par l'équation suivante :

$$P_{sc} = \sum_{i=1}^n \left(i(k_d(i) + k_v(i) + k_e(i)) \prod_{j=1}^i (e^{-(k_d(j) + k_v(j) + k_e(j))}) \right) \quad (41)$$

Où

- $k_d(t)$ est le taux de dégradation biochimique en fonction du temps [j^{-1}] ;
- $k_v(t)$ est le taux de volatilisation depuis le sol en fonction du temps [j^{-1}] ;
- $k_e(t)$ est le taux d'atténuation de l'exposition de la substance au biote du sol en fonction du temps [j^{-1}].

Dans l'équation ci-dessus, les taux de dissipation sont exprimés sous forme discrète (notés $k_d(i)$, $k_d(j)$...) pour représenter leur valeur à chaque jour i ou j .

Les différents taux de dissipation et d'atténuation sont développés aux points suivants.

Détermination du taux de dégradation biochimique en fonction du temps

La biodégradation d'une substance dans le sol est influencée par la profondeur à laquelle elle se trouve. En effet, à mesure que la molécule migre en profondeur, l'activité microbienne diminue. La constante de dégradation biochimique est donc ajustée en fonction du temps laissé à la molécule pour atteindre les couches profondes du sol.

En se basant sur les paramètres d'atténuation par défaut utilisés dans les modèles de référence PRZM et MACRO [34], Phytorisque adopte un modèle cinétique de premier ordre pour décrire la variation de la constante de biodégradation en fonction de la profondeur. Ce modèle permet de représenter l'atténuation progressive de la dégradation liée à la migration verticale de la substance dans le sol. Le taux de dégradation biochimique (k_d) est alors exprimé de la manière suivante :

$$k_d(t) = \begin{cases} k_d(0) & \text{si } z(t) < 0,1 \\ k_d(0) \cdot e^{\alpha \cdot z(t) + \beta} & \text{si } z(t) \geq 0,1 \end{cases} \quad (42)$$

Où

- $z(t)$ est la profondeur moyenne à laquelle se trouve la substance active à l'instant t [m] ;
- $k_d(0)$ est la constante de dégradation biochimique à la surface du profil du sol [j^{-1}] ;
- α et β sont des paramètres d'atténuation du taux de dégradation biochimique fixé respectivement à -1,84 et 0,184.

La profondeur moyenne à laquelle se situe la substance est estimée en fonction du nombre de jours écoulés depuis l'application du pesticide, à l'aide de l'équation (79).

De plus, la constante de dégradation biochimique doit être ajustée pour tenir compte de deux facteurs qui influencent la vitesse de dégradation des substances dans le sol : la température et l'humidité du sol. Concernant l'horizon de surface (10 premiers centimètres), cet ajustement se fait à l'aide d'une combinaison de l'équation d'Arrhenius (pour la température) (équation (31) et du facteur de correction de Walker (1973) (pour l'humidité du sol) [15] :

$$k_d(T, W) = k_d(\text{ref}) \cdot e^{-\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}} \right) \left(\frac{\theta}{\theta_{\text{ref}}} \right)^B} \quad (43)$$

Où

- $k_d(T, W)$ correspond au taux de dégradation biochimique ajustée pour la température(T) et l'humidité (W) [j^{-1}] ;
- $k_d(\text{ref})$ est le taux de dégradation biochimique de référence [j^{-1}] ;
- θ_{ref} est l'humidité volumique du sol (0,25) ;
- E_a est l'énergie d'activation de la réaction de dégradation (64 500 $j \cdot mol^{-1}$) ;
- R est la constante des gaz parfaits ($8,314 j \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$) ;
- T est la température moyenne du sol [K] ;
- T_{ref} est la température de référence (293,15 K) ;
- B est un paramètre empirique de sensibilité à l'humidité (fixé à 0,7).

Dans les horizons plus profonds, où les variations d'humidité sont moins marquées et plus difficiles à mesurer, l'ajustement du taux de dégradation biochimique se fait uniquement pour la température, à l'aide de l'équation d'Arrhenius (équation (31)).

Détermination du taux de volatilisation en fonction du temps

Pour les composés volatils, la volatilisation constitue un processus de dissipation non négligeable dans le sol. Toutefois, son importance décroît rapidement avec la profondeur à laquelle se trouve la substance. En effet, le potentiel de volatilisation est fortement limité par la résistance à la diffusion dans le sol, celle-ci étant inversement proportionnelle au carré de la distance à parcourir jusqu'à la surface (voir section I.3.3). La profondeur moyenne à laquelle se situe la substance est estimée en fonction du nombre de jours écoulés depuis l'application du pesticide, à l'aide de l'équation (79).

Par ailleurs, la migration verticale d'une substance vers les horizons profonds ne débute généralement pas immédiatement après l'application, en particulier en l'absence de précipitations suffisantes pour entraîner son infiltration. Il est donc raisonnable de supposer que, tant que la substance n'a pas franchi la couche de mélange superficielle, la diffusion verticale reste négligeable. Cette hypothèse est cohérente avec le modèle uniforme présenté à la section I.3.3 en Annexe I.:

Dans ce contexte, le taux de volatilisation peut être estimé à l'aide de l'équation (117), qui intègre les conditions du sol et les propriétés de diffusion de la substance dans le sol.

Détermination du taux d'atténuation de l'exposition de la substance aux organismes du sol en fonction du temps

Selon le modèle proposé par le Phytorisque, la migration d'une substance au-delà des 10 premiers centimètres de sol entraîne une diminution de son exposition aux organismes du sol. Le modèle suppose alors que cette exposition soit proportionnelle à la teneur en matière organique (MO), conformément aux hypothèses formulées par Wilson et al. (1993) [43]. Dans son étude, une relation empirique décrivant la diminution de la teneur en carbone organique en fonction de la profondeur du sol a été développée pour différents types de sols. Sur la base de leur travail, cette diminution a pu être assimilée à une cinétique de décroissance de premier ordre, le taux de décroissance de la matière organique en fonction de la profondeur est calculé comme suit :

$$\tau_{mo}(z) = \frac{f_{mo}(z)}{f_{mo}(0)} = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 < z \leq 0,1 \\ e^{-\lambda.(z-0,1)} & \text{sinon} \end{cases} \quad (44)$$

Où

- $f_{mo}(0)$ est la teneur en matière organique du sol en surface [-] ;
- $f_{mo}(z)$ est la teneur en matière organique du sol à la profondeur z [-] ;
- λ est le taux d'atténuation de la teneur en matière organique du sol en fonction de la profondeur, fixé à 2,58 [m^{-1}] ;
- z est la profondeur du sol [m].

Dans le cadre du modèle de persistance, la diminution de l'exposition est interprétée comme un transfert effectif de la substance en dehors du compartiment étudié, c'est-à-dire de la couche de sol cultivée vers des horizons plus profonds. Le taux d'atténuation de l'exposition de la substance aux organismes du sol est ainsi modélisé comme un taux de perte apparent — à l'image de la volatilisation — représentant la réduction de la concentration à laquelle les organismes du sol sont exposés, consécutive à la migration de la substance par lixiviation.

En supposant que la migration de la molécule dans le sol suit une cinétique constante gouvernée par l'infiltration journalière moyenne, le taux d'atténuation de l'exposition de la substance aux microorganismes en fonction du temps ($k_e(t)$) peut être estimé par la dérivée de l'atténuation de la teneur en matière organique :

$$k_e(t) = \frac{d\tau_{mo}}{dt} = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < z(t) \leq 0,1 \\ \lambda \cdot \frac{z(t)}{t} e^{-\lambda \cdot (z(t)-0,1)} & \text{sinon} \end{cases} \quad (45)$$

Où

- λ est le taux d'atténuation de la teneur en matière organique du sol en fonction de la profondeur, fixé à $2,58 [m^{-1}]$;
- $z(t)$ est la profondeur moyenne à laquelle se trouve la substance à l'instant $t [m]$.

Selon cette formule, si la substance est dans les 10 premiers centimètres de sol ($0 < z(t) \leq 0,1$), elle se trouve toujours dans la zone riche en matière organique. Il n'y a dès lors pas d'atténuation de l'exposition et $k_e(t) = 0$. Si la substance a migré au-delà des 10 premiers centimètres de sol ($z > 0,1$), l'exposition aux micro-organismes diminue. La profondeur moyenne à laquelle se situe la substance est estimée en fonction du nombre de jours écoulés depuis l'application du pesticide, à l'aide de l'équation (79) ajustée en fonction de la saison d'application (voir section suivante).

Prise en compte de la saison d'application

Les différentes variables climatiques saisonnières peuvent exercer une influence significative sur la persistance des s.a. dans les sols cultivés.

En premier lieu, l'infiltration moyenne journalière constitue un facteur déterminant de la durée d'exposition des organismes du sol, dans la mesure où elle conditionne la vitesse moyenne de migration de la substance dans le sol (équation (99)). Cette vitesse de migration influence à son tour les taux de dissipation et d'atténuation de l'exposition. L'équation (46) est utilisée pour intégrer ces infiltrations moyennes journalières dans le modèle de persistance, en associant chaque saison de l'année des valeurs moyennes spécifiques.

Ensuite, la température et l'humidité du sol influencent à la fois le taux de volatilisation et le taux de dégradation biochimique de la s.a. :

- Pour le taux de volatilisation depuis la surface végétale, la pression de vapeur de la substance utilisée dans le calcul de ce taux peut être ajustée via l'équation d'Arrhenius (équation (31)), tandis que la fraction de phase gazeuse dans le sol peut être modifiée en fonction de la teneur moyenne en eau du sol.
- Pour le taux de dégradation biochimique, celui-ci peut être adapté en utilisant directement l'équation d'Arrhenius-Walker (équation (43)) pour l'horizon de surface, qui prend en compte à la fois la température et l'humidité du sol et l'équation d'Arrhenius (équation (31)) pour les horizons plus profonds, qui prend en compte la température. Par ailleurs, la dégradation biochimique dépend de la profondeur moyenne à laquelle se trouve la substance, celle-ci est directement influencée par l'infiltration moyenne. Ainsi, l'infiltration, la température et la teneur en eau du sol moyenne peuvent être ajustées dynamiquement au cours du temps, en fonction des saisons via les conditions ci-dessous. On considère que la substance est appliquée au milieu de la saison (soit 45 jours avant le début de la saison suivante), ce qui implique qu'elle est soumise aux conditions climatiques de cette saison pendant 45 jours. Les saisons suivantes sont prises en compte dans leur totalité, soit 91 jours chacune. Ainsi, pour la première année, la durée totale considérée est de $45 + 3 \times 91 = 318$ jours. Au-delà, une moyenne annuelle est utilisée pour représenter les conditions de la deuxième année.

$$\begin{cases} I_{m0}, Ts_{m0}, \theta_{m0} & \text{pour } t < 45 \text{ j} \\ I_{m1}, Ts_{m1}, \theta_{m1} & \text{pour } 45 \text{ j} \leq t < 136 \text{ j} \\ I_{m2}, Ts_{m2}, \theta_{m2} & \text{pour } 136 \text{ j} \leq t < 227 \text{ j} \\ I_{m3}, Ts_{m3}, \theta_{m3} & \text{pour } 227 \text{ j} \leq t < 318 \text{ j} \\ I_{mba}, Ts_{mba}, \theta_{mba} & \text{pour } t \geq 318 \text{ j} \end{cases} \quad (46)$$

Où

- I_{ms} , Ts_{ms} , θ_{ms} désignent respectivement l'infiltration moyenne journalière, la température moyenne du sol et la teneur en eau du sol durant la saison s ;
- I_{mba} , Ts_{mba} , θ_{mba} sont les valeurs moyennes annuelles utilisées à partir de la deuxième année ;
- t est le temps de parcours moyen de la s.a. à travers le profil du sol (couches a , b , c et d , voir Annexe I:2.1.1).

Concernant la teneur en matière organique, bien qu'elle ne soit pas directement influencée par la saison d'application, cette dernière influence la position moyenne de la substance dans le sol. En s'appuyant sur le Tableau 18, la teneur en matière organique rencontrée par la substance au cours du temps peut être exprimée comme suit :

$$\begin{cases} f_{mo}(t) = f_{mo}(z = 0) & \text{pour } t < t_a \\ f_{mo}(t) = 0,67 \cdot f_{mo}(0) & \text{pour } t_a \leq t < t_a + t_b \\ f_{mo}(t) = 0,18 \cdot f_{mo}(0) & \text{pour } t_a + t_b \leq t < t_a + t_b + t_c \\ f_{mo}(t) = 0,1 \cdot f_{mo}(0) & \text{pour } t \geq t_a + t_b + t_c \end{cases} \quad (47)$$

Où

- $f_{mo}(0)$ correspond à la teneur en matière organique en surface [-] ;
- t_a , t_b , t_c sont les temps moyens nécessaires pour que la molécule traverse successivement les couches a , b et c [j].

Les couches a à d sont définies dans l'annexe et correspondent à des profondeurs croissantes du sol. Chacune est caractérisée par une teneur moyenne en matière organique, qui diminue avec la profondeur. L'équation ci-dessus simplifie cette variation en attribuant à chaque couche une fraction de la teneur en surface. Ainsi, tant que la substance reste dans la couche a , elle est exposée à une teneur maximale en matière organique. Lorsqu'elle migre vers les couches plus profondes, cette teneur diminue progressivement : 67 % en couche b , 18 % en couche c , et 10 % en couche d .

Ainsi, les temps de parcours (t_a , t_b et t_c) ont été calculés à la section Annexe I:2.1.2 à l'aide de l'équation (99).

4.8 Indices du Phytorisque

Dans le cadre de l'évaluation des risques environnementaux liés à l'utilisation des PPP, il est essentiel de distinguer deux dimensions complémentaires : l'usage des s.a., qui reflète l'intensité et l'étendue de leur emploi en agriculture, et leur impact potentiel, qui prend en compte la dangerosité et le comportement des s.a. dans l'environnement. Ces deux types d'indices permettent de mieux comprendre à la fois la dépendance du système agricole aux pesticides et les risques que ces s.a. peuvent faire peser sur les écosystèmes.

4.8.1 Indice d'usage des substances actives : la surface impactée à la dose de référence

La production agricole conventionnelle repose largement sur l'utilisation de pesticides pour protéger les cultures contre les ravageurs, les maladies et les adventices. Afin d'évaluer et de suivre cette dépendance aux produits phytosanitaires, un indice d'usage a été développé pour identifier les s.a. les plus employées en grandes cultures. Cet indice se concentre exclusivement sur l'ampleur de l'utilisation des substances, indépendamment de leur toxicité ou de leur devenir dans l'environnement. Il mesure la dépendance du système agricole vis-à-vis des s.a. chimiques.

La quantité totale de s.a. utilisée dans un secteur agricole ne constitue pas un indicateur pertinent de la dépendance des agriculteurs vis-à-vis de cette substance. En effet, les s.a. peuvent être employées à doses très différentes, selon leur efficacité. Ainsi, en analysant les quantités utilisées, une substance qui présente une faible dose d'efficacité peut apparaître comme faiblement utilisée par rapport à d'autres s.a. efficaces à plus forte dose, alors qu'elle est en réalité fréquemment utilisée. Dans le Phytorisque, l'usage est quantifié par la superficie impactée à la dose de référence.

Superficie impactée à la dose de référence par secteur agricole

Pour quantifier l'usage d'une s.a. dans un secteur agricole, la superficie théorique traitée à une dose de référence est calculée. Cela revient à déterminer la surface qui aurait été traitée si la totalité de la quantité utilisée avait été appliquée à la dose de référence. Cette superficie théorique, appelée Superficie Impactée à la Dose de référence (SID), est calculée par la formule suivante :

$$\text{SID}(i, k) = \frac{Q(i, k)}{D_{\text{ref}}^k(i)} \quad (48)$$

Où

- $Q(i, k)$ est la quantité estimée de la substance active i utilisée par le secteur k [kg] ;
- $D_{\text{ref}}^k(i)$ est la dose de référence de la substance active i calculée pour le secteur k [kg.ha $^{-1}$].

La détermination d'une dose de référence représente un choix méthodologique. Celle choisie dans le calcul de la SID est définie comme la dose maximale autorisée par application sur la culture considérée, quel que soit l'organisme cible ou le stade de la plante (voir équation (14) de la section 4.5.3).

Superficie impactée à la dose de référence en grandes cultures

Pour généraliser la SID et caractériser la dépendance de l'ensemble des secteurs agricoles étudiés à une s.a. ($\text{SID}(i)$), il suffit de sommer les SID obtenues par secteur agricole :

$$SID(i) = \sum SID(i, k) \quad (49)$$

Où $SID(i, k)$ correspond à la superficie impactée à la dose de référence de la substance active i pour le secteur k [ha] ;

4.8.2 Indices établis par substance caractérisant la sensibilité, l'exposition des écosystèmes et indice de risque

À partir des cinq grands facteurs de risque (T, B, Q, M et P) détaillés aux sections précédentes, il est possible de construire une variété d'indices caractérisant le risque lié à l'utilisation de PPP en agriculture en Wallonie. Ils peuvent être regroupés en trois grandes catégories, selon leur finalité : le suivi, le diagnostic et les perspectives.

1) Suivi temporel du risque

Ces indices ont pour but de suivre l'évolution du risque lié à l'usage des s.a. en grandes cultures au cours du temps en Wallonie. Il s'agit d'indices agrégés, où l'ensemble des s.a. utilisées durant une année est pris en compte.

2) Diagnostic des substances à risque au cours d'une même année

Ces indices visent à évaluer la contribution relative des s.a. au risque global ou à l'exposition pour une année donnée. Basés sur les quantités utilisées, ils mesurent l'impact différencié des s.a. sur les compartiments de l'environnement.

3) Évaluation prospective du risque

Ces indices évaluent le risque et l'exposition potentiels associés à une dose d'application de référence. Ils permettent notamment de comparer les alternatives disponibles, en anticipant les effets possibles d'une substitution de substance active par une autre.

4.8.2.1 Indices de suivi temporel du risque

Les indices de suivi temporel du risque visent à objectiver l'évolution du risque environnemental lié à l'usage des produits phytopharmaceutiques en Wallonie. Ces indices prennent en compte la quantité de s.a. utilisée en grandes cultures et en prairies permanentes et les conditions climatiques, qui peuvent affecter leur devenir dans l'environnement.

L'Indice de Risque Normalisé (IRN) permet de suivre l'évolution du risque dans différents compartiments environnementaux : les eaux de surface, le sol cultivé et le milieu terrestre. Cet indice peut également être calculé pour les eaux souterraines en adaptant la formule afin de ne tenir compte que de l'exposition. Il s'agira donc d'un Indice d'Exposition Normalisé (IEN). L'IRN est calculé de la manière suivante pour un compartiment donné :

$$IRN_c = \frac{IRA_c(t)}{IRA_c(t_0)} \quad (50)$$

Où

- $IRA_c(t)$ correspond à l'indice de risque agrégé pour le compartiment « c » au cours de l'année t ;
- $IRA_c(t_0)$ correspond à l'indice de risque agrégé pour le compartiment « c » au cours de l'année de référence t_0 ;
- t_0 est l'année de référence ;
- c correspond au compartiment étudié.

L'indice de risque agrégé ($IRA(t)$) correspond alors à la somme des indices de risque global (IRG) de toutes les s.a. utilisées durant une année t , pour un compartiment donné :

$$IRA_c(t) = \sum_{i=1}^n IRG_c(i) = \sum_{i=1}^n T_c(i). B_c(i). Qu(i). M_c(i). P_c(i) \quad (51)$$

Où

- $IRG_c(i)$ correspond à l'indice de risque global pour une substance active « i » et le compartiment « c » ;
- $T_c(i)$ est le facteur de toxicité calculé pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- $B_c(i)$ est le facteur de bioaccumulation calculé pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- $Qu(i)$ est la quantité de substance (i) utilisée en Wallonie ;
- $M_c(i)$ est le facteur de mobilité calculé pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- $P_c(i)$ est le facteur de persistance calculé pour la substance (i) et le compartiment « c ».

Les IRN peuvent être calculés à plusieurs échelles d'agrégation des s.a.: ils peuvent s'appliquer par secteur agricole ou par région agricole ou encore être déclinés par grandes familles de s.a., selon des classifications basées sur leur origine chimique, leur nature, leur classe de toxicologique (etc.), en agrégant les s.a. concernées pour chaque catégorie.

4.8.2.2 Indices de diagnostic des substances à risque au cours d'une même année

Les indices de diagnostic établissent un état des lieux du risque environnemental lié à l'usage des s.a. pour une année donnée. Ils permettent de déterminer la contribution de chaque substance à l'exposition ou au risque, pour les différents compartiments de l'environnement étudiés, en fonction des quantités effectivement utilisées en Wallonie au cours de cette année. Deux types de contribution sont évalués :

1) La contribution à l'exposition

La contribution d'une substance (i) à l'exposition d'un compartiment « c » ($CE_c(i)$) correspond à sa part relative dans l'exposition totale de ce compartiment pour une année donnée. Elle est calculée selon la formule suivante :

$$CE_c(i) = \frac{IEG_c(i)}{\sum_{i=1}^n IEG_c(i)} \quad (52)$$

Où

- $IEG_c(i)$ correspond à l'indice d'exposition global d'un compartiment « c » à une substance (i) ;
- n correspond au nombre de substances (i).

L'Indice d'Exposition Global (IEG) reprend les facteurs d'exposition de l'IRG, et se calcule comme suit :

$$IEG_c(i) = Q_u(i) \cdot M_c(i) \cdot P_c(i) \quad (53)$$

Où

- Q_u correspond à la quantité de substance (i) utilisée en Wallonie ;
- M_c correspond au facteur de mobilité calculé pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- P_c correspond au facteur de persistance calculé pour la substance (i) et le compartiment « c ».

2) La contribution au risque

La contribution au risque ($CR_c(i)$) considère la contribution d'une s.a. à l'IRA. Pour rappel, l'IRA correspond à la somme des indices de risque globaux (IRG) de toutes les s.a. utilisées durant une année t , pour un compartiment donné. La CR prend donc en compte les facteurs de danger et d'exposition, et est définie comme suit :

$$CR_c(i) = \frac{IRG_c(i)}{IRAc} \quad (54)$$

Où

- $IRG_c(i)$ correspond à l'indice de risque global pour une substance (i) et un compartiment « c » ;
- $IRAc$ correspond à l'indice de risque agrégé pour le compartiment « c ».

Il est à noter que cet indice ne peut pas s'appliquer aux eaux souterraines qui ne sont pas associées à un écosystème à proprement parlé.

Enfin, la caractérisation du risque lors de l'évaluation d'une s.a. peut s'effectuer à travers l'analyse des différents facteurs du risque, à savoir les 5 facteurs composant celui-ci. Toutefois, certains facteurs pris tels quels sont démunis d'interprétation et s'étalent parfois sur plusieurs ordres de grandeurs. Pour une meilleure interprétation de ceux-ci, certains de ces facteurs ont été convertis en indices :

1) Indice du potentiel de toxicité

Le calcul du facteur de toxicité (facteur T) est expliqué en détail à la section 4.3. Les valeurs associées à ce facteur peuvent varier fortement selon les substances, rendant son interprétation difficile lorsqu'il est considéré seul, à exposition équivalente. Pour faciliter cette analyse, un indice du potentiel de toxicité ($IPT_c(i)$) a été mis en place. Il permet de comparer plus facilement les substances entre elles. Bien que cet indice puisse théoriquement prendre en compte des valeurs comprises entre 0 et l'infini, il dépasse rarement 20. Il est calculé selon la formule suivante :

$$IPT_c(i) = \begin{cases} \ln(1,72 + T_c(i)) & \text{si } T_c \leq 1 \\ 1 + \ln(T_c(i)) & \text{sinon} \end{cases} \quad (55)$$

Où $T_c(i)$ représente le potentiel de toxicité de la substance « i » pour le compartiment « c » [-].

Sur la base des seuils écotoxicologiques définissant une substance présentant un faible risque, une valeur de l'IPT inférieure à l'unité indique un faible potentiel toxicologique, indépendamment du niveau d'exposition. En revanche, si l'IPT dépasse un certain seuil, cela suggère que la toxicité écosystémique moyenne excède le seuil associé à un risque élevé. Ce seuil est différent selon le compartiment analysé :

Tableau 7 : Seuil d'interprétation d'un risque élevé de l'IPT par compartiment environnemental

Compartiment	Valeur seuil d'un risque élevé de toxicité aigüe pour l'IPT
Eaux de surface	8
Milieu terrestre	5
Sol de culture	6

2) Indice de bioaccumulation

Le potentiel de bioaccumulation est détaillé dans la section 4.4. Pour rappel, il est évalué à partir de différents facteurs selon le compartiment environnemental concerné : le facteur de biomagnification (BMF) est utilisé pour évaluer la bioaccumulation chez le poisson (équation (9)) dans les eaux de surface et chez le loup (équation (10)) pour le milieu terrestre. Quant aux sols cultivés, le facteur de bioconcentration (BCF) est employé chez le ver de terre (équation (11)).

Les seuils d'interprétation du caractère bioaccumulable d'une substance varient selon le facteur utilisé et sont présentés dans le tableau ci-dessous. Ils sont définis à partir des études qui ont développé ces modèles QSAR, ainsi que des référentiels scientifiques et réglementaires établis par des institutions telles que REACH, l'US EPA ou l'OCDE. Ces seuils ont ensuite été adaptés aux facteurs de bioaccumulation du Phytorisque et sont présentés au Tableau 8.

Tableau 8 : Seuils d'interprétation pour les indices de bioaccumulation par compartiment environnemental

Compartiment	Seuils d'interprétation pour la bioaccumulation d'une substance			
	Indice de bioaccumulation	Pas de bioaccumulation	Potentiel modéré de bioaccumulation	Potentiel élevé de bioaccumulation
Eaux de surface	1+Log(BMF poisson +1)	1]-1- 1,67]	> 1,67
Milieu terrestre	1+Log(BMF loup +1)	1]-1 -1,30]	> 1,30
Sol de culture	1+Log(BCF ver de terre +1)	1]-1 -1,60]	> 1,60

3) Indice de transfert

Le facteur M de l'indice de risque correspond au facteur de mobilité, calculé à partir de différents modèles de transfert selon les compartiments environnementaux considérés (voir section 4.6).

Pour les eaux de surface et les eaux souterraines, ce facteur estime la fraction de la dose appliquée susceptible d'être transférée depuis la parcelle vers les compartiments aquatiques. Pour le milieu terrestre et les sols cultivés, le facteur M reflète la fraction de la substance appliquée susceptible d'interagir avec les organismes de ces compartiments.

Chaque composante du facteur M apporte ainsi une information quantifiée sur les voies de dispersion de la substance. Ces composantes peuvent être directement utilisées comme des indices permettant de

comparer les s.a. entre elles, par exemple en analysant leur volatilité relative, ou leur tendance à être entraînées par l'érosion des sols.

Dans le cas particulier du transfert vers les eaux souterraines, les valeurs du facteur de mobilité peuvent varier sur plusieurs ordres de grandeur, ce qui complique l'interprétation comparative du potentiel de lixiviation entre substances. Par conséquent, pour ce compartiment, il est nécessaire d'utiliser un indice. Un indice de lixiviation a donc été développé dans le cadre de l'outil Phytorisque.,

Basé sur la méthodologie d'évaluation du potentiel de lixiviation (cf. section 4.6.4), il repose sur le facteur d'atténuation (AF, déterminé en Annexe I:2.1.3). Le facteur d'atténuation quantifie la proportion de pesticide non dissipée à la sortie de la zone vadose (c'est-à-dire la zone non saturée du sol), lors de la migration verticale de la substance. L'indice de lixiviation vise à exprimer le potentiel de migration d'une s.a. vers les eaux souterraines, indépendamment de sa dose d'application. Dans le Phytorisque, cet indice est nommé AFLIX, il est calculé selon la formule suivante :

$$AFLIX(i) = \begin{cases} 0 & \text{si } AF = AFa(i) \cdot AFb(i) \cdot AFc(i) = 0 \\ \frac{-92,1}{\ln(AFa(i) \cdot AFb(i) \cdot AFc(i))} & \text{sinon} \end{cases} \quad (56)$$

Où AFa , AFb et AFc représentent les facteurs d'atténuation de la substance (i) calculés respectivement pour les couches a, b et c (équations (100) à (102)).

Selon cette formule, lorsque l'AF d'une substance est très faible, c'est-à-dire lorsque la substance est peu dissipée lors de sa migration à travers les différentes couches du sol, l'indice AFLIX est élevé, donc le potentiel de migration de la substance vers les eaux souterraines est élevé. L'indice AFLIX est interprété sur base d'une échelle semi-quantitative, permettant une classification plus intuitive du risque de contamination des eaux souterraines (Tableau 9).

Tableau 9 : Interprétation de l'indice AFLIX pour le compartiment des eaux souterraines

AFLIX	Niveau de probabilité de lixiviation
< 10	Improbable
10–20	Peu probable
20–40	Moyennement probable
40–66	Probable
> 66	Très probable

4.8.2.3 Indice d'évaluation prospective du risque

Ces indices visent à estimer le potentiel de danger ou d'exposition des s.a., qu'elles soient déjà utilisées ou simplement envisagées pour un usage futur. Ils reposent sur les facteurs de risque associés à une dose d'application de référence exprimée en kg/ha (voir section 4.5.3 pour le calcul de cette dose).

Le risque ou l'exposition sont donc évalués par unité de dose d'application, ce qui permet une comparaison entre substances, indépendamment de leur usage réel.

Cette dose de référence peut être adaptée selon le scénario considéré, notamment lorsque la culture cible et l'organisme visé sont connus. Dans un contexte de substitution, par exemple, il est recommandé d'utiliser la dose spécifique au couple culture/cible plutôt qu'une dose standard par s.a., car elle offre une estimation plus représentative du risque réel. La formule de l'indice de risque potentiel (IRP), d'une substance pour un compartiment donné, est la suivante :

$$IRP_c(i) = T_c(i) \cdot B_c(i) \cdot D_{ref}(i) \cdot M_c(i) \cdot P_c(i) \quad (57)$$

Où

- T_c correspond au facteur de toxicité calculée pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- B_c correspond au facteur de bioaccumulation calculée pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- $D_{ref}(i)$ correspond à la dose de référence par application pour la substance (i) [kg/ha] ;
- M_c correspond au facteur de mobilité calculée pour la substance (i) et le compartiment « c » ;
- P_c correspond au facteur de persistance calculée pour la substance (i) et le compartiment « c ».

L'IRP fournit ainsi un indice synthétique permettant de comparer le risque entre deux ou plusieurs s.a. entre elles, il permet de comparer des produits entre eux ou encore évaluer différents itinéraires techniques, et ce pour les différents compartiments de l'environnement. Cet indice peut être également normalisé par rapport à une molécule de référence, ce qui facilite son interprétation relative, en fonction des objectifs spécifiques de l'analyse.

Enfin, la comparaison de plusieurs s.a. ou scénarios peut faire l'objet d'une analyse plus détaillée sur les facteurs aggravants ou atténuants en comparant chacune des composantes du risque (T, B, Q, M, P).

5 Résultats

5.1 Cadre de l'analyse

5.1.1 Résultats sur une sélection de substances actives utilisées en 2022

Les résultats présentés proviennent de l'utilisation de s.a. appliquées en grandes cultures, sur les quinze secteurs agricoles les plus représentés en Wallonie. Bien que les prairies permanentes soient intégrées dans le modèle, l'analyse présentée dans les résultats se concentre exclusivement sur les secteurs de grande culture. Les conditions climatiques ainsi que les quantités estimées de s.a. reposent sur les données disponibles pour l'année 2022.

L'analyse se concentre sur un nombre restreint de s.a., toutes appliquées par pulvérisation et non incorporées au sol. Elle détaille les résultats obtenus pour les différents facteurs du risque dans les quatre compartiments de l'environnement. Pour rappel, les facteurs de toxicité et de bioaccumulation n'ont pas été évalués pour le compartiment des eaux souterraines, celui-ci n'étant pas associé à un écosystème naturel. Elle présente également l'IRG.

5.1.2 Analyse de sensibilité des facteurs d'exposition aux paramètres physico-chimiques

Une analyse de sensibilité du modèle a par ailleurs été réalisée afin de montrer les relations entre les paramètres physico-chimiques des s.a. et l'exposition. Cette analyse a été faite en faisant varier chaque paramètre afin d'isoler son effet sur les résultats du modèle. La plage de valeurs testées était comprise entre les 10^e et 90^e percentiles de la distribution des données correspondant à l'ensemble des s.a. utilisées en 2022, tandis que les autres paramètres ont été maintenus constants à leur valeur par défaut, fixée à la médiane de cette même distribution. Le Tableau 10 présente l'ensemble des valeurs par défaut ainsi que les percentiles retenus pour les paramètres fixés.

Tableau 10 : Valeurs statistiques des paramètres physico-chimiques utilisées par défaut pour les analyses de sensibilité du modèle

Paramètre physico-chimique	10 ^e percentile	90 ^e percentile	Médiane
Koc [$\text{mL}\cdot\text{g}^{-1}$]	28,55	$5,65 \times 10^4$	500
Pv,sat [mPa] (25 °C)	1×10^{-6}	3,2	1×10^{-4}
KH [$\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$]	$2,85 \times 10^{-13}$	$1,92 \times 10^{-5}$	1×10^{-8}
DT50 [j] – Biodégradation sol (20 °C)	0,5	200	100
DT50 [j] – Hydrolyse (pH 7, 20 °C)	8,9	$3,65 \times 10^2$	100
DT50 [j] – Photolyse aqueuse (pH 7, 20 °C)	0,35	$3,65 \times 10^2$	14

De plus, afin d'isoler l'effet de chaque paramètre sans que la variabilité intersaisonnière n'interfère, les paramètres saisonniers ont été lissés sur la moyenne annuelle d'une année représentative, considérée comme ni particulièrement sèche ni particulièrement pluvieuse. L'année 2023 répondant à ces critères, les données météorologiques de cette année ont été utilisées pour la réalisation de l'analyse de sensibilité.

5.2 Présentation des substances actives analysées

Un ensemble de 17 s.a. a été sélectionné afin de constituer un échantillon représentatif de la diversité des s.a. autorisées en Belgique. Cet échantillon comprend cinq fongicides et bactéricides (FONG), cinq herbicides, défanants et agents anti-mousse (HERB), cinq insecticides et acaricides (INSE) et deux régulateurs de croissance (REG).

Pour les trois premiers groupes, la sélection des s.a. visait à refléter la diversité des propriétés physico-chimiques prises en compte dans le modèle Phytorisque : coefficient de partage carbone organique/eau (K_{oc}), constante de Henry (K_H), pression de vapeur saturante ($P_{v,sat}$) et temps de demi-vies (DT_{50}) par dégradation biochimique dans le sol, par hydrolyse et par photolyse en milieu aqueux. Cette sélection a été réalisée à l'aide d'un algorithme de clustering, qui a regroupé l'ensemble des s.a. en 5 classes homogènes, puis identifié, pour chaque classe, la substance la plus proche du centroïde, considérée comme représentative de son groupe. Cette approche permet de rendre compte de l'adaptabilité du modèle Phytorisque à la diversité des paramètres physico-chimiques tout en réduisant la complexité du jeu de données. Concernant les régulateurs de croissance, l'analyse s'est limitée aux deux substances pour lesquelles toutes les données physico-chimiques nécessaires au modèle étaient disponibles. Le Tableau 11 répertorie les 17 s.a. analysées selon leur grand groupe ainsi que les valeurs de leurs paramètres physico-chimiques.

Tableau 11 : Classement des substances actives analysées selon leur nature et paramètres physico-chimiques

Nature (Grand groupe européen)	Substance active	K_{oc} [ml.g ⁻¹]	$P_{v,sat}$ [mPa], (25°C)	K_H [Pa.m ³ .mol ⁻¹]	DT ₅₀ [j]		
					Dégénération biochimique dans sol (20 °C)	Hydrolyse (pH 7, 20 °C)	Photolyse aqueuse (pH 7, 20 °C)
Insecticides et acaricides (INSE)	Lambda-cyhalothrine	$2,84 \times 10^5$	$2,00 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-2}$	175	168	>30
	Chlorantraniliprole	362	$6,30 \times 10^{-9}$	$3,20 \times 10^{-9}$	597	>365	0,3
	Acetamiprid	200	$1,00 \times 10^{-3}$	$5,30 \times 10^{-8}$	2	>365	>30
	Spirotetramate	289	$5,60 \times 10^{-6}$	$6,99 \times 10^{-8}$	0,2	9	26
	Phosmet	$3,53 \times 10^3$	$6,50 \times 10^{-2}$	$1,36 \times 10^{-3}$	3	0,3	5
Herbicides, défanants et agents anti- mousse (HERB)	Tembotrione	66	$1,10 \times 10^{-5}$	$1,71 \times 10^{-10}$	15	>365	>30
	Pendimethaline	$1,75 \times 10^4$	3,34	1,27	182	>365	21
	Prosulfuron	17	$3,50 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-4}$	62	>365	>30
	Triflusulfuron	66	$1,01 \times 10^{-2}$	$1,90 \times 10^{-5}$	15	32	14
	Clomazone	300	27	$5,90 \times 10^{-3}$	23	>365	>30
Fongicides et bactéricides (FONG)	Bixafene	$3,87 \times 10^3$	$4,60 \times 10^{-5}$	$3,90 \times 10^{-5}$	500	>365	>30
	Metconazole	589	$2,10 \times 10^{-5}$	$7,40 \times 10^{-9}$	85	>365	9
	Bromuconazole	872	$4,00 \times 10^{-3}$	$1,31 \times 10^{-5}$	679	30	>30
	Fluazinam	$1,64 \times 10^4$	$1,72 \times 10^{-2}$	$5,93 \times 10^{-2}$	124	9	1
	Fenpropidine	$7,18 \times 10^4$	17	3,39	93	>365	>30
Régulateurs de croissance (REG)	Éthéphon	$2,54 \times 10^3$	$4,50 \times 10^{-2}$	$6,50 \times 10^{-9}$	13	3	>30
	Hydrazide maléique	46	$3,10 \times 10^{-3}$	$4,10 \times 10^{-8}$	0,8	>365	>30

Note : dans la base de données PPDB, une substance active est considérée comme « stable » pour l'hydrolyse lorsque sa demi-vie dépasse 365 jours, et comme stable pour la photolyse aqueuse lorsque sa demi-vie dépasse 30 jours, par conséquent les valeurs « stables » ou supérieures à ce seuil ont été fixées à 365 et 30 jours respectivement.

5.3 Contexte pédoclimatique considéré pour l'étude

5.3.1 Contexte pédologique et hydrologique

Le modèle a été calibré pour des conditions représentatives des grandes cultures en Région Wallonne. Ces conditions ont été déterminées à partir d'analyses spatiales réalisées sur des données géographiques centrées sur les parcelles de grandes cultures (voir Section 2.5). Les principaux paramètres pédologiques et hydrologiques sont présentés dans le Tableau 12.

Tableau 12 : Valeurs représentatives des paramètres pédologiques et hydrologiques des sols en grandes cultures en Wallonie

Paramètre	Valeur représentative des grandes cultures en RW
Teneur en eau à la capacité au champ [-]	0,37
Teneur en eau moyenne du sol [-]	0,26
Pente moyenne des parcelles [%]	3,5
Teneur de carbone organique moyen du sol dans les 10 premiers cm de sol [%]	1,8
Densité moyenne du sol sec [g.cm ⁻³]	1,33
Facteur d'érodibilité du sol [t.h.mm ⁻¹ .MJ ⁻¹]	0,06

La distribution spatiale des grandes cultures en Wallonie est fortement polarisée : environ 63 % des grandes cultures se situent dans les régions limoneuse et sablo-limoneuse, et 20 % dans le Condroz ; les autres régions agricoles ne contribuent que marginalement. Les types de sols sont dominés par des sols limoneux (72 %), suivis des sols limon caillouteux (17 %) et des sols sablo-limoneux (7 %). De façon générale, les sols cultivés en grandes cultures présentent un déficit en matière organique attribuable au travail du sol, aux pertes par érosion et à l'intensification des pratiques ; la teneur moyenne en carbone organique dans l'horizon 0-10 cm est estimée à 1,8 %. D'un point de vue topographique, les pentes sont globalement plus faibles en région limoneuse que dans les régions situées au sud du sillon Sambre et Meuse, la pente moyenne en grandes cultures est de 3,5 %, niveau suffisant pour maintenir un risque d'érosion hydrique significatif.

La version actuelle du Phytorisque s'appuie sur des conditions hydropédologiques moyennes, représentatives des grandes cultures en Wallonie. Afin d'accroître la précision spatiale et la représentativité du modèle, la prochaine version intégrera des paramètres adaptés à chaque région agricole, rendant ainsi les conditions d'application des substances plus réalistes.

5.3.2 Contexte climatique

Les paramètres météorologiques utilisés pour produire les résultats sur les 17 s.a. utilisées en 2022 proviennent de la station de Sombreffe, située de façon centrale au regard des zones de grandes cultures en Wallonie. Le Tableau 13 présente les paramètres extraits de la base de données PAMESEB pour 2022 à cette station.

Tableau 13 : paramètres climatiques associés à la station météorologique de Sombreffe (PAMESEB) pour l'année 2022

Paramètre	Saison					Annuelle
	Hiver	Printemps	Eté	Automne		
Pluviométrie [mm]	108	133	123	132		496
Temps de retour d'une pluie [j]	6,4	8,0	5,6	4,1		6,0
Température moyenne [°C]	5,9	13,7	18,1	8,8		11,6

En 2022, les conditions ont été exceptionnellement sèches : à Sombreffe, le cumul annuel des précipitations atteint 496 mm, contre une normale d'environ 750 mm [44]. Le déficit s'est manifesté durant toutes les saisons, avec un nombre de jours de pluie inhabituellement faible et des températures moyennes anormalement élevées. Les précipitations quotidiennes les plus intenses sont restées modérées (≤ 22 mm/jour) et la recharge limitée des nappes, du fait des faibles apports pluviométriques et d'une évapotranspiration accrue.

Les conditions climatiques rencontrées en 2022 ont conditionné le risque lié à l'usage des PPP de deux façons complémentaires : d'une part les quantités de s.a. appliquées en grandes cultures, en particulier les fongicides, ont été nettement réduites en raison d'une faible pression pathogène, tandis que la pluviométrie déficiente, la faible fréquence et de l'intensité limitée des précipitations ont restreint les transferts par ruissellement et par lixiviation, diminuant la probabilité des substances appliquées d'atteindre des eaux de surface et les eaux souterraines.

Afin d'améliorer la représentativité et la précision des paramètres météorologiques, la prochaine version de Phytorisque intégrera les données issues des différentes stations météorologiques réparties sur le territoire, de manière à disposer d'informations spécifiques à chaque région agricole.

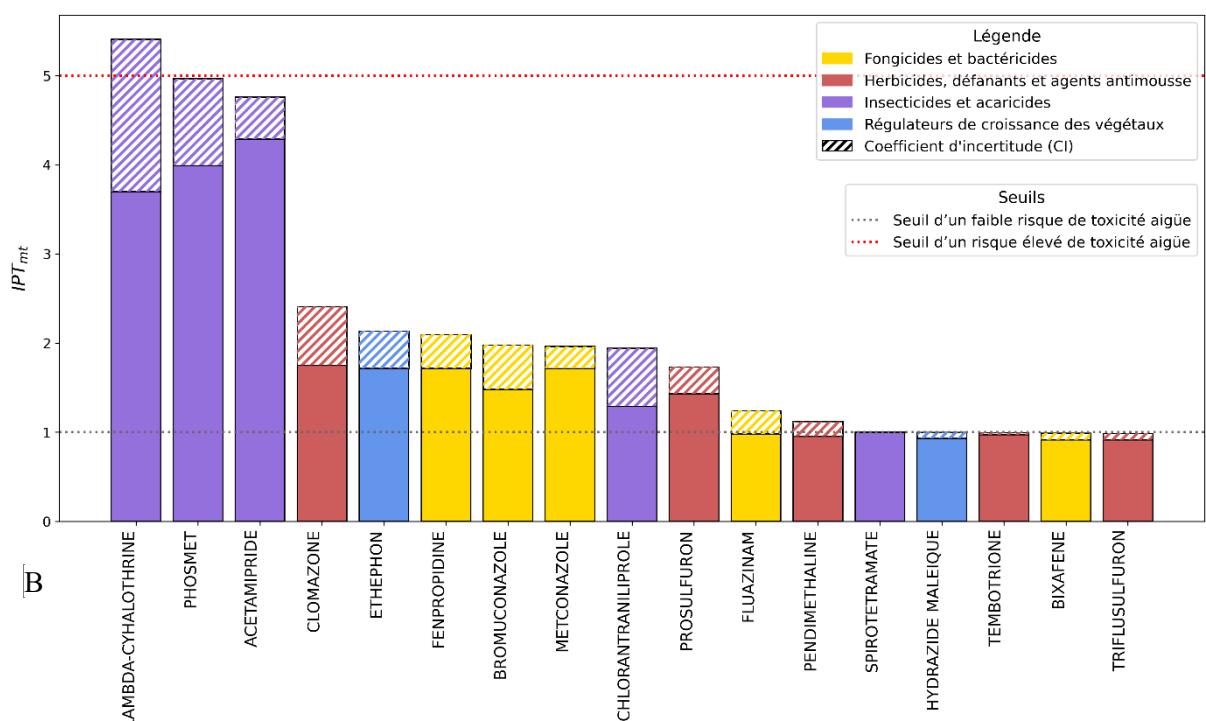
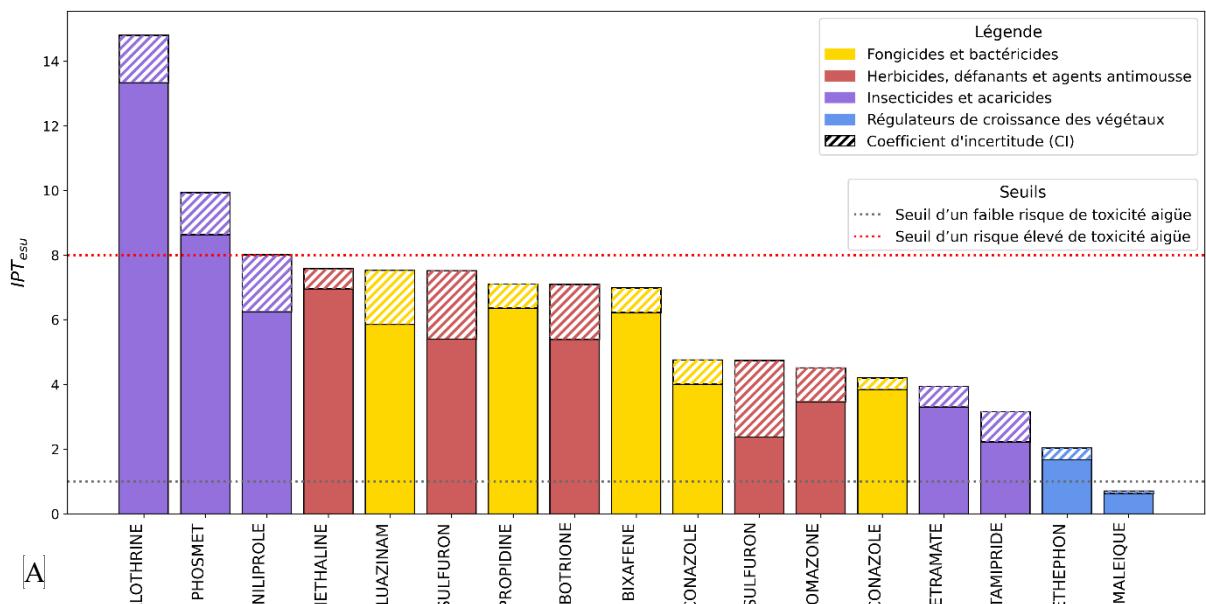
5.4 Présentation des résultats

5.4.1 Toxicité

Les valeurs de l'*indice du potentiel de toxicité* (IPT_c(i) décrit à la section 4.3) calculées pour les s.a. sélectionnées et pour les compartiments des eaux de surface, du milieu terrestre et des sols cultivés sont présentées à la Figure 7. Les seuils d'un risque faible et élevé de toxicité aigüe sont également présentés par les traits horizontaux.

Les résultats mettent en évidence que, pour les eaux de surface (Figure 7 A) et le milieu terrestre (Figure 7 B), et dans une moindre mesure pour les sols cultivés (Figure 7 C), les substances les plus dangereuses appartiennent au groupe des insecticides, en particulier la lambda-cyhalothrine, le phosmet et l'acétamiprid.

Ces graphiques montrent également le coefficient d'incertitude associée à l'IPT, qui dépend du nombre de taxons disponibles pour chaque compartiment et de la variabilité des valeurs écotoxicologiques entre les taxons d'un même écosystème. Le coefficient d'incertitude ne s'applique pas au compartiment des sols cultivés, étant donné que le facteur de toxicité ne tient compte que de la toxicité pour les vers de terre. Le coefficient d'incertitude peut accentuer le danger écotoxicologique de certaines substances pour lesquelles les données toxicologiques sont plus lacunaires. Par exemple, en milieu terrestre, la lambda-cyhalothrine est classée comme plus dangereuse que le phosmet et l'acétamiprid, en raison d'un coefficient d'incertitude plus élevé. Cette situation est justifiée par le fait qu'utiliser une substance, dont les effets sur les organismes, non-cibles sont mal connus constitue un risque en tant que tel.



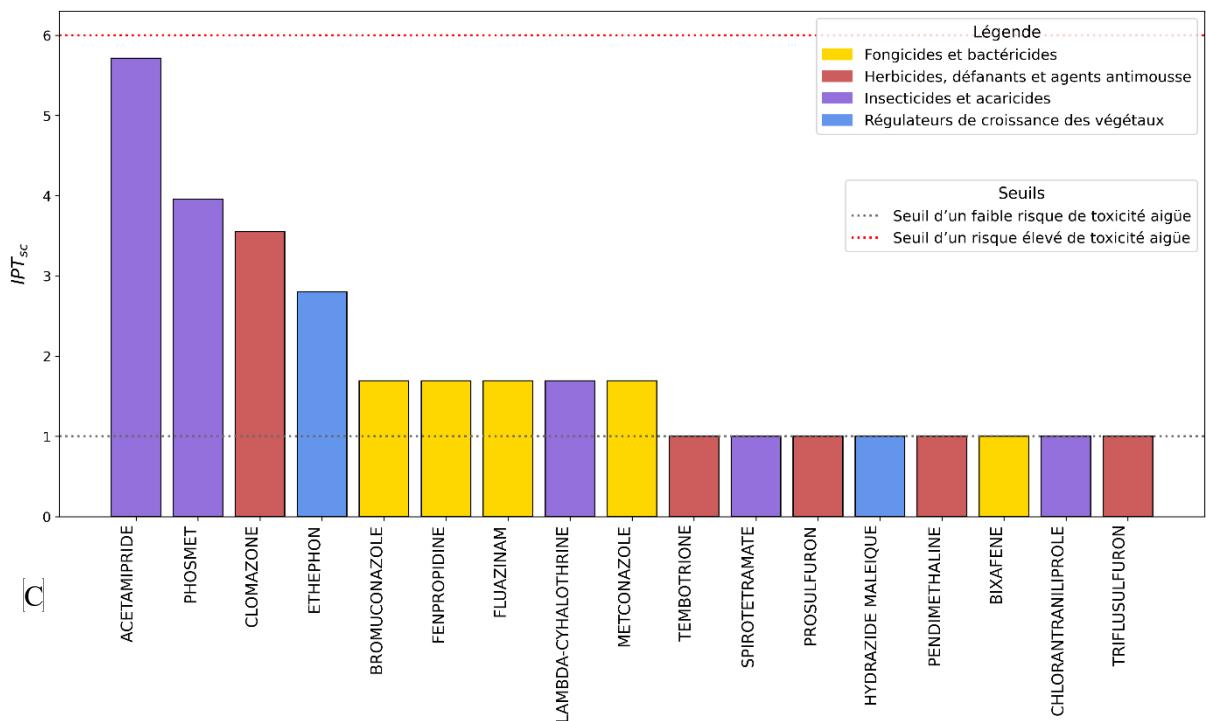
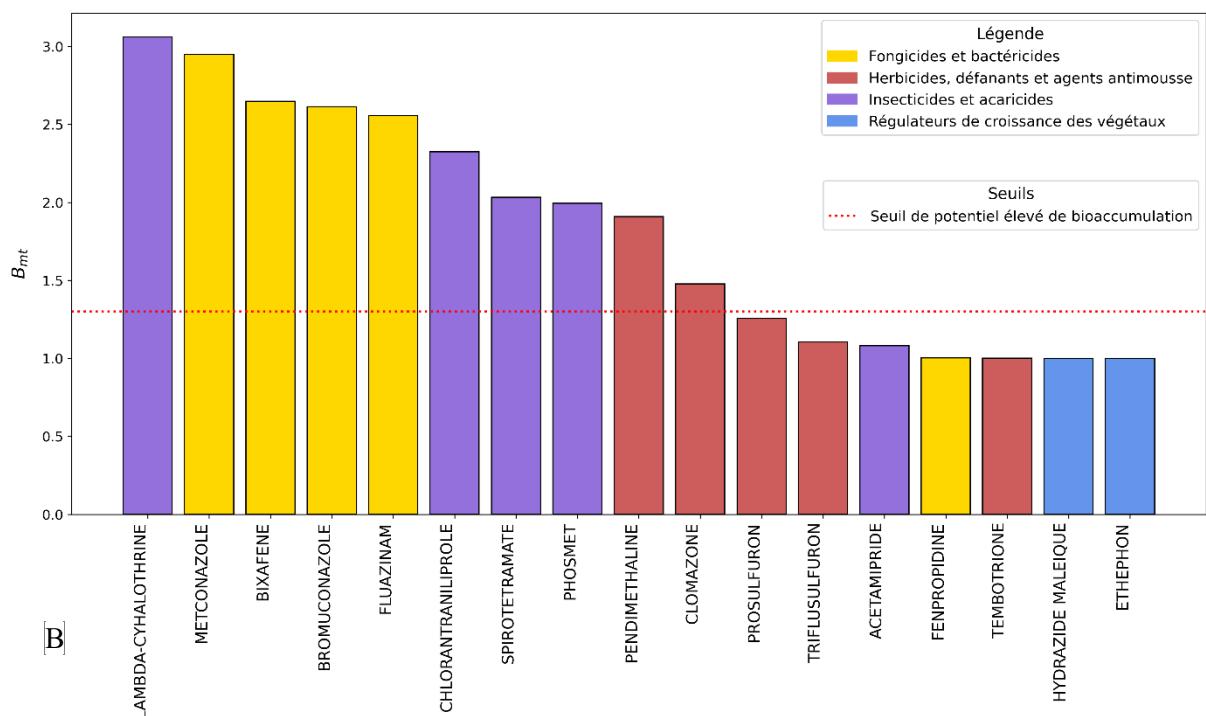
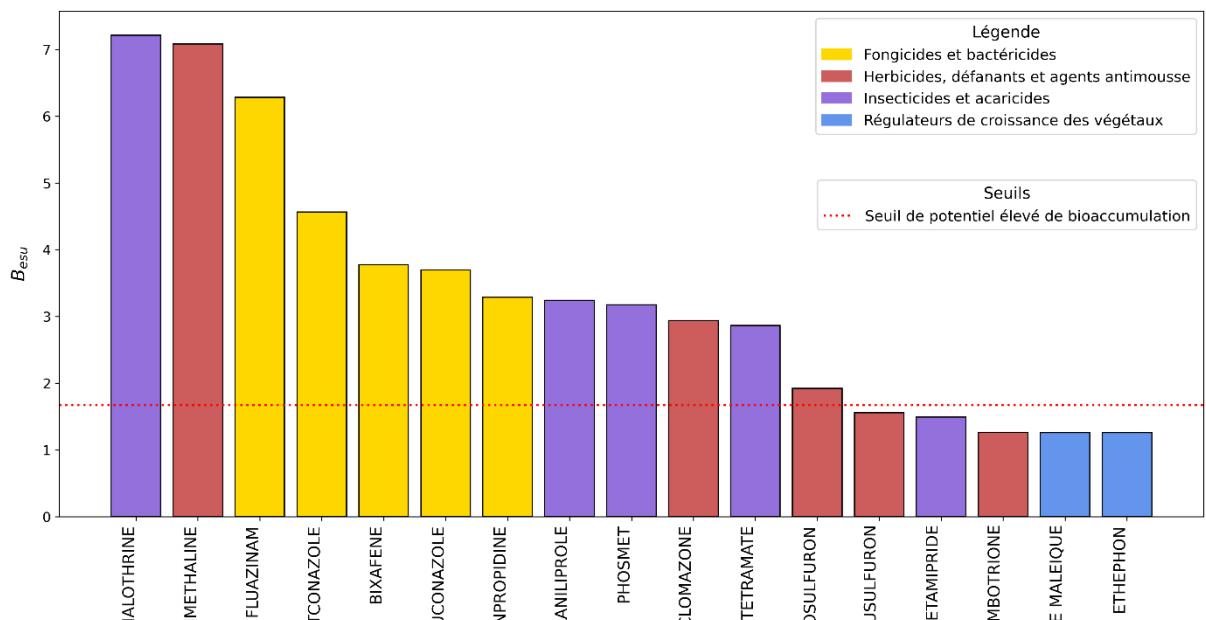


Figure 7 : Résultats de l'Indice du Potentiel de Toxicité (IPT) calculé pour les compartiments des eaux de surface (A), du milieu terrestre (B) et du sol de culture (C).

Enfin, il convient de rappeler que ces indices ont été élaborés à partir de tests de toxicité aiguë. Les données issues de tests de toxicité chronique sont plus rares, et leur prise en compte désavantage les substances pour lesquelles elles existent, ce qui complique les comparaisons entre substances. Il serait donc pertinent d'adapter la méthodologie afin d'intégrer ces données chroniques sans introduire de biais dans l'évaluation comparative.

5.4.2 Bioaccumulation

L'*indice de bioaccumulation* (facteur B), présenté à la section 4.4, pour les s.a. sélectionnées est présenté à la Figure 8 pour les différents compartiments. Cet indice met en évidence l'accentuation du danger écotoxicologique liée aux phénomènes de bioaccumulation. En l'absence de bioaccumulation, l'indice prend la valeur 1. Plus le potentiel de bioaccumulation est élevé, plus le danger est amplifié (l'indice est >1).



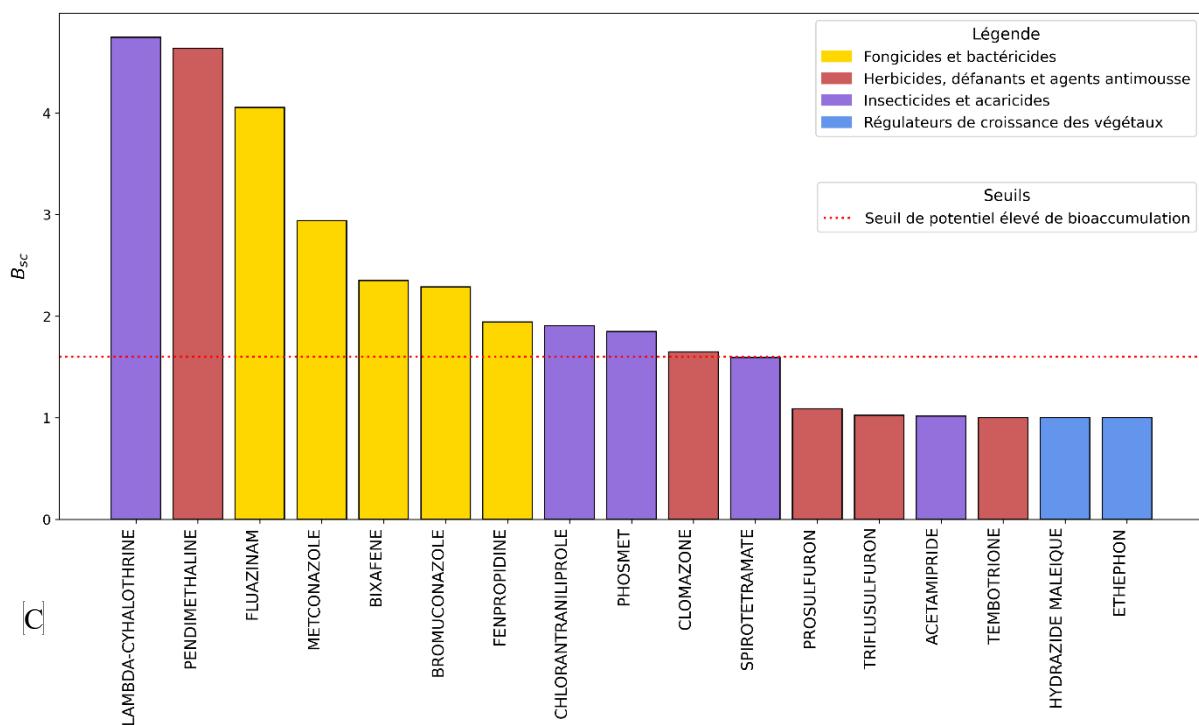


Figure 8 : Résultats du potentiel de Bioaccumulation (B) calculé pour les compartiments des eaux de surface (A), du milieu terrestre (B) et du sol de culture (C)

L’analyse des graphiques montre que les substances à fort potentiel de bioaccumulation, comme la lambda-cyhalothrine, présentent un indice de bioaccumulation élevé dans l’ensemble des compartiments. Ce résultat s’explique par leur caractère lipophile, qui favorise leur accumulation dans les graisses et tissus biologiques, quel que soit l’écosystème considéré.

Pour le sol cultivé (Figure 8 C), le classement obtenu est similaire à celui des eaux de surface (Figure 8 A). Dans ces deux compartiments, le modèle QSAR utilise plusieurs paramètres, dont la plupart sont fixés pour l’ensemble des substances ; parmi eux, seul le coefficient de partage octanol/eau (K_{ow}) varie et influence ainsi le potentiel de bioaccumulation. En revanche, pour les organismes du milieu terrestre (Figure 8 B), le classement peut différer, car le modèle QSAR mobilisé intègre non seulement le K_{ow} , mais également le coefficient de partage octanol/air (K_{oa}), afin de tenir compte des échanges liés à la respiration.

Afin d’illustrer ce phénomène et dans le cadre de l’analyse de sensibilité du modèle, la Figure 9 présente une carte de chaleur représentant la variation du facteur de bioaccumulation pour les organismes du milieu terrestre en fonction des K_{ow} et K_{oa} . L’intensité de la couleur rend compte de la valeur du facteur de bioaccumulation. Il apparaît que, lorsqu’une substance présente un faible K_{oa} , son potentiel de bioaccumulation le long de la chaîne trophique demeure limité, quel que soit son degré de lipophilie. Par exemple, la fenpropidine, bien qu’elle présente un fort potentiel de bioaccumulation chez les organismes aquatiques, s’accumule plus difficilement le long de la chaîne trophique des organismes terrestres en raison de sa forte volatilité.

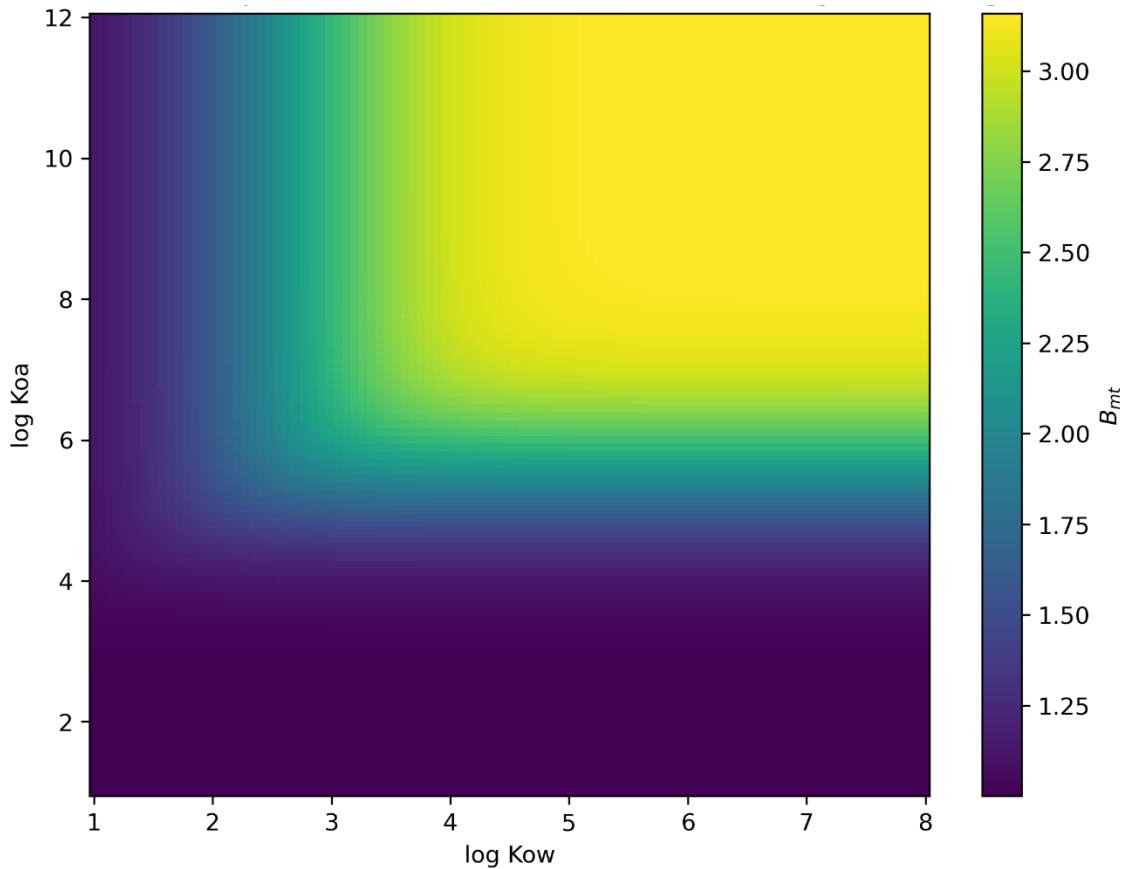


Figure 9 : Analyse de sensibilité - Évolution du facteur B_{mt} en fonction du K_{ow} et du K_{oa}

5.4.3 Quantité utilisée et indice d'usage

Les quantités de s.a. utilisées en Wallonie estimées pour 15 secteurs agricoles relevant des grandes cultures [30] sont présentées à la Figure 10. Parmi celles-ci, l'hydrazide maléique, employée principalement comme régulateur de croissance sur la pomme de terre (hors traitements post-récolte), ressort comme la substance la plus utilisée avec près de 25 tonnes en 2022. Elle est suivie par la pendiméthaline, un herbicide appliqué sur différentes cultures, et par la fenpropididine, un fongicide majoritairement utilisé sur la culture de betterave.

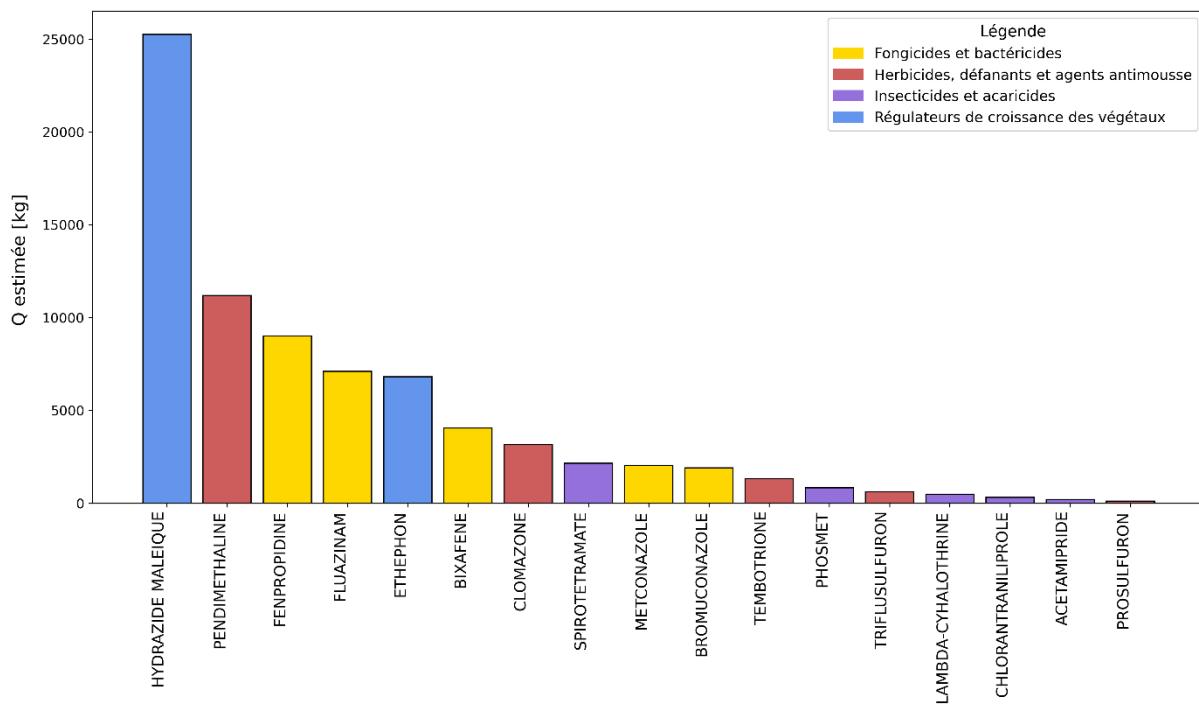


Figure 10 : Quantités estimées (kg) des substances actives sélectionnées, appliquées sur les grandes cultures en Wallonie pour l'année 2022

La Figure 11 illustre les doses de référence de chacune de ces s.a. en grandes cultures (la méthode pour calculer la dose de référence est présentée à la section 4.5.3). Lorsque cette dose varie selon les cultures, une moyenne pondérée, calculée en fonction des quantités utilisées par culture [30], est appliquée afin d'obtenir une valeur représentative pour l'ensemble des grandes cultures. Par conséquent la dose de référence pour les grandes cultures peut varier d'une année à l'autre.

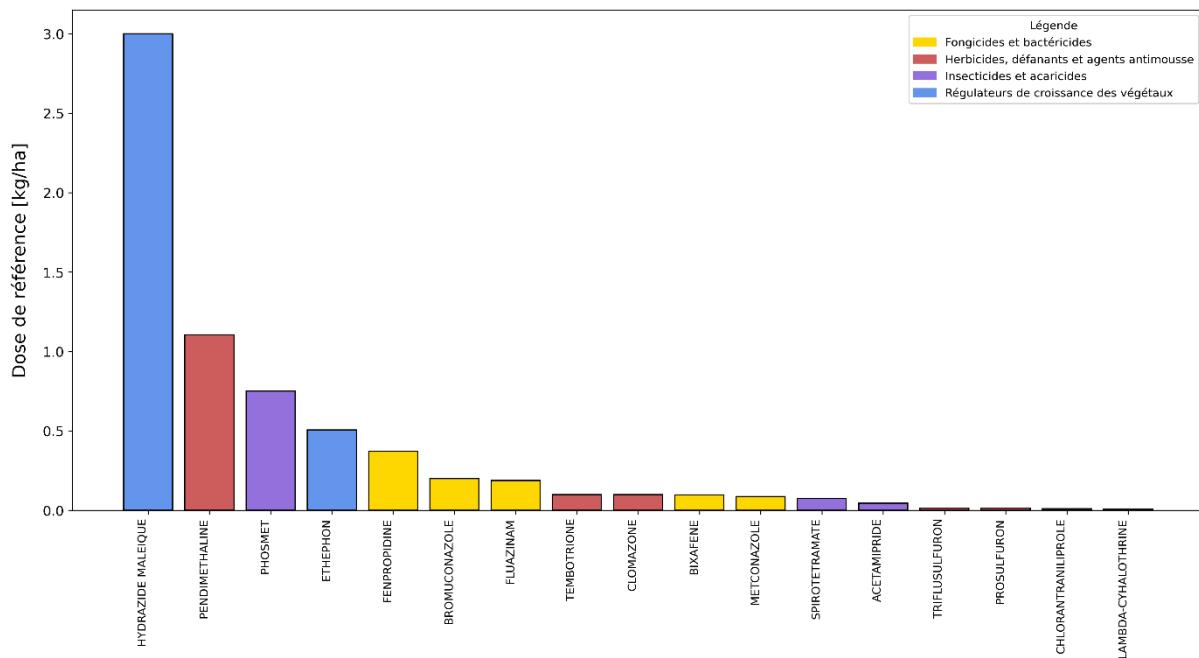


Figure 11 : Dose de référence (kg/ha) des substances actives sélectionnées, en grandes cultures en Wallonie pour l'année 2022

L'hydrazide maléique apparaît comme la substance la plus utilisée en termes de quantités absolues. Toutefois, cette prédominance quantitative ne reflète pas nécessairement une diffusion large de son usage, c'est-à-dire un recours fréquent aux PPP contenant cette s.a. par les exploitants agricoles. Or, ce paramètre ne peut être directement déduit des quantités totales appliquées.

Deux autres indicateurs permettent d'apprécier plus finement la dépendance d'un secteur agricole à l'égard d'une s.a. donnée : d'une part le *pourcentage d'utilisateurs*, disponible dans les données d'utilisation de Corder [30] et d'autre part la *Superficie Impactée par la Dose référence* (SID), exprimée en hectare. Celle-ci est calculée comme le rapport entre la quantité utilisée et la dose de référence. Ce dernier indicateur est présenté à la Figure 12 et correspond à la surface théorique pouvant être traitée par la dose de référence (Figure 11). Le SID ne reflète toutefois pas la superficie réellement traitée, puisqu'une double application d'une même s.a. sur une parcelle donne une valeur double la valeur de la SID.

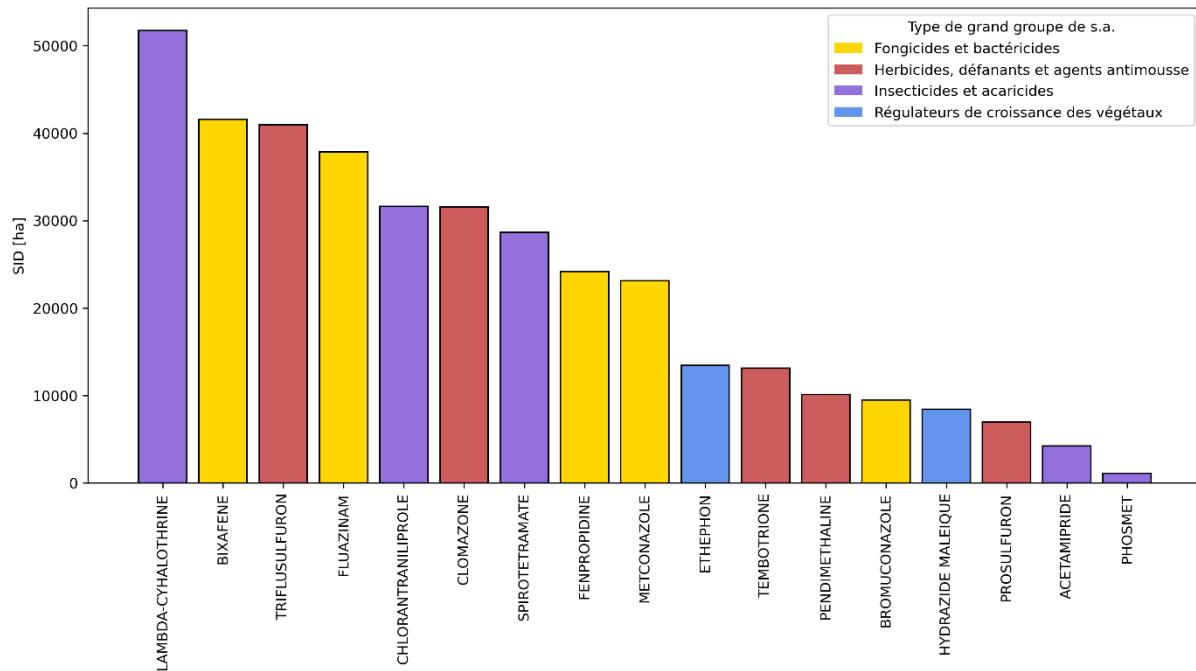


Figure 12 : Superficie impactée par la dose de référence (SID) pour les substances actives sélectionnées en grandes cultures et pour l'année 2022.

En analysant la Figure 12, selon la SID, l'hydrazide maléique, qui occupait la première position en quantité absolue, se situe désormais en 14^e position : elle n'est utilisée que par environ 6 % des exploitations en grande culture. À l'inverse, la lambda-cyhalothrine, bien que faiblement appliquée en termes de quantité en 2022 (14^e position), apparaît comme la substance la plus utilisée, avec une SID de plus de 50 mille hectares et près de 43 % des exploitations en grande culture y ayant recours.

5.4.4 Mobilité

Le facteur M évalue la propension d'une substance à être transférée vers un compartiment ou à constituer une source d'exposition pour les organismes associés au compartiment considéré. Ce facteur est présenté pour les compartiments des eaux de surface, des eaux souterraines et du milieu terrestre. Pour les sols cultivés, ce facteur correspond simplement à la quantité non interceptée par le couvert de culture.

Il convient de préciser que les valeurs du facteur M sont calculées pour des substances appliquées en grandes cultures, tous secteurs d'utilisation confondus. Cependant, ce facteur dépend étroitement de la culture sur laquelle la s.a. est appliquée, notamment via le facteur d'interception (section 4.6.1) et la saison d'application (section 4.5.1) des différents types de PPP sur les cultures, entraînant une variation

du facteur M d'une culture à l'autre pour une même s.a. Afin d'obtenir une valeur représentative à l'échelle des grandes cultures, une pondération des facteurs M issus de chaque culture a été réalisée en fonction des quantités de s.a. utilisées en 2022 dans chacun de ces secteurs.

5.4.4.1 Facteur de mobilité vers les eaux de surface

Le potentiel de transfert vers les eaux de surface (voir 4.6.3) calculé pour les s.a. sélectionnées est présenté à la Figure 13. Sur ce graphique, la fraction transportée sous forme dissoute est distinguée de la fraction transportée sous forme particulaire (en hachuré). Parmi les s.a. sélectionnées, le chlorantraniliprole possède le plus fort potentiel de transfert vers les eaux de surface, suivie par le bromuconazole et le prosulfuron. Pour les deux premières s.a., ce résultat est expliqué par leur grande persistance dans le sol tandis que le potentiel du prosulfuron s'explique avant tout par son faible K_{oc} . Ce potentiel reste toutefois fortement dépendant des conditions climatiques et donc de l'année d'application. En effet, lors des années sèches où les précipitations sont peu fréquentes, la DT_{50} des s.a. dans le sol devient un paramètre déterminant vis-à-vis du potentiel de transfert vers les eaux de surface. A l'inverse, lors d'années humides, le temps entre deux épisodes pluvieux sera plus faible, et l'impact de la vitesse de dégradation des s.a. sera moins important. Ainsi, l'année 2022 fut caractérisée par une pluviométrie exceptionnellement faible, et les substances à faible persistance ont présenté une probabilité très limitée d'atteindre les eaux de surface. C'est le cas du spirotétramate et de l'hydrazide maléique, dont la DT_{50} est inférieure à un jour et qui figurent parmi les substances qui présentent les potentiels de transfert les plus bas.

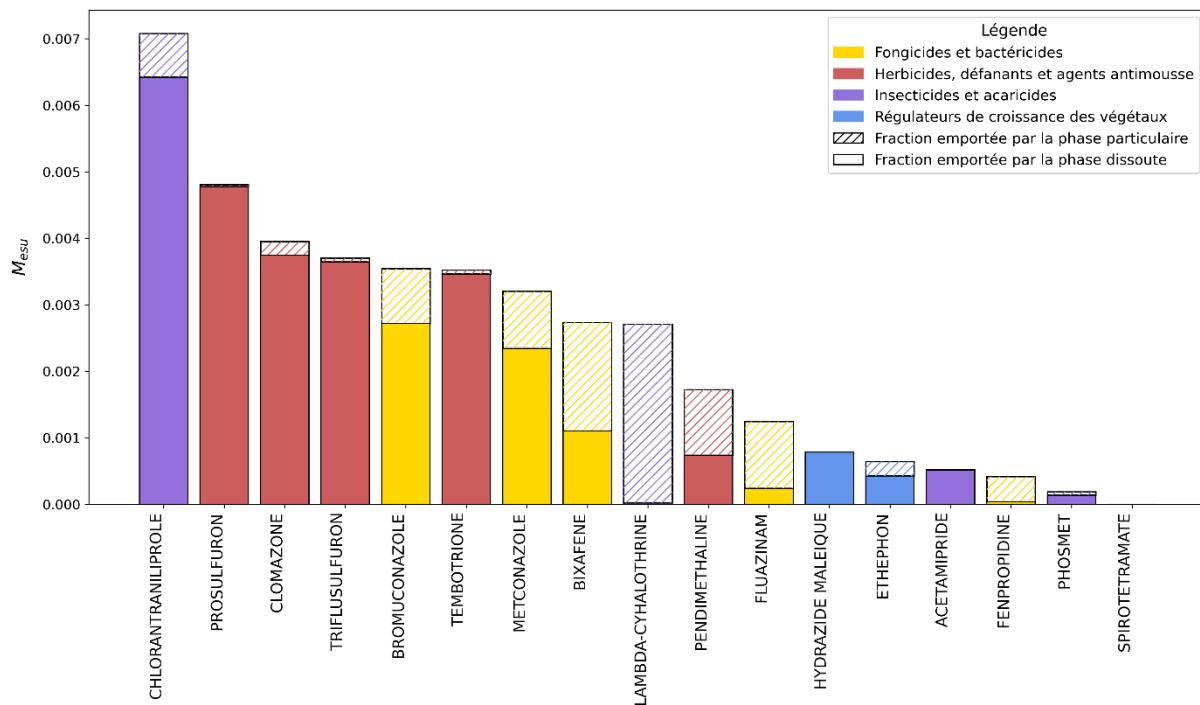


Figure 13 : Résultats du facteur de Mobilité (M) calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en 2022 en grandes cultures pour le compartiment des eaux de surface

La Figure 14 illustre la sensibilité du potentiel de transfert des s.a. vers les eaux de surface en fonction de la demi-vie dans le sol (DT_{50} sol). De manière générale, la plage critique où les variations de la DT_{50} sol exercent le plus d'effet se situe entre 0 et 50 jours, ce qui correspond aux observations de la littérature [45].

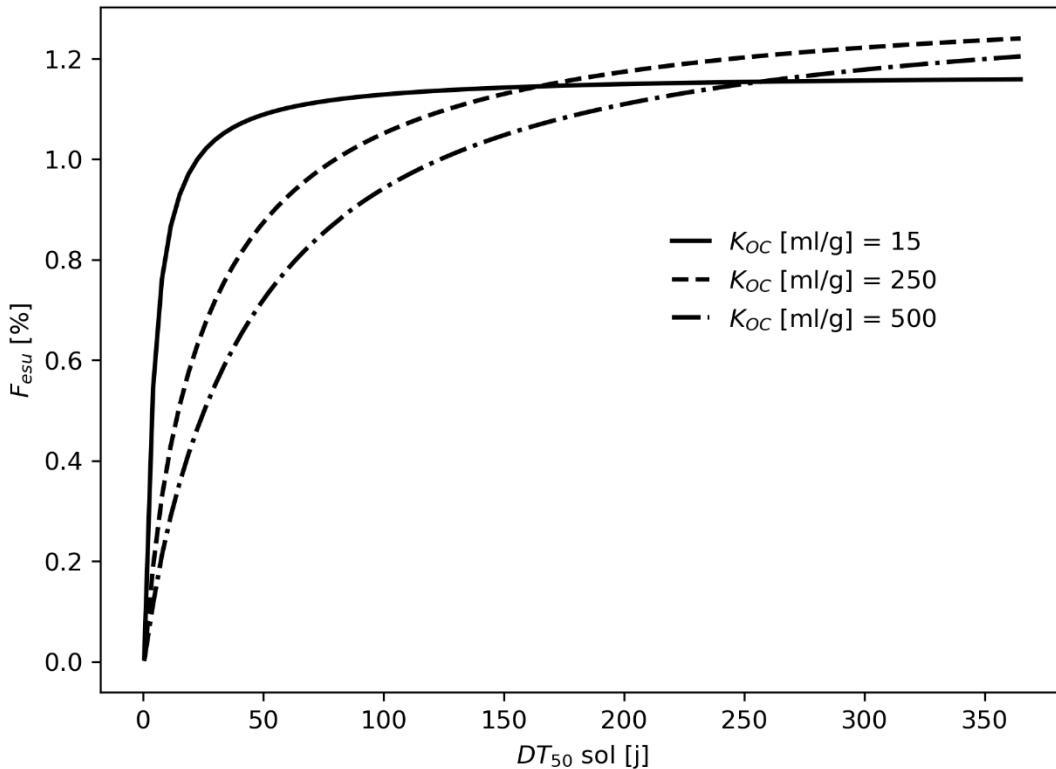


Figure 14 : Analyse de sensibilité - Potentiel de transfert des substances actives utilisées en grandes cultures vers les eaux de surface en fonction du temps de demi-vie (DT_{50}) dans les sols, pour différentes valeurs de K_{oc} , dans le contexte pédoclimatique de la Wallonie.

Un second facteur déterminant du transfert vers les eaux de surfaces est la mobilité de la substance en phase dissoute, évaluée par son K_{oc} . L'influence de ce paramètre sur le potentiel de transfert dépend étroitement des conditions climatiques et géographiques qui modulent l'importance des phénomènes de ruissellement et d'érosion. En général, une substance très mobile comme le prosulfuron (faible K_{oc}), est facilement entraînée par les eaux de ruissellement sous forme dissoute, ce qui lui confère un potentiel de transfert élevé indépendamment des conditions d'érosion. Toutefois, dans les zones où l'érosion est présente, même des substances peu mobiles peuvent être transportées de manière significative sous forme particulaire [46]. En Wallonie, l'érosion constitue un processus relativement important, et ce mode de transfert peut parfois dépasser en importance celui en phase dissoute. C'est notamment le cas de la lambda-cyhalothrine : malgré une forte capacité d'adsorption, son potentiel de transfert reste élevé, car elle est quasi exclusivement transportée sous forme particulaire comme le montre la Figure 13.

La météorologie, et notamment l'intensité des précipitations, accentue ces dynamiques : des pluies fortes renforcent les phénomènes d'érosion et donc le rôle du transport particulaire. Concernant l'année 2022, elle fut marquée par des précipitations peu intenses, ce qui a limité la capacité des substances peu mobiles à être entraînées par érosion.

La Figure 15 illustre la sensibilité du potentiel de transfert aux eaux de surface en fonction du K_{oc} , pour différentes valeurs de demi-vie dans le sol (à droite), et en distinguant le transport par la phase dissoute et la phase particulaire (à gauche). Dans le graphique de droite, les courbes correspondant aux s.a. les plus persistantes (courbe associée à une DT_{50} de 500 jours, et dans une moindre mesure la courbe associée à la DT_{50} de 150 jours), présentent, pour les plus faibles valeurs de K_{oc} , un potentiel de transfert qui n'est pas maximal. Cela peut sembler contre-intuitif : on pourrait penser qu'une substance extrêmement mobile serait très facilement transférée. Toutefois l'extrême mobilité de la substance

entraîne un lessivage vertical plus rapide dès le premier épisode pluvieux. La substance migre ainsi sous la couche de mélange superficielle, et devient inaccessible au ruissellement des épisodes pluvieux suivants. Le potentiel de transfert vers les eaux de surface est donc légèrement plus limité, malgré la très forte mobilité. Lorsque le K_{oc} est légèrement plus élevé, la substance devient légèrement moins mobile, et donc moins sujette au lessivage vertical immédiat. Elle reste donc plus longtemps dans la couche de mélange, ce qui permet une mobilisation par ruissellement sur plusieurs épisodes pluvieux. Cela entraîne une augmentation du potentiel de transfert, jusqu'à atteindre un maximum sur la courbe. Cette observation est en accord avec les résultats présentés dans la littérature [47] [48] et ce phénomène est accentué sur des sols sableux et pauvres en matière organique.

Après ce maximum local, le potentiel de transfert tend à diminuer avec l'augmentation du K_{oc} . Toutefois, cette décroissance n'est pas linéaire : elle tend à s'atténuer pour les valeurs de K_{oc} plus élevées, car la diminution du transport en phase dissoute est progressivement compensée par une contribution croissante du transport en phase particulaire (graphique de gauche de la Figure 15).

Dans le modèle, les transferts vers les eaux de surface sont considérés de manière cumulative sur les épisodes pluvieux qui s'effectue en post-application. Lors du premier épisode, le transport s'effectue principalement sous forme dissoute, la voie particulaire restant limitée. En revanche, pour des substances moins mobiles, mais persistantes, les épisodes ultérieurs peuvent mobiliser progressivement la fraction adsorbée via l'érosion. Ce mécanisme entraîne un transfert diffus dans le temps, généralement à des concentrations plus faibles, mais qui contribue à prolonger la durée d'exposition des écosystèmes aquatiques.

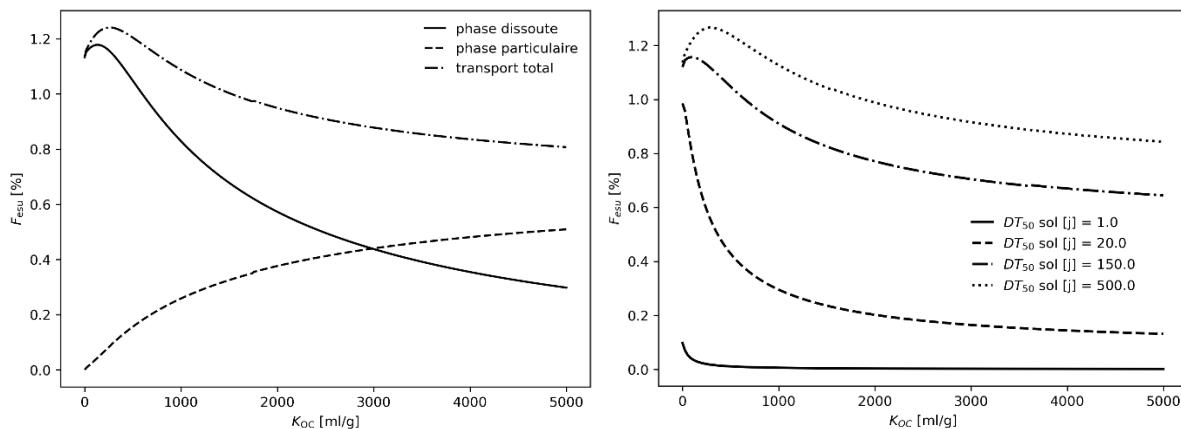


Figure 15 : Analyse de sensibilité - Potentiel de transfert des substances actives utilisées en grandes cultures vers les eaux de surface en fonction du K_{oc} pour différentes valeurs du temps de demi-vie dans les sols (à droite) et en distinguant la phase dissoute et la phase particulaire (à gauche) dans le contexte pédoclimatique de la Wallonie.

5.4.4.2 Facteur de mobilité vers les eaux souterraines

Le facteur M relatif aux eaux souterraines (voir 4.6.4) a été évalué pour l'ensemble des s.a. sélectionnées. Il représente le potentiel de transfert des substances vers les nappes phréatiques, en estimant la fraction atteignant des profondeurs supérieures à 2 mètres du sol. Selon les s.a. considérées, ce potentiel varie sur plusieurs ordres de grandeur, rendant l'interprétation des résultats difficile. Afin de faciliter la comparaison entre substances, ce potentiel de transfert vers les eaux souterraines a été converti en un indice de lixiviation, dénommé AFLIX (voir 4.8.2.2). Les valeurs d'AFLIX obtenues pour les substances sélectionnées sont présentées à la Figure 16.

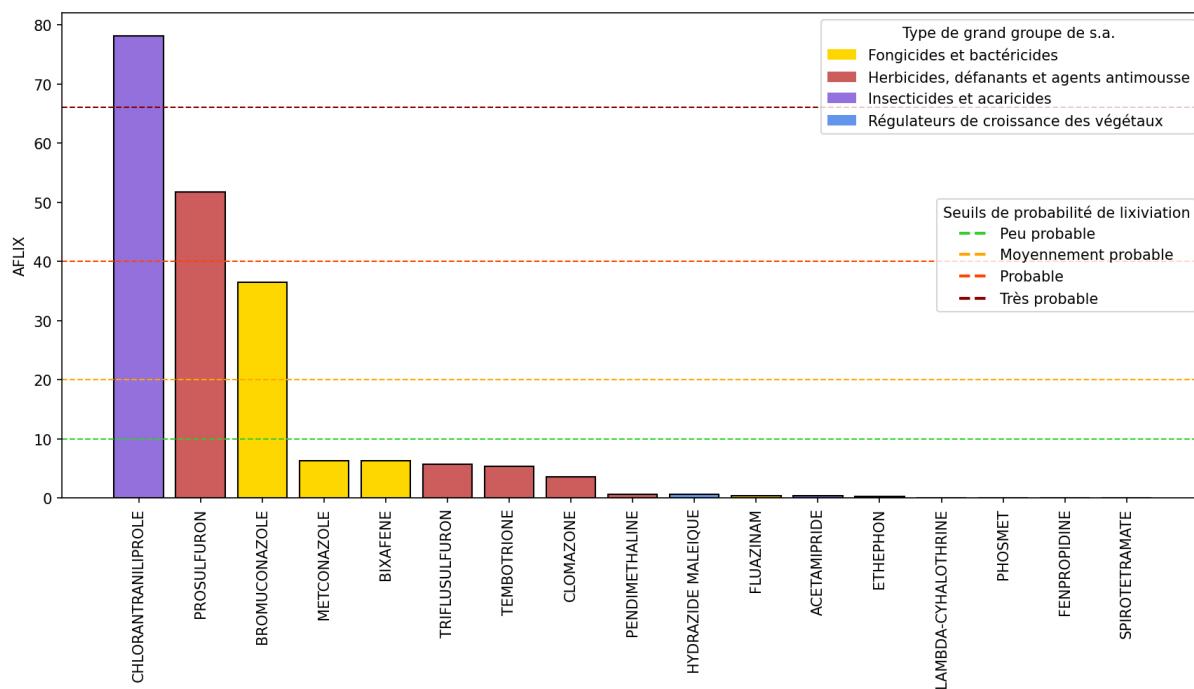


Figure 16 : Résultats de l'indice du potentiel de transfert vers les eaux souterraines (AFLIX) calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en grandes cultures en 2022

Les conditions météorologiques, en particulier les quantités de précipitations annuelles et saisonnières, impactent le processus de lixiviation des s.a.. La recharge des nappes fut limitée en 2022, ce qui a réduit le risque de contamination des eaux souterraines. Néanmoins, parmi les 17 substances évaluées, trois présentent un potentiel de lixiviation significatif : le chlorantraniliprole, pour lequel le potentiel de lixiviation est jugé très probable, suivi du prosulfuron et du bromuconazole, dont les potentiels de lixiviation sont respectivement qualifiés de probable et de moyennement probable. Pour les autres s.a., la probabilité d'atteindre les nappes phréatiques dans le contexte climatique de la Wallonie en 2022 reste faible.

Au-delà de l'influence des conditions météorologiques saisonnières, deux paramètres physico-chimiques des s.a. déterminent leur potentiel de lixiviation :

- Le K_{oc} ,
- La DT_{50} dans le sol, qui dépend des conditions d'humidité et de température.

La Figure 17 illustre la sensibilité du transfert par lixiviation à ces deux paramètres : à droite en fonction du K_{oc} et à gauche en fonction de la demi-vie dans le sol. Dans le contexte pédoclimatique de la Wallonie, la zone critique de sensibilité est observée pour des K_{oc} compris entre 0 et 500 $mL \cdot g^{-1}$. Au-delà de cette plage, le potentiel de lixiviation devient extrêmement faible, quelle que soit la DT_{50} . En effet, la migration dans le sol est suffisamment lente pour que la s.a. soit quasi entièrement dégradée avant qu'elle n'atteigne les eaux souterraines.

La solubilité a également une influence sur la lixiviation, en particulier lorsque celle-ci est très faible. Son influence reste cependant limitée, car les concentrations environnementales après application sont

généralement largement inférieures à la solubilité maximale des substances [48] [49] [50], ce paramètre n'a donc pas été pris en compte dans le modèle.

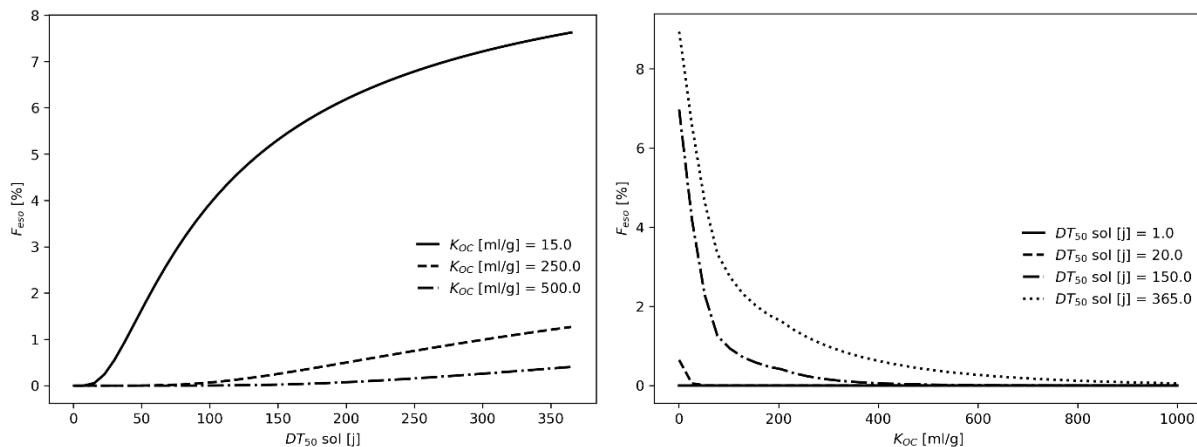


Figure 17 : Analyse de sensibilité - Potentiel de transfert des substances actives utilisées en grandes cultures vers les eaux souterraines en fonction du K_{OC} pour différents temps de demi-vie du sol (DT_{50}) (à droite) et en fonction de la demi-vie dans le sol (DT_{50}) pour différentes valeurs du coefficient octanol – eau (K_{OC}) (à gauche) dans le contexte pédo climatique de la Wallonie.

Dans sa version actuelle, le modèle Phytorisque présente deux limites dans l'évaluation du risque pour les eaux souterraines :

- Le modèle ne prend pas en compte la problématique des résidus de dégradation des s.a., appelés métabolites. Ainsi, une substance qui se dégrade rapidement a peu de chances d'atteindre les eaux souterraines, mais ses produits de dégradation peuvent présenter une mobilité et une persistance plus importantes¹².
- Le modèle ne prend pas en compte le transfert par macroporosité. Certains sols, comme les argiles gonflantes, contiennent une fraction non négligeable de macropores, qui constituent des voies préférentielles de lixiviation. Dans ces cas, le transfert est beaucoup plus rapide et moins dépendant de l'adsorption sur la matière organique.

Ces deux aspects représentent donc des perspectives d'amélioration du modèle.

5.4.4.3 Facteur de mobilité pour le milieu terrestre

Le facteur M en milieu terrestre (voir 4.6.5) évalue la tendance d'une s.a. à constituer une source potentielle d'exposition pour les organismes non-cibles. Il prend en compte la mobilité des organismes depuis leur habitat naturel vers les zones cultivées, et la dispersion des s.a. appliquées vers ces habitats.

Le facteur M_{mt} a été calculé pour les s.a. sélectionnées (Figure 18). Les résultats indiquent que, parmi les substances sélectionnées, la fenpropidine présente le facteur de mobilité le plus élevé, tandis que l'hydrazide maléique affiche la valeur la plus faible. Cependant, les écarts observés entre s.a. sont assez faibles. Cela suggère que le facteur M_{mt} a un poids limité dans la différenciation des substances sélectionnées lors du calcul de l'IRG.

¹² C'est notamment le cas des s.a. PFAS qui se dégradent en acide trifluoroacétique, molécule problématique pour les eaux-souterraines étant donné sa grande mobilité ($K_{\text{OC}} = 6.22 \text{ ml/g}$) et sa forte persistance ($DT_{50} \text{ sol} = 1000 \text{ j}$).

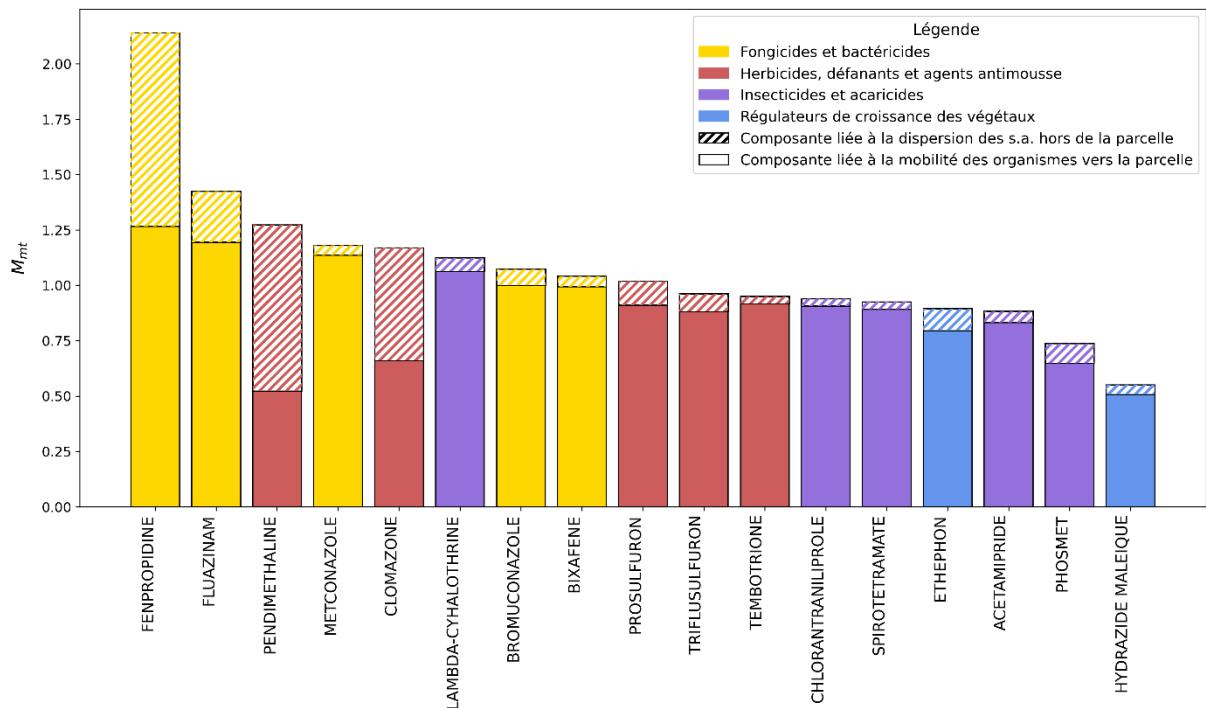


Figure 18 : Résultats du facteur de mobilité en milieu terrestre calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en grandes cultures pour une interception de 55%

Deux composantes influencent principalement ce facteur :

- **L'interception du produit par le couvert végétal** : plus l'interception est importante, plus les organismes se déplaçant sur la culture (pollinisateurs, oiseaux, rongeurs) sont susceptibles d'être exposés à la s.a. Cette composante correspond à la partie pleine des barres du graphique de la Figure 18.
- **La fraction dispersée hors de la zone traitée** par volatilisation et/ou érosion : cette fraction peut en effet se propager vers les habitats écologiques adjacents à zone traitée. Plus une substance est volatile ou susceptible d'être transportée par érosion, plus son facteur de mobilité sera élevé. Cette seconde composante correspond à la partie hachurée des barres du graphique de la Figure 18.

Les résultats montrent que la part associée à la dispersion (en hachuré) reste relativement faible pour la majorité des substances, à l'exception notable de la fenpropidine et de la pendiméthaline. Ces deux molécules se distinguent par leur forte volatilité et leur propension élevée à être dispersées dans l'environnement par érosion, en raison d'un K_{oc} élevé combiné à une persistance moyenne.

Le graphique de la Figure 19 montre la sensibilité du facteur M à la pression de vapeur ($P_{v,sat}$) pour différentes valeurs de K_{oc} , dans le cas d'une interception de 55 % de la substance par le couvert de culture. Ces deux paramètres sont en effet les plus déterminants pour ce facteur. Le K_{oc} influence principalement la part transportée par érosion, tandis que la pression de vapeur saturante conditionne la volatilisation de la s.a. depuis le couvert végétal.

Cependant, à 55 % d'interception, l'effet du K_{oc} reste très limité : la fraction transférée par érosion vers le milieu terrestre est négligeable par rapport à la fraction volatilisée depuis le couvert. Son influence devient plus marquée lorsque la majeure partie de la substance atteint effectivement le sol. Enfin, la constante de Henry intervient elle aussi dans le facteur M, en modulant la volatilisation depuis le sol et

donc la dispersion. Cette contribution demeure toutefois généralement faible tant que l'interception n'est pas très basse.

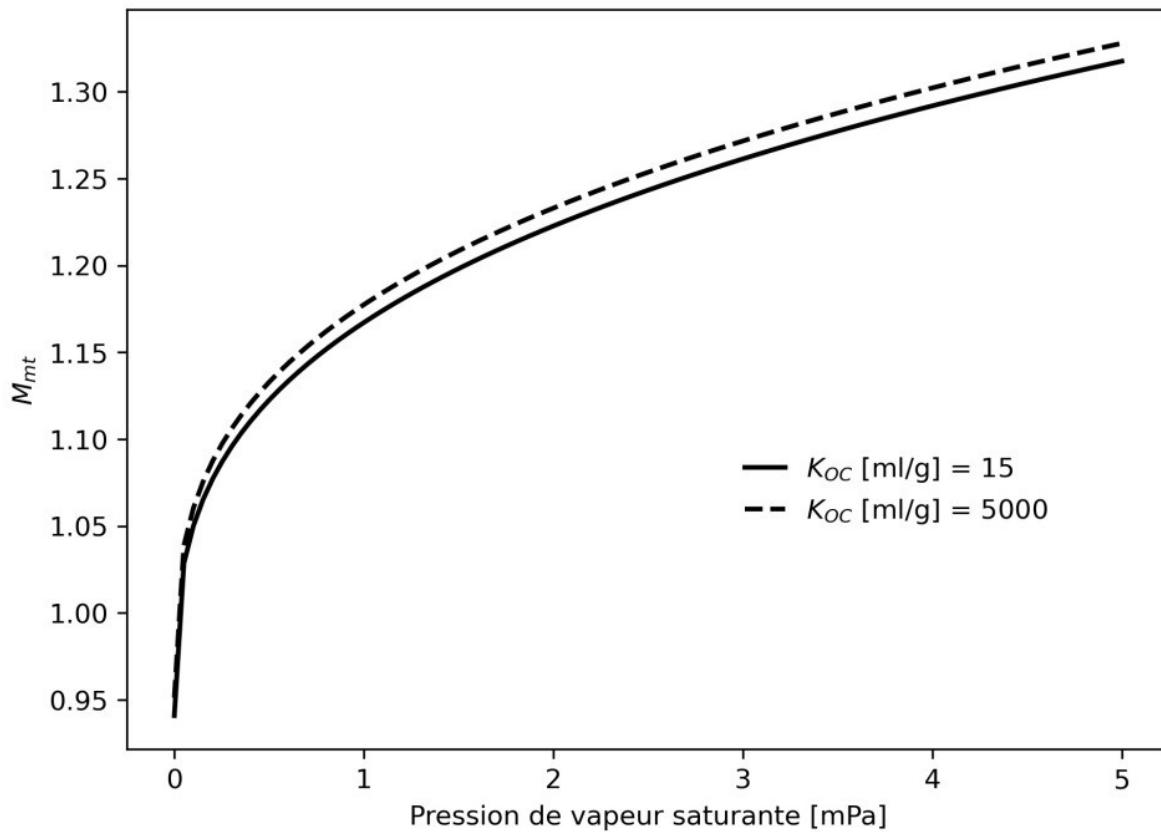


Figure 19 : Analyse de sensibilité - Sensibilité du facteur M en milieu terrestre en fonction de la pression de vapeur (P_{vsat}), pour des substances actives appliquées en grandes cultures pour différentes valeurs de K_{OC} et pour une interception par le couvert de culture de 55%, dans le contexte pédo climatique de la Wallonie.

5.4.5 Persistance

Le facteur P indique la durée moyenne de présence d'une s.a. dans un compartiment environnemental après son transfert. Selon le compartiment, les mécanismes de dissipation et les conditions auxquelles la substance est exposée varient.

5.4.5.1 Persistance dans les eaux souterraines

La persistance des s.a. dans les eaux souterraines est présentée en section 4.7.3. Le facteur P est défini comme l'inverse de la constante d'hydrolyse à la température moyenne caractéristique des nappes phréatiques. Les résultats de persistance des s.a. sélectionnées sont illustrés à la Figure 20.

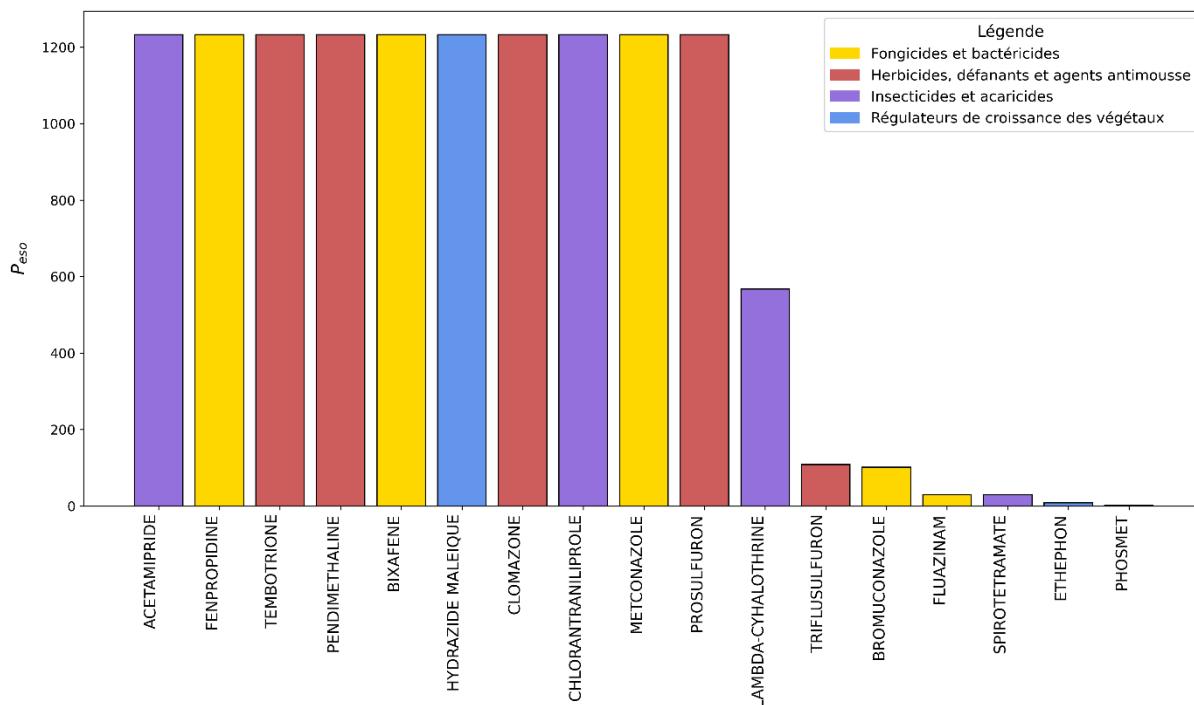


Figure 20 : Facteur de persistance dans les eaux souterraines calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en grandes cultures dans le contexte de la Wallonie

Le graphique présenté à la Figure 20 indique que les dix premières s.a. présentent toutes le même facteur de persistance, correspondant à la valeur maximale calculée. Cela s'explique par le fait qu'elles sont considérées comme « stables » dans la base de données de la PPDB. En effet, dans cette base de données, une s.a. est classée comme « stable » vis-à-vis de l'hydrolyse lorsque sa demi-vie dépasse 365 jours à 20 °C. Pour garantir une approche homogène entre les substances, la DT₅₀ en hydrolyse a donc été plafonnée à 365 jours à 20 °C dans le modèle. Après ajustement à la température moyenne des eaux souterraines (11 °C), le facteur de persistance maximale obtenue atteint environ trois ans.

À l'inverse, certaines substances se révèlent beaucoup moins persistantes dans les eaux souterraines. C'est notamment le cas du phosmet, caractérisé par une forte réactivité en milieu aqueux. Toutefois, il convient de souligner que les métabolites peuvent présenter une persistance nettement plus élevée que leur molécule mère. Par exemple, l'acide 3-phénoxybenzoïque, métabolite de la lambda-cyhalothrine, est reconnu comme une molécule « *stable* » en milieu aqueux, et donc susceptible de persister dans les nappes beaucoup plus longtemps que la lambda-cyhalothrine.

5.4.5.2 Persistance dans les eaux de surface

L'évaluation de la persistance des s.a. dans les eaux de surface est présentée en section 4.7.4. Le modèle prend en compte les processus de dégradation par hydrolyse et par photolyse en milieu aqueux. Toutefois, la persistance effective des molécules est également limitée par le temps de résidence de l'eau, qui dépend du régime d'écoulement fluvial.

En effet, afin d'éviter une surestimation de la persistance pour les substances très stables en conditions abiotiques et en régime stationnaire, le modèle considère qu'en moyenne une molécule ne peut demeurer dans un cours d'eau au-delà d'une saison, même en l'absence de dégradation abiotique. Au-delà de cette durée, elle sera soit biodégradée, soit entraînée vers les milieux marins, où les conditions environnementales diffèrent sensiblement. Cette contrainte est intégrée au modèle sous forme d'une constante de dissipation, qui fixe la persistance maximale en eaux de surface à la durée d'une saison.

L'évaluation de la persistance a été réalisée pour l'ensemble des s.a. sélectionnées, et les résultats sont illustrés à la Figure 21.

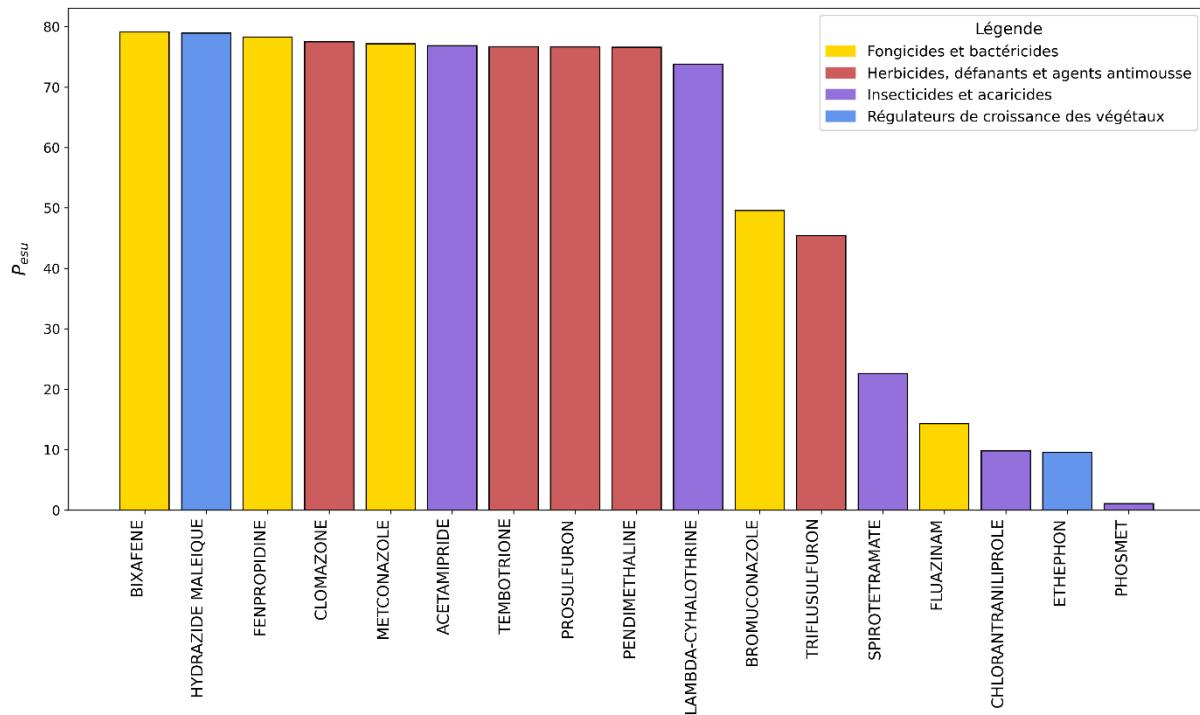


Figure 21 : Facteur de persistance dans les eaux de surface calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en grandes cultures.

Contrairement aux eaux souterraines, la persistance dans les eaux de surface est influencée par la saison d'application, en raison des variations saisonnières de la température de l'eau et de l'intensité du rayonnement solaire. La comparaison des graphiques (Figure 20 et Figure 21) montre que certaines substances considérées comme très persistantes dans les nappes phréatiques apparaissent nettement moins persistantes en eaux de surface. Ce contraste s'explique d'une part par l'effet saisonnier, et d'autre part par la sensibilité de certaines molécules à la photolyse. C'est le cas, par exemple, du chlorantraniliprole, considéré comme stable dans les eaux souterraines, mais beaucoup moins persistant dans les eaux de surface en raison de sa forte sensibilité à la photolyse.

La Figure 22 illustre la sensibilité du facteur de persistance dans les eaux de surface en fonction de la demi-vie par hydrolyse, pour différentes valeurs de demi-vie par photolyse en milieu aqueux.

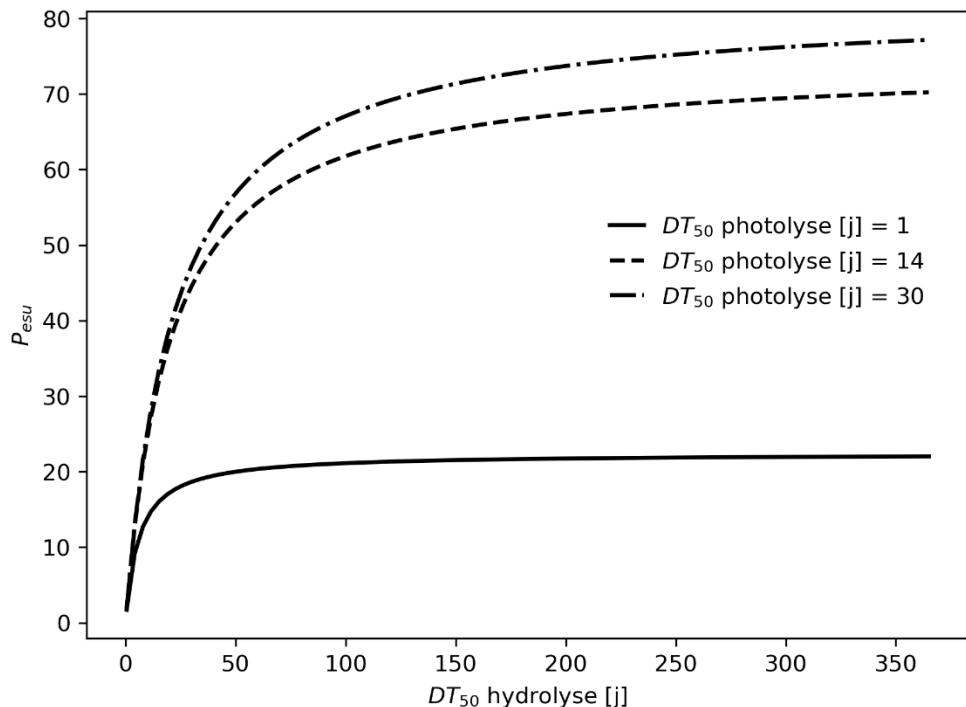


Figure 22 : Analyse de sensibilité - Sensibilité du facteur de persistance dans les eaux de surface pour des substances utilisées en grandes cultures en fonction de la demi-vie par hydrolyse, pour différentes valeurs de demi-vie par photolyse dans le contexte pédo climatique de la Wallonie et les conditions météorologiques de 2022.

On observe sur ce graphique que la photolyse influence fortement la persistance dans les eaux de surface, en particulier aux très faibles valeurs de ce paramètre. Ainsi, lorsque la demi-vie par photolyse est faible (substance se dégradant rapidement sous l'effet de la lumière), la persistance dans les eaux de surface est fortement réduite, même si la dégradation par hydrolyse est lente. À l'inverse, lorsque la photolyse est peu efficace (demi-vie élevée), la persistance dépend davantage de l'hydrolyse : plus celle-ci est lente, plus la substance reste longtemps dans l'eau. Il faut toutefois noter que la photolyse étant directement influencée par l'irradiance solaire, son effet est nettement réduit en cas d'application automnale (irradiance et durée du jour plus faible) par rapport à une application printanière.

5.4.5.3 Persistance en milieu terrestre

La persistance des s.a. dans le milieu terrestre (hors sols cultivés) est présentée à la section 4.7.5. Dans ce milieu, le modèle considère deux processus de dissipation principaux : d'une part la volatilisation depuis le couvert végétal pour la fraction de substance interceptée par la culture (cas de figure où un organisme du milieu terrestre se déplace sur la zone de culture) et/ou depuis le couvert végétal du milieu terrestre hors zone cultivée, et d'autre part la dégradation biochimique dans le sol pour la fraction transportée par érosion qui n'atteint pas les eaux de surface. L'évaluation de la persistance, présentée en section 4.7.5, a été réalisée pour l'ensemble des s.a. sélectionnées (Figure 23).

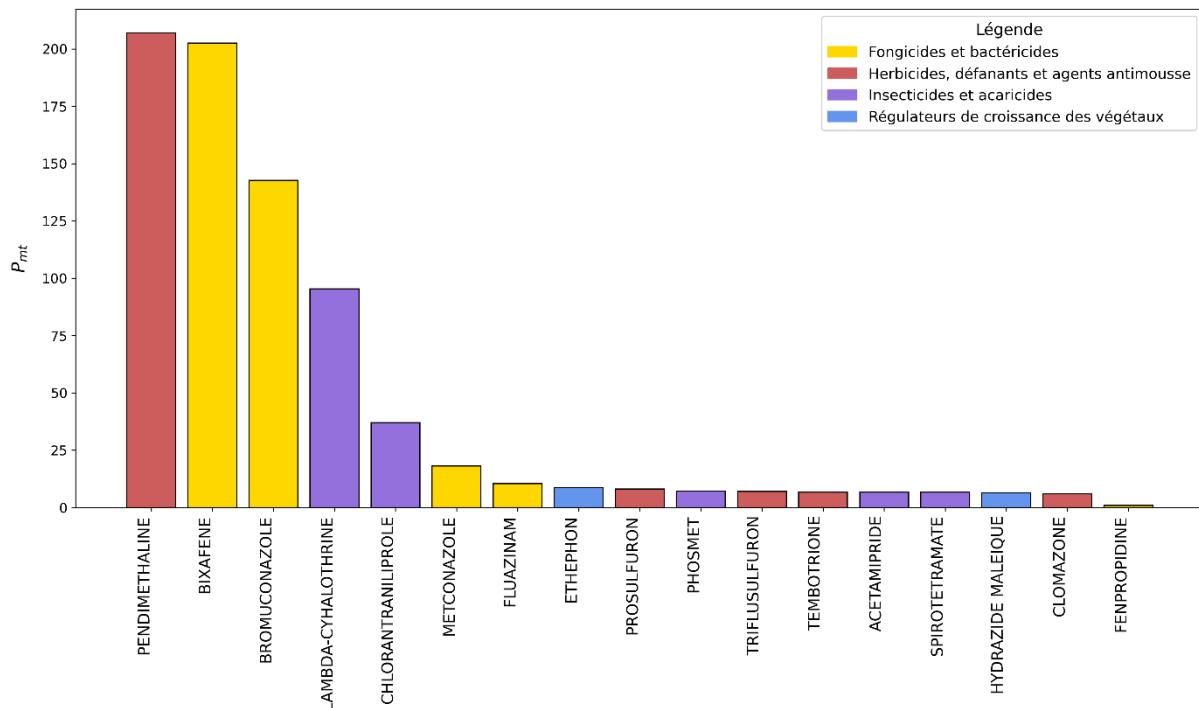


Figure 23 : Facteur de persistance en milieu terrestre calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en grandes cultures dans les conditions de 2022

Deux processus déterminent la persistance des s.a. dans le milieu terrestre (hors des sols cultivés) :

1. la dissipation depuis le couvert végétal, qui dépend de la pression de vapeur saturante pour les substances volatiles ($P_{v,sat} > 3 \text{ mPa}$) ;
2. la dégradation biochimique dans le sol, caractérisé par la DT₅₀.

L’importance relative de ces deux processus est régie par le paramètre a^{13} de l’équation (37). Plus la valeur de ce paramètre est élevée, plus la persistance est liée à la dégradation dans le sol et donc à la DT₅₀ du sol ; à l’inverse, plus la valeur du paramètre a est faible, plus la persistance est liée à la dissipation depuis le couvert végétal. Ainsi, lorsque le transport par érosion est nul ($a = 0$), seule la dissipation au niveau du couvert végétal influence la persistance ; à l’inverse, en l’absence d’interception par le couvert de la culture ($a = 1$), seule la dégradation biochimique dans le sol influence la persistance.

La Figure 24 montre la sensibilité de la persistance en milieu terrestre (hors sols cultivés) à la pression de vapeur saturante ($P_{v,sat}$), pour différentes valeurs de K_{oc} et une interception du couvert de culture fixée à 55 %.

Au plus le K_{oc} augmente, au plus la substance est susceptible d’être exportée par érosion (la valeur du paramètre a augmente). Dans ce cas, la persistance globale en milieu terrestre est

¹³ Pour rappel, ce paramètre représente la fraction de la substance transportée jusqu’aux sols hors de la zone traitée par érosion par rapport à la fraction totale à laquelle les organismes du milieu terrestre sont potentiellement susceptibles d’être exposés (fraction interceptée par le couvert végétal et fraction transportée vers les sols hors de la zone traitée)

davantage conditionnée par la DT₅₀ du sol, fixée à 100 jours dans cette analyse de sensibilité, raison pour laquelle, la persistance augmente avec le K_{oc}.

Conformément à l'équation (39), la persistance médiane des substances sur le couvert végétal est fixée par défaut à 6,7 jours lorsque leur volatilisation est faible à modérée. En revanche, si la substance est considérée comme volatile ($P_{v,sat} > 3 \text{ mPa}$), le taux de dissipation est alors régulé par la fraction volatilisée depuis le couvert. Raison pour laquelle, dans la Figure 24, le facteur de persistance chute dès que la $P_{v,sat}$ dépasse ce seuil (voir section 4.7.5).

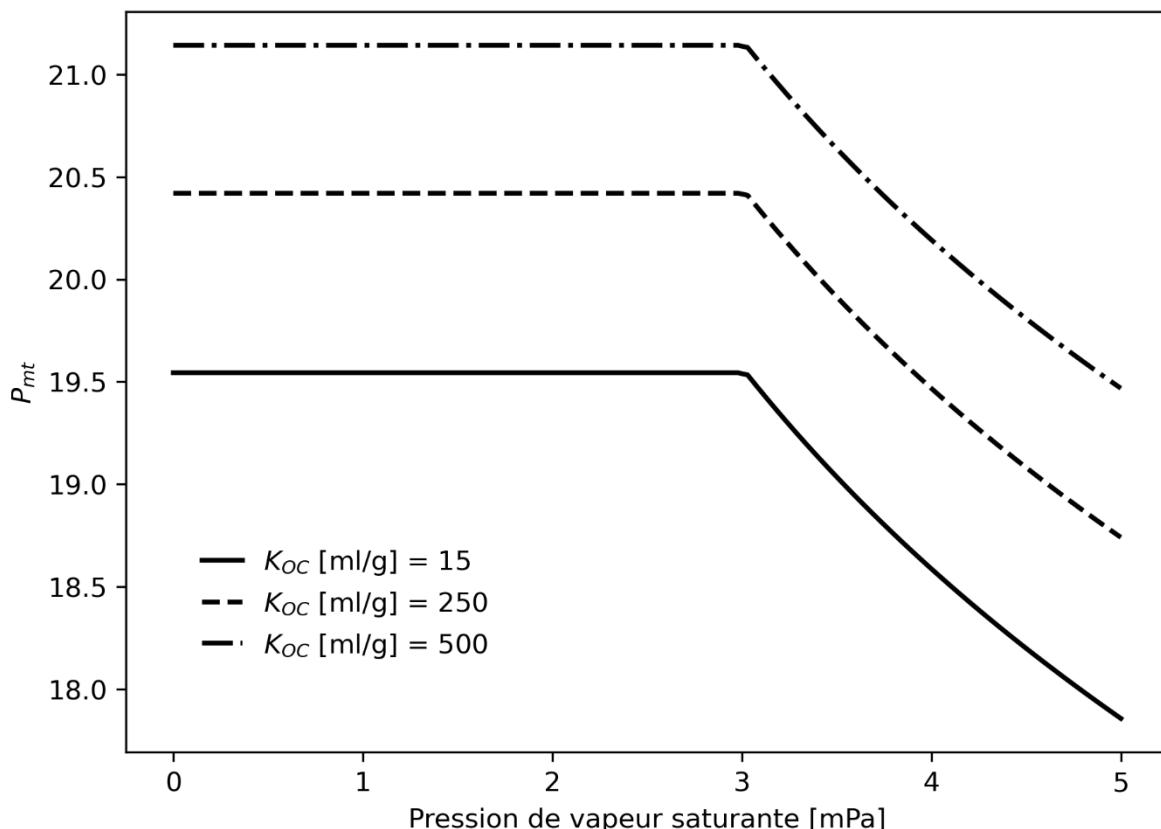


Figure 24 : Analyse de sensibilité - Sensibilité du facteur de persistance en milieu terrestre (hors sols cultivés) en fonction de la pression de vapeur saturante ($P_{v,sat}$) pour différents K_{oc} , pour une interception de 55 % du couvert de la culture.

5.4.5.4 Persistance dans les sols cultivés

La détermination de la persistance des s.a. dans les sols cultivés est présentée à la section 4.7.6. Le modèle prend en compte deux voies de dissipation pour ce compartiment : la dégradation biochimique et la volatilisation. Ces processus dépendent de la température, de l'humidité du sol et de la profondeur de migration de la molécule. Le modèle considère également l'atténuation de l'exposition de l'horizon biologiquement actif induite par la migration des s.a. dans le sol sous l'effet de l'infiltration. L'évaluation de la persistance a été réalisée pour l'ensemble des s.a. sélectionnées, et les résultats sont illustrés à la Figure 25.

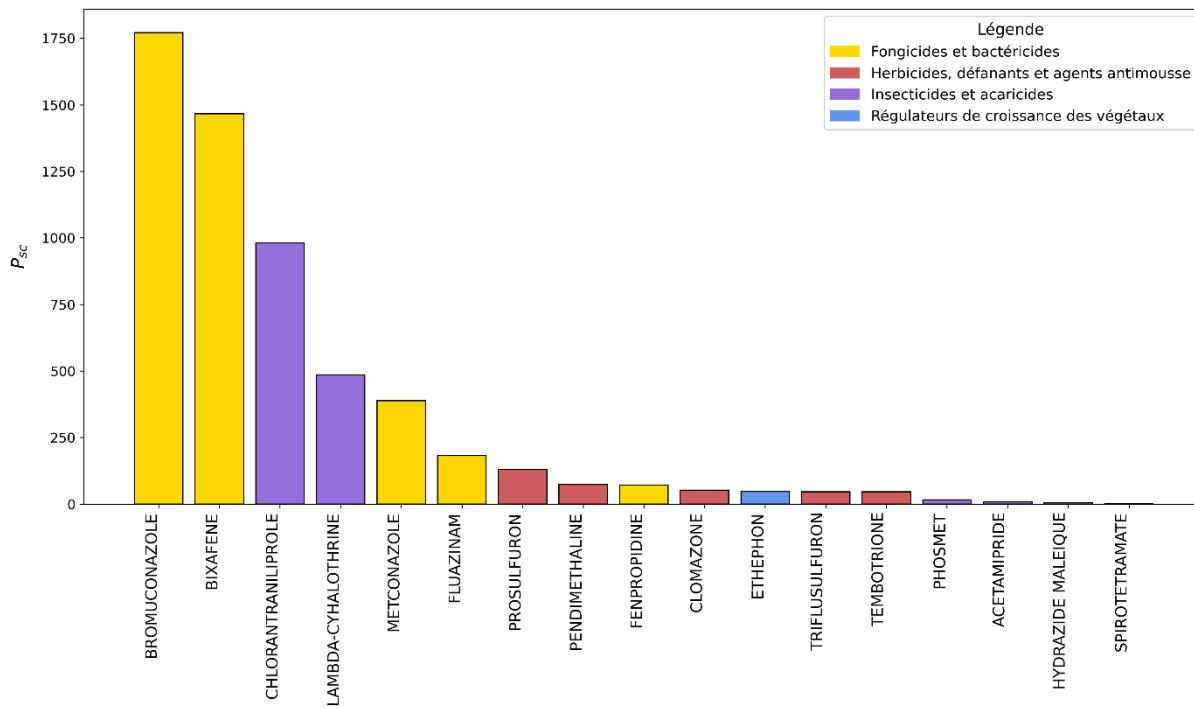


Figure 25 : Facteur de persistance dans les sols cultivés de grandes cultures, calculé pour les substances actives sélectionnées appliquées en grandes cultures et pour l'année 2022.

Le principal déterminant de la persistance dans les sols cultivés est la demi-vie de dégradation biochimique dans le sol (DT_{50}). Le bromuconazole, le bixafène et le chlorantraniliprole se classent ainsi parmi les substances les plus persistantes de l'échantillon (Figure 25) du fait de leurs demi-vies très élevées. L'effet de ce paramètre est mis en évidence sur les graphiques présentés à la Figure 26, où on constate l'augmentation de la persistance avec la DT_{50} sol. D'autres propriétés physico-chimiques impactent également la persistance des s.a., notamment la constante de Henry (K_H) qui conditionne la volatilité depuis le sol. Le graphique de gauche de la Figure 26 montre la sensibilité de la persistance en fonction de la constante de Henry : les substances présentant une forte volatilité (K_H élevé) se dissipent rapidement, ce qui réduit leur temps de résidence dans le sol.

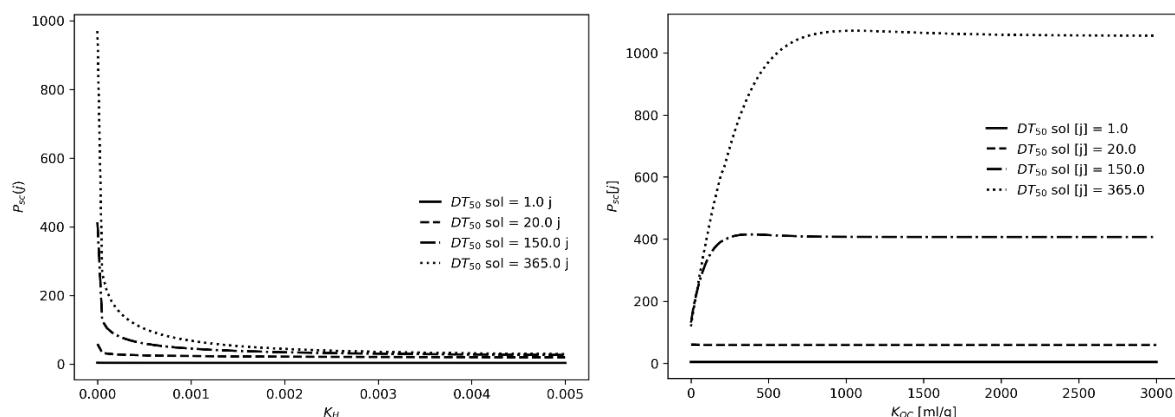


Figure 26 : Analyse de sensibilité - Facteur de persistance des substances dans les sols cultivés de grandes cultures, en fonction de la constante de Henry (à gauche) et du K_{oc} (à droite), pour différentes valeurs de demi-vie dans le sol, dans le contexte pédo climatique de la Wallonie.

Le K_{oc} impacte également la persistance dans les sols cultivés (Figure 26 – droite). L'effet du K_{oc} sur la persistance résulte de deux processus concomitants :

- D'une part, le K_{oc} affecte la dynamique de lixiviation. Lorsque le K_{OC} est élevé, la substance reste davantage fixée à la matière organique présente dans les couches superficielles du sol, ce qui limite sa migration en profondeur. Par conséquent, les organismes du sol situés dans les couches superficielles sont plus exposés à cette substance. Ainsi, une augmentation du K_{oc} conduit généralement à une hausse du facteur de persistance.
- D'autre part, un K_{oc} élevé peut entraîner une diminution de la persistance des composés volatils. En effet, lorsque les substances demeurent en surface du sol, leur temps de diffusion dans la phase gazeuse du sol diminue, ce qui favorise leur volatilisation. Ce phénomène peut entraîner un maximum local de persistance, dont le point de retournement dépend de la compétition entre les deux processus. Cet effet n'est toutefois pas visible sur le graphique, car la valeur de K_H utilisée correspond à une substance faiblement volatile.

Une limite de ce modèle est qu'il ne prend pas en compte le remaniement du sol (p. ex. le labour). Le travail du sol a pour conséquence de redistribuer les s.a. dans l'épaisseur de sol labouré : un composé en surface peut être enfoui et des s.a. en profondeur peuvent remonter à la surface. Par ailleurs, le remaniement modifie fortement les conditions pédologiques locales le long du profil travaillé (structure et porosité, densité apparente, aération, humidité, température et activité microbiologique). Ces changements impactent inévitablement les processus de dissipation et peuvent donc modifier la persistance.

5.4.6 Indice de risque global (IRG) et indice d'exposition globale (IEG)

L'*indice de risque global* (IRG) a été calculé pour chaque s.a. sélectionnée et pour les compartiments des eaux de surface, souterraines et du milieu terrestre. Comme aucun écosystème n'est directement associé aux eaux souterraines, c'est l'*indice d'exposition global* (IEG) qui est présenté pour ce compartiment. La méthodologie utilisée pour le calcul de ces indices est détaillée à la section 4.8.

Afin d'identifier les facteurs ayant le plus d'influence sur le risque (T, B, Q, M P) — et ainsi mieux comprendre les caractéristiques du risque associé à chaque s.a. — le Tableau 14 (pour les eaux de surface), le Tableau 15 (pour les sols cultivés), le Tableau 16 (pour le milieu terrestre) et le Tableau 17 (pour les eaux souterraines) présentent la valeur de ces facteurs pour chaque substance étudiée. Il convient de souligner que l'IRG d'une s.a. n'est pas obtenu par un simple produit de ces facteurs. En effet, les facteurs M et P varient selon les cultures sur lesquelles la s.a. a été appliquée. Pour obtenir un facteur moyen représentatif par substance et par compartiment, une moyenne pondérée a été calculée en fonction des quantités utilisées pour chaque culture (voir les sections 5.4.4 et 5.4.5). Cependant, pour le calcul final de l'IRG et de l'IEG de chaque s.a., un indice est d'abord déterminé séparément pour chaque culture, puis les différents indices sont additionnés pour obtenir l'IRG et l'IEG de la s.a.. Par conséquent, l'IRG et l'IEG de la s.a. ne peuvent pas être strictement égaux au produit des facteurs moyens représentatifs.

Tableau 14 : IRG pour les eaux de surface calculés pour les substances actives sélectionnées dans le contexte de l'année 2022 en grandes cultures en Wallonie

Substance active	T	B	Q	M	P	IRG
Lambda-Cyhalothrine	$9,93 \times 10^5$	7,2	482	0,0027	73,8	$6,87 \times 10^8$
Pendimethaline	722,5	7,1	$1,12 \times 10^4$	0,0017	76,6	$7,60 \times 10^6$
Fluazinam	689,0	6,3	$7,10 \times 10^3$	0,0012	14,3	$5,56 \times 10^5$
Bixafene	397,2	3,8	$4,05 \times 10^3$	0,0027	79,1	$1,32 \times 10^6$
Fenpropidine	447,2	3,3	$9,01 \times 10^3$	0,0004	78,3	$4,33 \times 10^5$
Tembotrione	443,5	1,3	$1,32 \times 10^3$	0,0035	76,7	$1,98 \times 10^5$
Prosulfuron	674,8	1,9	105	0,0048	76,7	$4,99 \times 10^4$
Phosmet	$7,60 \times 10^3$	3,2	831	0,0002	1,0	$3,90 \times 10^3$
Chlorantraniliprole	$1,12 \times 10^3$	3,2	316	0,0071	9,8	$8,83 \times 10^4$
Clomazone	33,7	2,9	$3,15 \times 10^3$	0,0040	77,5	$9,65 \times 10^4$
Metconazole	24,6	4,6	$4,07 \times 10^3$	0,0032	77,2	$1,13 \times 10^5$
Bromoconazole	42,9	3,7	$1,91 \times 10^3$	0,0035	49,6	$5,53 \times 10^4$
Acetamipridine	8,7	1,5	194	0,0005	76,9	$1,03 \times 10^2$
Ethepron	2,8	1,3	$6,81 \times 10^3$	0,0006	9,6	$1,64 \times 10^2$
Hydrazide Maleique	0,3	1,3	$2,53 \times 10^4$	0,0008	78,9	$6,01 \times 10^2$
Spirotetramate	19,0	2,9	$7,45 \times 10^3$	<0,0001	22,6	$1,78 \times 10^0$
Triflusulfuron	42,3	1,6	614	0,0037	45,4	$6,79 \times 10^3$

Tableau 15 : IRG pour les sols cultivés calculés pour les substances actives sélectionnées dans le contexte de l'année 2022 en grandes cultures en Wallonie

Substance active	T	B	Q	M	P	IRG
Bromoconazole	2,0	2,3	$1,91 \times 10^3$	0,40	1 772	$6,22 \times 10^6$
Bixafene	1,0	2,4	$4,05 \times 10^3$	0,40	1 467	$5,61 \times 10^6$
Fluazinam	2,0	4,1	$7,10 \times 10^3$	0,28	182	$2,89 \times 10^6$
Metconazole	2,0	2,9	$4,07 \times 10^3$	0,32	388	$2,97 \times 10^6$
Pendimethaline	1,0	4,6	$1,12 \times 10^4$	0,69	73	$2,64 \times 10^6$
Clomazone	12,8	1,7	$3,15 \times 10^3$	0,60	52	$2,12 \times 10^6$
Ethepron	6,0	1,0	$6,81 \times 10^3$	0,52	47	$1,09 \times 10^6$
Lambda-Cyhalothrine	2,0	4,7	482	0,36	485	$8,10 \times 10^5$
Fenpropidine	2,0	1,9	$9,01 \times 10^3$	0,24	71	$5,98 \times 10^5$
Chlorantraniliprole	1,0	1,9	316	0,46	981	$2,71 \times 10^5$
Phosmet	19,2	1,8	831	0,61	16	$2,97 \times 10^5$
Acetamipridine	111,1	1,0	194	0,50	7	$8,43 \times 10^4$
Hydrazide Maleique	1,0	1,0	$2,53 \times 10^4$	0,70	4	$8,09 \times 10^4$
Tembotrione	1,0	1,0	$1,32 \times 10^3$	0,45	46	$2,72 \times 10^4$
Triflusulfuron	1,0	1,0	614	0,47	46	$1,37 \times 10^4$
Prosulfuron	1,0	1,1	105	0,45	129	$6,69 \times 10^3$
Spirotetramate	1,0	1,6	$7,45 \times 10^3$	0,46	1	$3,83 \times 10^3$

Tableau 16 : IRG pour le milieu terrestre calculés pour les substances actives sélectionnées dans le contexte de l'année 2022 en grandes cultures en Wallonie

Substance active	T	B	Q	M	P	IRG
Pendimethaline	1,1	1,9	$1,12 \times 10^4$	1,27	207	$4,23 \times 10^6$
Lambda-Cyhalothrine	82,1	3,1	482	1,13	95,3	$2,87 \times 10^6$
Bixafene	1,0	2,6	$4,05 \times 10^3$	1,04	202,5	$6,47 \times 10^5$
Bromuconazole	2,7	2,6	$1,91 \times 10^3$	1,07	143	$6,31 \times 10^5$
Fluazinam	1,3	2,6	$7,10 \times 10^3$	1,43	10,4	$3,10 \times 10^5$
Phosmet	52,9	2,0	831	0,74	7,1	$4,32 \times 10^5$
Metconazole	2,6	3,0	$4,07 \times 10^3$	1,18	18	$3,67 \times 10^5$
Chlorantraniliprole	2,6	2,3	316	0,94	37	$3,63 \times 10^4$
Clomazone	4,1	1,5	$3,15 \times 10^3$	1,17	6,0	$3,17 \times 10^4$
Ethephon	3,1	1,0	$6,81 \times 10^3$	0,90	8,7	$1,32 \times 10^5$
Fenpropidine	3,0	1,0	$9,01 \times 10^3$	2,14	0,8	$4,03 \times 10^4$
Hydrazide Maleique	1,0	1,0	$2,53 \times 10^4$	0,55	6,4	$9,21 \times 10^4$
Acetamipride	42,9	1,1	194	0,88	6,7	$5,28 \times 10^4$
Spirotetramate	1,0	2,0	$7,45 \times 10^3$	0,93	6,7	$9,34 \times 10^4$
Tembotriione	1,0	1,0	$1,32 \times 10^3$	0,95	6,7	$8,22 \times 10^3$
Triflusulfuron	1,0	1,1	614	0,96	7,0	$4,19 \times 10^3$
Prosulfuron	2,1	1,3	105	1,02	8	$1,90 \times 10^3$

Tableau 17 : IEG pour les eaux souterraines calculés pour les substances actives sélectionnées dans le contexte de l'année 2022 en grandes cultures en Wallonie

Substance active	Q	M	P	IEG
Chlorantraniliprole	316	$3,88 \times 10^{-2}$	1 233	$1,51 \times 10^4$
Prosulfuron	105	$3,58 \times 10^{-2}$	1 233	$4,61 \times 10^3$
Phosmet	831	$0,00 \times 10^0$	1	$3,90 \times 10^3$
Bromuconazole	$1,91 \times 10^3$	$1,60 \times 10^{-3}$	101	$3,09 \times 10^2$
Metconazole	$4,07 \times 10^3$	$2,11 \times 10^{-7}$	1 233	$1,06 \times 10^0$
Spirotetramate	$7,45 \times 10^3$	$0,00 \times 10^0$	29	$1,78 \times 10^0$
Bixafene	$4,05 \times 10^3$	$1,15 \times 10^{-7}$	1 233	$5,75 \times 10^{-1}$
Tembotriione	$1,32 \times 10^3$	$4,72 \times 10^{-8}$	1 233	$7,65 \times 10^{-2}$
Triflusulfuron	614	$1,94 \times 10^{-7}$	108	$1,29 \times 10^{-2}$
Clomazone	$3,15 \times 10^3$	$1,10 \times 10^{-10}$	1 233	$4,27 \times 10^{-4}$
Hydrazide Maleique	$2,53 \times 10^4$	$6,25 \times 10^{-45}$	1 233	$1,95 \times 10^{-37}$
Acetamipride	194	$4,98 \times 10^{-80}$	1 233	$1,19 \times 10^{-74}$
Ethephon	$6,81 \times 10^3$	$6,79 \times 10^{-109}$	8	$3,91 \times 10^{-104}$
Fenpropidine	$9,01 \times 10^3$	0	1 233	0
Lambda-Cyhalothrine	482	0	567	0
Phosmet	831	0	1	0
Spirotetramate	$7,45 \times 10^3$	0	29	0

D'après les tableaux précédents, parmi les s.a. étudiées, la lambda-cyhalothrine apparaît comme la substance présentant le risque le plus élevé pour les eaux de surface, la pendiméthaline pour le milieu terrestre tandis que le bromuconazole constitue la substance la plus à risque pour les sols cultivés. Le chlorantraniliprole présente l'IEG le plus élevé parmi les substances sélectionnées dans les eaux souterraines.

Le risque associé à la lambda-cyhalothrine découle de la dangerosité de cette molécule, qui combine une toxicité extrêmement élevée à un fort potentiel de bioaccumulation chez les organismes aquatiques et terrestres. Pour la pendiméthaline, le risque ne provient pas de sa toxicité qui est plutôt faible, mais d'un usage important et d'une forte persistance, entraînant une exposition élevée des organismes terrestres à cette substance. Dans le cas du bromuconazole, sa persistance marquée dans les sols, associée à une toxicité modérée, conduit à un risque accru en raison de la durée prolongée d'exposition des

organismes du sol. Enfin, les propriétés physico-chimiques du chlorantraniliprole favorisent sa migration en profondeur et sa stabilité dans les eaux souterraines, ce qui explique son IEG élevé.

6 Conclusion et perspectives

La caractérisation du risque lié à l'utilisation des PPP constitue une étape essentielle pour le suivi et l'évaluation des politiques publiques visant à réduire ce risque à l'échelle d'un territoire. Ce rapport présente l'élaboration du Phytorisque, un modèle d'estimation du risque environnemental associé à l'usage de PPP en grandes cultures en Wallonie. Le principe de calcul repose sur la définition classique du risque, à savoir le produit du danger et de l'exposition.

À partir des estimations de quantités de s.a. utilisées en grandes cultures, des propriétés physico-chimiques des s.a., des caractéristiques pédoclimatiques de la Wallonie et de la saison d'application, le Phytorisque permet de générer un panel d'indices décrivant le risque environnemental lié à l'utilisation des s.a. en grandes cultures en Wallonie. Ces indices sont calculés pour quatre compartiments environnementaux : les eaux souterraines, les eaux de surface, le milieu terrestre et les sols cultivés.

Pour illustrer le fonctionnement du modèle, 17 substances actives, choisies de manière à représenter la diversité des propriétés physico-chimiques de l'ensemble des s.a. utilisées en Wallonie, ont été analysées, en tenant compte des conditions météorologiques de 2022. Les facteurs de toxicité, de bioaccumulation, d'usage, de mobilité et de persistance ainsi que les indices de risques globaux ont été calculés pour chaque substance, et ce pour chacun des quatre compartiments de l'environnement. En parallèle, une analyse de sensibilité de ces différents facteurs aux paramètres physico-chimiques intégrés dans le modèle a également été menée. Ces analyses ont permis de corroborer les résultats produits par le Phytorisque avec les observations décrites dans la littérature scientifique.

Le modèle du Phytorisque présente certaines limites. D'une part, la formulation des produits et les techniques d'application, qui influencent potentiellement le devenir des substances actives dans l'environnement, ne sont pas encore intégrées au modèle. D'autre part, les métabolites issus de la dégradation des substances actives ne sont pas pris en compte dans la version actuelle du Phytorisque.

Ces aspects feront l'objet de développements futurs du modèle.

L'application du modèle actuel à l'ensemble des substances actives sur une série temporelle élargie permettra d'évaluer l'évolution du risque environnemental et, par conséquent, d'apprécier l'efficacité des mesures mises en œuvre pour le réduire.

7 Bibliographie

- [1] H. van der Werf, « Evaluer l'impact des pesticides sur l'environnement », *Courrier de l'environnement de l'INRA*, n° 31, août 1997, [En ligne]. Disponible sur: https://www.researchgate.net/publication/282308602_Evaluer_l'impact_des_pesticides_sur_l'environnement
- [2] *Directive 91/414/CEE du Conseil, du 15 juillet 1991, concernant la mise sur le marché des produits phytopharmaceutiques.* 1991. Consulté le: 13 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: <http://data.europa.eu/eli/dir/1991/414/oj/fra>
- [3] N. Brunet, L. Guichard, B. Omon, N. Pingault, E. Pley-Ber, et A. Seiler, « L'indicateur de fréquence de traitement (ITF): un indicateur pour une utilisation durable des pesticides », *Le Courrier de l'environnement de l'Inra*, vol. 56, déc. 2008.
- [4] S. Vergucht *et al.*, « Belgian pesticide risk and use indicators methodology (PRIBEL) », Federal Public Service Health, Food Chain Safety and Environment; Ghent University; VAR Tervuren, Ghent (Belgium), 2006.
- [5] « Directive - 2019/782 - EN - EUR-Lex ». Consulté le: 13 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2019/782/oj/eng>
- [6] J.-N. Aubertot *et al.*, « Vers un indicateur harmonisé pour quantifier l'utilisation des produits phytopharmaceutiques et les risques associés », INRAE, report, 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://hal.inrae.fr/hal-04956205>
- [7] E. Mandart, P. Le Grusse, H. Ayadi, et J. Fabre, « Des indicateurs de risque de toxicité des pesticides sur la santé humaine et l'environnement comme outils d'aide à la décision pour la gestion des phytosanitaires », présenté à Diagnostics et Impacts sur notre Santé et notre Environnement, Montpellier (France), 2013.
- [8] M. Whiteside, P. Mineau, C. Morrison, et L. Knopper, « Comparison of a Score-Based Approach with Risk-Based Ranking of In-Use Agricultural Pesticides in Canada to Aquatic Receptors », *Integrated environmental assessment and management*, vol. 4, p. 215-36, mai 2008, doi: 10.1897/IEAM_2007-056.
- [9] OECD, « Pesticide risk indicators: Aquatic risk indicators and landscape indicators », Environment Directorate, OECD, Series on Pesticides and Biocides No. 93, 2000.
- [10] P. Kudsk, L. N. Jørgensen, et J. E. Ørum, « Pesticide Load—A new Danish pesticide risk indicator with multiple applications », *Land Use Policy*, vol. 70, p. 384-393, janv. 2018, doi: 10.1016/j.landusepol.2017.11.010.
- [11] V. Gutsche et D. Rossberg, « SYNOPS 1.1: a model to assess and to compare the environmental risk potential of active ingredients in plant protection products », *Agriculture, Ecosystems & Environment*, vol. 64, n° 2, p. 181-188, juill. 1997, doi: 10.1016/S0167-8809(97)00037-6.
- [12] F. Vercruyssen et W. Steurbaut, « POCER, the pesticide occupational and environmental risk indicator », *Crop Protection*, vol. 21, n° 4, p. 307-315, mai 2002, doi: 10.1016/S0261-2194(01)00102-8.
- [13] A. Kniss et C. Coburn, « Quantitative Evaluation of the Environmental Impact Quotient (EIQ) for Comparing Herbicides », *PloS one*, vol. 10, p. e0131200, juin 2015, doi: 10.1371/journal.pone.0131200.
- [14] O. Samuel, S. Dion, L. St-Laurent, et M. H. April, « Indicateur de risque des pesticides du Québec – IRPeQ – Santé et environnement », Ministère de l'Agriculture, des Pêcheries et de l'Alimentation ; Ministère du Développement durable, de l'Environnement et des Parcs ; Institut national de santé publique du Québec, Québec, Canada, 2007. [En ligne]. Disponible sur: https://www.inspq.qc.ca/sites/default/files/publications/1504_indicrisquespesticides_2edition.pdf
- [15] J. Boesten *et al.*, « Guidance Document on Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration: Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics, EC Document Reference Sanco/10058/2005 version 2.0 », Report, 2006.
- [16] Corder ASBL, Service public de Wallonie, L. Monseur, J. B. de Maere, A. Houdmont, et L. Janssenss, « Estimation quantitative des utilisations de produits phytopharmaceutiques par les utilisateurs et utilisatrices professionnels en Wallonie. », Service public de Wallonie – Agriculture,

- Ressources naturelles et Environnement, Louvain-la-Neuve, Belgique, I, 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://etat.environnement.wallonie.be/home/tudes.html>
- [17] D. J. Rosillon *et al.*, « Near real-time spatial interpolation of hourly air temperature and humidity for agricultural decision support systems », *Computers and Electronics in Agriculture*, vol. 223, p. 109093, août 2024, doi: 10.1016/j.compag.2024.109093.
- [18] K. A. Lewis, J. Tzilivakis, D. Warner, et A. Green, « An international database for pesticide risk assessments and management », *Human and Ecological Risk Assessment: An International Journal*, vol. 22, n° 4, p. 1050-1064, mai 2016, doi: 10.1080/10807039.2015.1133242.
- [19] Service public de Wallonie (SPW), « Carbone organique total des Sols – Série (2022-01-31) », Service public de Wallonie (SPW). [En ligne]. Disponible sur: <http://geodata.wallonie.be/id/47e4ea34-fe00-4712-b795-4a85fdab7dd7>
- [20] Service public de Wallonie (SPW), « Relief de la Wallonie – Modèle Numérique des Pentes 2013-2014 (2022-12-21) », Service public de Wallonie (SPW). [En ligne]. Disponible sur: <http://geodata.wallonie.be/id/1f13febe-5b6f-4bbc-863f-9ea8d786b532>
- [21] Service public de Wallonie (SPW), « Propriétés hydrauliques - Teneurs en eau des sols agricoles wallons - Série (2023-10-09) », Service public de Wallonie (SPW). [En ligne]. Disponible sur: <http://geodata.wallonie.be/id/6ccd2b79-589b-4156-8418-1b022e13c12d>
- [22] Service public de Wallonie (SPW), « Epaisseur de la zone non saturée - profondeur de l'aquifère (2023-11-30) », Service public de Wallonie (SPW). [En ligne]. Disponible sur: <http://geodata.wallonie.be/id/b1755ca8-0a73-46c3-9960-f7769514aea8>
- [23] Service public de Wallonie (SPW), « ERRUISSOL - Risque d'érosion hydrique diffuse », Service public de Wallonie (SPW ARNE – DEMNA. Erosion hydrique des sols.). [En ligne]. Disponible sur: <https://geoportail.wallonie.be/catalogue/9a5480ac-5eba-4109-9640-fba507ef6606.html#Details>
- [24] S. A. L. M. Kooijman, « A safety factor for LC50 values allowing for differences in sensitivity among species », *Water Research*, vol. 21, n° 3, p. 269-276, mars 1987, doi: 10.1016/0043-1354(87)90205-3.
- [25] T. Aldenberg et W. Slob, « Confidence Limits for Hazardous Concentrations Based on Logistically Distributed NOEC Toxicity Data », *Ecotoxicology and Environmental Safety*, vol. 25, n° 1, p. 48-63, févr. 1993, doi: 10.1006/eesa.1993.1006.
- [26] « Regulation - 1272/2008 - EN - clp regulation - EUR-Lex ». Consulté le: 9 juillet 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/oj/eng>
- [27] J. A. Arnot et Fr. A. P. C. Gobas, « A Generic QSAR for Assessing the Bioaccumulation Potential of Organic Chemicals in Aquatic Food Webs », *QSAR and Combinatorial Science*, vol. 22, p. 337-345, 2003, doi: 10.1002/qsar.200390023.
- [28] F. A. P. C. Gobas, B. C. Kelly, et J. A. Arnot, « Quantitative Structure Activity Relationships for Predicting the Bioaccumulation of POPs in Terrestrial Food-Webs », *QSAR Comb. Sci.*, vol. 22, n° 3, p. 329-336, avr. 2003, doi: 10.1002/qsar.200390022.
- [29] J. Pflugmacher, « Struktur-Aktivitätsbeziehungen (QSAR) », *UWSF - Z. Umweltchem. Ökotox.*, vol. 4, n° 2, p. 77-81, avr. 1992, doi: 10.1007/BF02937067.
- [30] ASBL Corder, « Estimation quantitative des utilisations de produits phytopharmaceutiques par les différents secteurs d'activité Rapport annuel – CSC 03.09.00-21-326 », vol. II, 2023, [En ligne]. Disponible sur: <https://www.corder.be/sites/default/files/2024-02/estimation-quantitative-des-utilisations-de-ppp-par-les-differentes-secteurs-d%27activite.pdf>
- [31] R. Kruijne, J. Deneer, J. Lahr, et J. Vlaming, « Hair 2010 Documentation: Calculating risk indicators related to agricultural use of pesticides within the European Union », janv. 2011, [En ligne]. Disponible sur: https://www.researchgate.net/publication/241868417_Hair_2010_Documentation_Calculating_risk_indicators_related_to_agricultural_use_of_pesticides_within_the_European_Union
- [32] J. Boesten *et al.*, « FOCUS groundwater scenarios in the EU review of active substances », Forum for the Coordination of pesticide fate models and their USE, 1, 2000. Consulté le: 1 octobre 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://esdac.jrc.ec.europa.eu/public_path/projects_data/focus/gw/docs/FOCUS_GW_Report_Mai_n.pdf

- [33]U. Meier, *Growth stages of mono- and dicotyledonous plants: BBCH Monograph*, 2nd edition, Enlarged. Braunschweig, Germany: Federal Biological Research Centre for Agriculture and Forestry, 2001.
- [34]D. A. Yon *et al.*, « FOCUS surface water scenario development », In: A. Walker (ed.), *Pesticide behaviour in soils and water; proceedings of a symposium organised by the British Crop Protection Council held at the Hilton Brighton Metropole Hotel, 13-15 November 2001. Farnham (UK), British Crop Protection Council, 2001. Symp. Proc. 78, pp. 397-404*, janv. 2001.
- [35]L. de Baan, « Sensitivity analysis of the aquatic pesticide fate models in SYNOPS and their parametrization for Switzerland », *Science of The Total Environment*, vol. 715, p. 136881, mai 2020, doi: 10.1016/j.scitotenv.2020.136881.
- [36]SPW, « Accueil », Etat de l'environnement wallon. Consulté le: 6 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://etat.environnement.wallonie.be/home.html>
- [37]I. Steffan-Dewenter et T. Tscharntke, « Insect communities and biotic interactions on fragmented calcareous grasslands-a mini review. », *Biological Conservation*, vol. 104, p. 275-284, avr. 2002, doi: 10.1016/S0006-3207(01)00192-6.
- [38]E. F. S. Authority (EFSA), « Opinion on a request from EFSA related to the default Q10 value used to describe the temperature effect on transformation rates of pesticides in soil - Scientific Opinion of the Panel on Plant Protection Products and their Residues (PPR Panel) », *EFSA Journal*, vol. 6, n° 1, p. 622, 2008, doi: 10.2903/j.efsa.2008.622.
- [39]R. G. Zepp et D. M. Cline, « Rates of direct photolysis in aquatic environment », *Environ. Sci. Technol.*, vol. 11, n° 4, p. 359-366, avr. 1977, doi: 10.1021/es60127a013.
- [40]B. Georges *et al.*, « Can water level stations be used for thermal assessment in aquatic ecosystem? », *River Research and Applications*, vol. 36, n° 6, juill. 2020, doi: 10.1002/rra.3520.
- [41]A. Huber, M. Bach, et H. G. Frede, « Modeling pesticide losses with surface runoff in Germany », *Science of The Total Environment*, vol. 223, n° 2-3, p. 177-191, nov. 1998, doi: 10.1016/S0048-9697(98)00314-3.
- [42]A. a. M. F. R. Smit, M. Leistra, et F. van den Berg, « Estimation method for the volatilization of pesticides from plants », 1998, Consulté le: 14 octobre 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://research.wur.nl/en/publications/estimation-method-for-the-volatilization-of-pesticides-from-plant>
- [43]J. P. Wilson, W. P. Inskeep, P. R. Rubright, D. Cooksey, J. S. Jacobsen, et R. D. Snyder, « Coupling Geographic Information Systems and Models for Weed Control and Groundwater Protection », *Weed Technology*, vol. 7, n° 1, p. 255-264, 1993.
- [44]D. Rosillon, E. Pitchugina, J. P. Huart, et V. Planchon, « Aperçu climatologique pour les années culturelles 2018-2020 », Université de Liège – Gembloux Agro-Bio Tech ; CePiCOP ; CRA-W, Gembloux, Belgique, 2021. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.livre-blanc-cereales.be/wp-content/uploads/2020/02/Climato-LB-2020.pdf>
- [45]J. M. Jouany et D. E, « Classement des substances actives phytosanitaires en vue de la surveillance de la qualité des eaux à l'échelle nationale », MINISTÈRE DE L'AGRICULTURE ET DE LA PECHE, France, 1998. [En ligne]. Disponible sur: <https://side.developpement-durable.gouv.fr/Default/doc/SYRACUSE/77934/classement-des-substances-actives-phytosanitaires-en-vue-de-la-surveillance-de-la-qualite-des-eaux-a>
- [46]M. Commelin, J. Baartman, P. Zomer, M. Riksen, et V. Geissen, « Pesticides are Substantially Transported in Particulate Phase, Driven by Land use, Rainfall Event and Pesticide Characteristics—A Runoff and Erosion Study in a Small Agricultural Catchment », *Frontiers in Environmental Science*, vol. 10, p. 830589, juin 2022, doi: 10.3389/fenvs.2022.830589.
- [47]D. Silburn, « Pesticide extraction from soil into runoff under a rainfall simulator », *Soil Research*, vol. 61, p. 468-483, févr. 2023, doi: 10.1071/SR22115.
- [48]D. Delvin *et al.*, « Pesticide Management for Water Quality Protection in the Midwest », Heartland Regional Water Coordination Initiative, États-Unis, consortium universitaire et institutionnel, 2008. Consulté le: 1 octobre 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.ars.usda.gov/research/publications/publication/?seqNo115=224195>
- [49]J. J. Grill, G. Gouy, et N. Carluer, « Processus de transfert superficiel des produits phytosanitaires, de la parcelle au bassin versant », *La Houille Blanche*, vol. 5, p. 75-84, 1999, doi: 10.1051/lhb/1999060.

- [50]D. I. Gustafson, « Groundwater ubiquity score: A simple method for assessing pesticide leachability », *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 8, n° 4, p. 339-357, avr. 1989, doi: 10.1002/etc.5620080411.
- [51]« Closed Form Solution for Pesticide Loss in Runoff Water », Consulté le: 6 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://doi.org/10.13031/2013.34634>
- [52]L. J. Tubbs et D. A. Haith, « Simulation Model for Agricultural Non-Point-Source Pollution », *Journal (Water Pollution Control Federation)*, vol. 53, n° 9, p. 1425-1433, 1981.
- [53]R. A. Leonard, « Movement of Pesticides into Surface Waters », in *SSSA Book Series*, H. H. Cheng, Éd., Madison, WI, USA: Soil Science Society of America, 1990, p. 303-349. doi: 10.2136/sssabookser2.c9.
- [54]D. F. Young et M. M. Fry, « Field-scale evaluation of pesticide uptake into runoff using a mixing cell and a non-uniform uptake model », *Environmental Modelling & Software*, vol. 122, p. 104055, déc. 2019, doi: 10.1016/j.envsoft.2017.09.007.
- [55]R. F. Carsel, J. C. Imhoff, P. R. Hummel, J. M. Cheplick, et A. S. Jr. Donigian, « PRZM-3, a model for predicting pesticide and nitrogen fate in the crop root and unsaturated soil zones Users manual for release 3.12. », National Exposure Research Laboratory, USEPA, Athens, 2005. Consulté le: 18 septembre 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.scirp.org/reference/referencespapers?referenceid=19665>
- [56]R. H. McCuen, « Closure to “Relation Between Curve Number and Runoff Coefficient” by Richard H. McCuen and Timothy R. Bondelid (December, 1981) », *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, vol. 109, n° 1, p. 195-198, mars 1983, doi: 10.1061/(ASCE)0733-9437(1983)109:1(195).
- [57]L. Werner, « Berechnung von Hochwasserabflüssen unter Anwendung von Gebietskenngrößen », Thèse, Universität Karlsruhe, Allemagne, 1984. Consulté le: 1 octobre 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://search.worldcat.org/fr/title/Berechnung-von-Hochwasserabflussen-unter-Anwendung-von-Gebietskenngrößen/oclc/74745969>
- [58]E. Forootan, « GIS-based slope-adjusted curve number methods for runoff estimation », *Environ Monit Assess*, vol. 195, n° 4, p. 489, mars 2023, doi: 10.1007/s10661-023-11039-6.
- [59]S. Frey, « Swiss Final Report on the Validation of Oecd Pesticide Aquatic Risk Indicators », janv. 2001, Consulté le: 6 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.academia.edu/84027203/Swiss_Final_Report_on_the_Validation_of_Oecd_Pesticide_Aquatic_Risk_Indicators
- [60]I. Hashimoto, K. B. Deshpande, et H. C. Thomas, « Peclet Numbers and Retardation Factors for Ion Exchange Columns », *Ind. Eng. Chem. Fund.*, vol. 3, n° 3, p. 213-218, août 1964, doi: 10.1021/i160011a007.
- [61]C. Mouvet, P. Baranger, M. Wijnen, et J. Desprats, *Evaluation des risques de contamination des nappes par les produits phytosanitaires - Bilan des outils existants*. 1994. Consulté le: 10 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://side.developpement-durable.gouv.fr/NORM/doc/SYRACUSE/78803/evaluation-des-risques-de-contamination-des-nappes-par-les-produits-phytosanitaires-bilan-des-outils>
- [62]A. Ogata et R. B. Banks, « A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media », U.S. Geological Survey, Washington, D.C., rapport scientifique PP 411-A, 1961. [En ligne]. Disponible sur: <https://pubs.usgs.gov/pp/0411a/report.pdf>
- [63]J. I. Freijer, E. J. M. Veling, et S. M. Hassanizadeh, « Analytical solutions of the convection-dispersion equation applied to transport of pesticides in soil columns », *Environmental Modelling & Software*, vol. 13, n° 2, p. 139-149, avr. 1998, doi: 10.1016/S1364-8152(98)00016-4.
- [64]J. M. Davidson, C. E. Rieck, et P. W. Santelmann, « Influence of Water Flux and Porous Material on the Movement of Selected Herbicides », *Soil Science Soc of Amer J*, vol. 32, n° 5, p. 629-633, sept. 1968, doi: 10.2136/sssaj1968.03615995003200050017x.
- [65]P. S. C. Rao, A. G. Hornsby, et R. E. Jessup, « Indices for ranking the potential for pesticide contamination of groundwater », *Soil and Crop Science Society of Florida Proceedings*, vol. 44, p. 1-8, 1985.
- [66]C. Spadotto, M. Gomes, et A. Hornsby, « Pesticide leaching potential assessment in multi-layered soils », *Pesticidas: R. Ecotoxicol. e Meio Ambiente*, vol. 12, p. 1-12, déc. 2002, doi: 10.5380/pes.v12i0.3145.

- [67] A. A. M. F. R. Smit, M. Leistra, et F. van der Berg, « Estimation method for the volatilization of pesticides from plants », DLO Winand Staring Centre, Wageningen, 4, 1998. [En ligne]. Disponible sur: <https://library.wur.nl/WebQuery/wurpubs/308938>
- [68] R. A. Smidt *et al.*, « Beschrijving van de emissie van bestrijdingsmiddelen naar lucht bij bespuiting van bodem of gewas in ISBEST 3.0 », Alterra, Research Instituut voor de Groene Ruimte (Wageningen Universiteit), Alterra-rapport 207, 2000. [En ligne]. Disponible sur: <https://edepot.wur.nl/81092>
- [69] W. A. Jury, W. J. Farmer, et W. F. Spencer, « Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: II. Chemical Classification and Parameter Sensitivity », *Journal of Environmental Quality*, vol. 13, n° 4, p. 567-572, 1984, doi: 10.2134/jeq1984.00472425001300040012x.
- [70] A. a. M. F. R. Smit, F. van den Berg, et M. Leistra, « Estimation method for the volatilization of pesticides from fallow soil », 1997, Consulté le: 13 juin 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://research.wur.nl/en/publications/estimation-method-for-the-volatilization-of-pesticides-from-fallow>
- [71] H. Holterman, J. van de Zande, H. A. J. Porskamp, et J. M. G. P. Michielsen, « IDEFICS: a physical model of spray drift from boom sprayers in agriculture », in *Proceedings of the fourteenth International Conference on liquid atomization and spray systems, Insitute for Liquid Atomizaiton and Spray Systems-Europe (ILASS-Europe) & The Atomization and Sprays Research Group UMIST, Manchester* p. 493-498, Manchester, juill. 1998, p. 493-498.
- [72] R. Kubiak *et al.*, « Pesticides in air: considerations for exposure assessment », European Commission, Health & Consumer Protection Directorate-General, Bruxelles, Rapport technique SANCO/10553/2006 Rev., 2008. Consulté le: 1 septembre 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://esdac.jrc.ec.europa.eu/public_path/projects_data/focus/air/docs/FOCUS_AIR_GROUP_R_EPORT-FINAL.pdf

Annexe I: Modélisation des processus de transfert des substances actives

I.1. Potentiel de transfert des pesticides par ruissellement

Le modèle de transfert utilisé dans le Phytorisque évalue la probabilité qu'une molécule appliquée sur un champ soit transportée jusqu'aux eaux de surface. En appliquant cette probabilité à un grand nombre de molécules, on peut estimer la fraction de pesticides atteignant les eaux de surface par rapport à la quantité épandue. Plusieurs mécanismes peuvent contribuer à ce transfert depuis la zone traitée vers le milieu aquatique. Ce transport peut se faire :

- **Par voie aérienne**, via des phénomènes de dérive et de volatilisation suivis d'une sédimentation sur les surfaces aquatiques. Si les transferts aériens peuvent être significatifs pour les parcelles à proximité immédiate des cours d'eau, seule une faible proportion des parcelles est localisée en bordure de cours d'eau à l'échelle régionale. De plus, l'instauration de zones tampons empêche l'application de pesticides à proximité immédiate des milieux aquatiques.
- **Par voie souterraine**, dans les eaux de drainage ou par lixiviation lorsque les cours d'eau sont en contact avec les nappes phréatiques. Cependant, les systèmes de drainage sont peu répandus en Wallonie. Concernant les transferts vers les eaux de surface via les nappes phréatiques, une molécule doit d'abord être transférée dans ces nappes, y persister suffisamment longtemps, puis migrer vers les eaux de surface. Ce processus, long et complexe, rend ce mode de transfert généralement peu significatif par rapport au transport total.
- **Par ruissellement**. Ce mécanisme de transport inclut les molécules transportées en phase dissoute dans les eaux de ruissellement et celles adsorbées aux particules de sol charriées sous l'action de l'érosion.

Ainsi, on considère que les mécanismes de transport par voie aérienne ou souterraine contribuent au transfert des molécules dans les eaux de surface de façon négligeable à l'échelle régionale. Par conséquent, seul le transport par ruissellement est pris en compte dans l'évaluation du potentiel de transfert des pesticides vers les eaux de surface.

Les conditions climatiques, pédologiques et géographiques influencent fortement ce potentiel de transfert. La paramétrisation qui permet de définir les conditions les plus probables est détaillée à la section 4.2.

Enfin, l'exposition des eaux de surface aux pesticides ne se limite pas à la concentration prédictive dans ce compartiment immédiatement après un épisode pluvieux. Bien que la majorité du transport se produise lors du premier événement pluvieux dans la phase dissoute, le transfert particulaire par érosion peut s'étendre sur plusieurs mois. Pour cette raison, le potentiel de transfert est évalué en prenant en compte la contribution de l'ensemble des épisodes pluvieux ultérieurs susceptibles de provoquer un transfert.

I.1.1. Transfert de pesticide par ruissellement dans la phase dissoute (PD) et dans la phase particulaire (PP)

Pour déterminer la fraction de la quantité appliquée au sol qui est transportée jusqu'aux eaux de surface (F_{esu}), on distingue le transport par la phase dissoute et par la phase particulaire. La probabilité de transport totale est donnée par l'addition des probabilités associées à ces deux formes de transport (équations (82) et (92)) :

$$F_{esu} = F_{esu,pp} + F_{esu,pd} \quad (58)$$

Où

- *Fesu,pd est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute ;*
- *Fesu,pp est la probabilité que la molécule soit transportée par érosion dans la phase particulaire après les deux premiers épisodes pluvieux, sans tenir compte du fait qu'elle ait déjà pu être emportée lors de ces deux épisodes.*

Les sections I.1.2 et I.1.3 décrivent les potentiels de transport développés dans le cadre du Phytorisque pour le transport dans la phase dissoute et particulaire respectivement.

I.1.2. Transfert de pesticide par ruissellement dans la phase dissoute (PD)

1.2.1. Transport par ruissellement dans la phase dissoute lors du premier événement pluvieux

Lors de la première pluie après l'application de pesticides, une interaction complexe se produit entre les s.a. et les particules de sol situées en surface, dans une zone appelée "**couche de mélange**". Ce concept, introduit par Steenhuis & Walter (1980) [51] et Haith & Tubbs (1981) [52] a ensuite été repris par Leonard (1990) [53], qui l'a défini comme une profondeur efficace généralement inférieure à 10 mm, où les s.a. se fixent aux particules du sol et peuvent être mobilisées par le ruissellement de surface. Cette profondeur peut varier en fonction de plusieurs facteurs environnementaux. Toutefois, en s'appuyant sur le modèle uniforme¹⁴ de Young et Fry (2019) [54], utilisé dans le modèle PRZM (Pesticide Root Zone Model) [55], la profondeur de la couche de mélange a été fixée à 7,5 mm dans le modèle Phytorisque.

Pour qu'une molécule soit transportée par ruissellement sous forme dissoute, plusieurs conditions doivent être réunies. À chacune de ces conditions est associée une probabilité. Le produit de ces probabilités conditionnelles détermine ainsi la probabilité totale que la molécule atteigne les eaux de surface. Pour qu'une molécule soit transportée jusqu'aux eaux de surface lors du premier épisode pluvieux suivant son application, elle doit satisfaire aux trois conditions suivantes :

- 1) Être présente lors du premier épisode pluvieux** : la molécule ne doit pas avoir été volatilisée ni dégradée avant cet épisode.
- 2) Être dissoute dans la phase aqueuse du sol.**
- 3) Être transportée par ruissellement plutôt que par infiltration.**

La molécule atteindra les eaux de surface par la phase dissoute lors du premier épisode pluvieux uniquement si elle satisfait simultanément ces trois conditions. L'équation de transfert peut alors être formulée :

¹⁴ *Le modèle uniforme suppose que le pesticide est réparti de façon homogène dans une couche de mélange située en surface du sol, dans laquelle le ruissellement interagit entièrement et uniformément sur tout le profil vertical.*

$$F_{esu,pd}^I = P^I \cdot F_w \cdot R \quad (59)$$

Où

- $F_{esu,pd}^I$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute lors du premier épisode pluvieux ;
- P^I est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux ;
- F_w est la probabilité que la molécule soit dans la phase aqueuse du sol ;
- R est la probabilité qu'elle soit emportée par le flux du ruissellement plutôt que par infiltration.

1) Condition P : Probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux

La probabilité qu'une molécule appliquée sur une parcelle ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux (P) dépend de deux facteurs : le taux de dissipation de la molécule et le temps écoulé entre l'application et la première pluie. La dissipation résulte de la dégradation et de la volatilisation et cette dissipation est supposée suivre une cinétique de premier ordre¹⁵.

Le délai entre l'application d'un produit et le premier épisode pluvieux peut considérablement varier d'une situation à l'autre. Pour prendre en compte cette variabilité, le modèle s'appuie sur les travaux de Huber et al. (1998) [41] pour estimer l'intervalle de temps moyen entre une application aléatoire et la première pluie. Dans ces travaux, Huber et al., intègre la fonction de densité des intervalles de temps à l'équation de décroissance exponentielle afin d'estimer la probabilité moyenne de persistance de la molécule jusqu'au premier épisode pluvieux en fonction du temps de retour d'une pluie :

$$P^I = 0,5^{T_r \cdot (k_d + k_{v,s})} \quad (60)$$

Où

- P^I est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux [-] ;
- T_r est le temps de retour d'une pluie générant du ruissellement [j] ;
- k_d est la constante de dégradation biochimique de la substance dans le sol [j^{-1}] ;
- $k_{v,s}$ est la constante de volatilisation de la substance à la surface du sol [j^{-1}].

Le temps de retour (T_r) correspond au temps moyen écoulé entre deux épisodes pluvieux successifs ayant généré du ruissellement. Plus il est grand, plus la pluie est rare. Par conséquent, si T_r est grand, le retour avant la pluie est long, la molécule a donc le temps de se dissiper et la probabilité qu'elle ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux est faible. Ce paramètre est saisonnier, puisqu'il dépend de la pluviométrie saisonnière et de la teneur en eau du sol. En effet, un épisode pluvieux générera du ruissellement à de faibles précipitations s'il survient lorsque le sol est saturé en eau, comme c'est souvent le cas en hiver. À l'inverse, une quantité plus importante de précipitations sera nécessaire

¹⁵ La cinétique de premier ordre décrit un processus de dégradation où la fraction de la substance qui se dégrade par unité de temps est constante, ce qui signifie que la vitesse de dégradation diminue avec le temps, étant donné qu'elle est proportionnelle à la concentration

sur un sol désaturé pour qu'une fraction de ces précipitations s'écoule en surface. Dans le modèle Phytorisque, le temps de retour est estimé comme le temps moyen entre deux épisodes pluvieux ayant généré du ruissellement, soit lorsque le débit de ruissellement journalier (Q_r) est supérieur à un seuil minimal. Le temps de retour est donc déterminé via l'équation suivante :

$$T_r = \frac{\sum_{i=1, \forall Q_{r,i} > 2.10^{-5}}^n \Delta T}{n} \quad (61)$$

Où

- Q_r est le débit de ruissellement journalier [$m.j^{-1}$] ;
- ΔT , l'intervalle de temps entre deux épisodes pluvieux successifs ayant généré un ruissellement [j] ;
- n , le nombre d'épisodes pluvieux ayant généré un ruissellement.

Pour estimer le volume de ruissellement en fonction des conditions spécifiques (saison, pluviométrie journalière, type de sol), Mc-Cuen (1981) [56] a développé une méthode basée sur le Curve Number (CN), adaptée par Lutz (1984) [57] pour les conditions européennes. Le CN est un indice hydrologique empirique sans unité) qui permet d'estimer le ruissellement direct généré par un épisode pluvieux, en fonction du type de sol, de l'occupation du sol et de l'humidité du sol. Le modèle Phytorisque utilise cette approche pour calculer le volume de ruissellement à partir des données météorologiques du réseau PAMESEB et des caractéristiques hydropédologiques des parcelles traitées. L'équation utilisée est la suivante :

$$Q_r = (P_r - I_r)CN_p + \frac{CN_p}{\alpha} (e^{-\alpha(P_r - I_r)} - 1) \quad (62)$$

Où

- Q_r est le débit de ruissellement journalier [$m.j^{-1}$] ;
- P_r est la quantité de pluie journalière [$m.j^{-1}$] ;
- I_r représente l'infiltration journalière [$m.j^{-1}$] ;
- CN_p correspond au Curve Number adapté à la pente moyenne du sol [-] ;
- α est un paramètre dépendant des conditions d'humidité du sol et du taux de couverture végétale, variable selon le jour de l'année.

Selon cette équation, le débit de ruissellement journalier (Q_r) est estimé à partir de la quantité de pluie « disponible » pour le ruissellement ($P_r - I_r$), en tenant compte des caractéristiques du sol via le CN et d'un facteur de correction lié à l'humidité du sol et à la couverture végétale du sol.

La méthode du CN a été initialement développée pour des conditions standards, avec une pente moyenne de 5 %. Par conséquent, lorsque la pente réelle du terrain s'écarte de cette valeur, la méthode peut produire des estimations biaisées du ruissellement. Afin de corriger cette limitation, Sharpley et Williams (1990) [58] ont proposé une formule d'ajustement du CN en fonction de la pente moyenne réelle :

$$CN_p = \left(\frac{13.CN - 0,13.CN^2}{30 + 0,39.CN} \right) \cdot (1 - 2.e^{-13,86.p}) + CN \quad (63)$$

Où

- *CN_p correspond au Curve Number ajusté à la pente moyenne réelle du sol ;*
- *CN désigne la valeur standard du Curve Number (pour une pente moyenne de 5 %) ;*
- *p représente la pente moyenne réelle du sol [%].*

À partir des données météorologiques journalières des stations du réseau PAMESEB, la production de ruissellement pour chaque événement pluvieux peut être estimée. Le temps de retour est alors défini comme le temps moyen entre deux épisodes pluvieux produisant du ruissellement. Ce temps de retour est susceptible de varier selon la localisation, les précipitations étant en moyenne plus fréquentes au sud du sillon Sambre-et-Meuse qu'au nord.

2) Condition F_w : probabilité que la molécule soit dans la phase aqueuse du sol

La probabilité qu'une substance active soit sous forme dissoute dans la phase aqueuse du sol peut être estimée à l'aide de l'isotherme d'adsorption linéaire¹⁶ [53]. Cette probabilité s'exprime par l'équation suivante :

$$F_w = \frac{1}{1+K_d} \quad (64)$$

Où K_d est le coefficient de partage de la substance active entre la phase aqueuse et la phase adsorbée.

Le coefficient de partage de la s.a. entre la phase aqueuse et la phase adsorbée est défini comme le produit du coefficient d'adsorption sur le carbone organique (K_{oc}) et de la teneur en carbone organique du sol (f_{oc}).

$$K_d = K_{oc} \cdot f_{oc} \quad (65)$$

Où

- *K_{oc} , le coefficient d'adsorption sur le carbone organique [$\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$] ;*
- *f_{oc} , la teneur en carbone organique du sol [-].*

Le coefficient d'adsorption est spécifique à chaque s.a., tandis que le taux de carbone organique dépend des propriétés du sol.

3) Condition R : Probabilité que la molécule mobilisée soit emportée par ruissellement plutôt que par infiltration

Lors d'un épisode pluvieux, une s.a. présente dans la phase aqueuse de la couche de mélange du sol peut soit s'infiltrer dans le sol, soit être entraînée par ruissellement jusqu'aux eaux de surface. Afin d'estimer

¹⁶ L'isotherme d'adsorption linéaire suppose que l'adsorption est proportionnelle à la concentration en solution (pas de saturation du sol), que le sol est homogène et que le processus est réversible et atteint l'équilibre instantanément.

la probabilité qu'une molécule dissoute emprunte l'un de ces deux trajets, le modèle Phytorisque s'appuie sur un modèle développé par l'OCDE [59] et repris dans le modèle HAIR [31].

Par ailleurs, le modèle a été amendé par Young et Fry [54], pour qui seule une fraction du ruissellement, appelée "fraction d'interaction du ruissellement", est en contact avec les s.a. situées à la surface du sol et contribue à leur transport. Dans le modèle uniforme proposé par ces auteurs et intégré dans le modèle PRZM, la fraction interactive du ruissellement représente environ 16 % du ruissellement total.

La probabilité qu'une molécule soit entraînée par ruissellement plutôt que par infiltration lors d'un événement pluvieux est donc définie par le rapport entre le flux interactif de ruissellement et le flux total d'eau contribuant à la mobilité de la substance active en phase aqueuse. Cette probabilité est calculée quotidiennement à partir des données météorologiques du réseau PAMESEB et tient compte des conditions spécifiques chaque jour de pluie :

$$R_i = \frac{f_i \cdot Q_i}{I_i + f_i \cdot Q_i} \quad (66)$$

Où

- R_i est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface plutôt que par infiltration lors du jour de pluie i [-] ;
- f_i est la fraction d'interaction du ruissellement fixée à 0,16 [-] ;
- Q_i représente le volume de ruissellement journalier [$m.j^{-1}$]
- I_i représente l'infiltration journalière [$m.j^{-1}$].

Enfin, la valeur moyenne de cette variable est calculée sur une période donnée afin de généraliser cette probabilité à une échelle saisonnière ou annuelle :

$$R = \frac{\sum_{i \in R_i > 0} R_i}{n} \quad (67)$$

Où

- R est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface plutôt que par infiltration sur une période donnée [-] ;
- R_i est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface lors du jour de pluie i [-] ;
- n est le nombre de jours sur la période donnée pour lesquels le ruissellement est strictement positif.

1.2.2. Transport par ruissellement dans la phase dissoute endéans le second événement pluvieux succédant l'application :

L'adsorption d'une s.a. sur les particules du sol est un processus caractérisé par un équilibre dynamique. Par simplification, le modèle de transfert considère que l'équilibre entre les formes dissoutes et adsorbées est atteint instantanément lors d'un épisode pluvieux. Au cours de cette première pluie, les molécules dissoutes sont mobilisées soit par ruissellement, soit par infiltration.

Pour qu'une molécule soit transportée par ruissellement lors du second épisode pluvieux, plusieurs conditions doivent être remplies :

- La molécule ne doit pas avoir été dissipée, par dégradation ou volatilisation **condition (P^{II})** ;
- Elle doit se trouver sous forme dissoute **condition (F_w)** ;
- Elle doit être emportée par ruissellement plutôt qu'être infiltrée plus profondément dans le sol **condition (R)** ;
- Lors du premier événement pluvieux, elle ne doit pas avoir migré sous la couche de mélange, définie ici comme les 7,5 premiers millimètres du sol **condition (S^{II})**. Au-delà de cette profondeur, elle devient inaccessible au ruissellement et ne peut plus être mobilisée en surface.

La fraction de s.a. transférée sous forme dissoute vers les eaux de surface lors du second épisode pluvieux après application est déterminée en considérant le produit des probabilités qu'une molécule satisfasse à chacune de ces conditions :

$$F_{esu,pd}^{II} = P^{II} \cdot F_w \cdot R \cdot S^{II} \quad (68)$$

Où

- $F_{esu,pd}^{II}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute lors du second épisode pluvieux
- P^{II} est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du second épisode pluvieux ;
- F_w est la probabilité que la molécule soit dans la phase aqueuse du sol ;
- R est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface plutôt que par infiltration ;
- S^{II} est la probabilité que la molécule se trouve encore dans la couche de mélange du sol.

Les probabilités F_w et R sont repris aux équations (64) et (66) respectivement. La probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du second épisode pluvieux (P^{II}) est calculée suivant l'équation (60), pour laquelle on considère un pas de temps de $2*Tr$:

$$P^{II} = 0,5^{2*Tr \cdot (k_d + k_{v,s})} \quad (69)$$

Où

- P^{II} est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du second épisode pluvieux [-] ;
- Tr est le temps de retour d'une pluie générant du ruissellement [j] ;
- k_d est la constante de dégradation biochimique de la substance dans le sol [j^{-1}] ;
- $k_{v,s}$ est la constante de volatilisation de la substance à la surface du sol [j^{-1}].

La probabilité qu'une molécule reste dans la couche de mélange après un épisode pluvieux (S^{II}) dépend de son déplacement vertical sous l'effet de l'infiltration de l'eau non ruisselée. La profondeur moyenne de migration d'une molécule est déterminée en combinant la loi de Darcy, qui décrit le mouvement de l'eau dans le sol, et le phénomène d'adsorption des molécules sur les particules du sol. Cette profondeur est donnée par l'équation suivante :

$$z^1 = \frac{I_{mp}}{\theta_{cc} \cdot RF} \quad (70)$$

Où

- z^1 , la profondeur moyenne atteinte par la molécule lors de premier épisode pluvieux [m] ;
- I_{mp} , la quantité moyenne d'eau infiltrée dans le sol lors d'un épisode pluvieux [m] ;
- RF le facteur de retardation [-] ;
- θ_{cc} la teneur en eau du sol à la capacité au champ [-].

Ce processus est caractérisé par le facteur de retardation (RF), introduit par Hashimoto et al. en 1964 [60]. Il exprime la proportion de molécules immobilisées par adsorption par rapport à celles qui migrent avec l'eau. Le facteur de retardation dépend des propriétés physico-chimiques de la molécule et du sol. Il prend également en compte les molécules en phase gazeuse, qui ne sont pas entraînées par le flux d'eau et échappent ainsi à la convection induite par l'infiltration. Le facteur RF est donné par l'équation suivante, qui modélise la résistance au déplacement en tenant compte des 2 mécanismes : l'adsorption sur les particules de sol et la volatilisation dans la phase gazeuse [61] :

$$RF = 1 + \frac{\rho \cdot K_d}{\theta_{cc}} + \frac{a \cdot K_H}{\theta_{cc}} \quad (71)$$

Où

- ρ , la densité apparente du sol sec [t.m-3] ;
- K_d , le coefficient de distribution de la s.a. entre la phase solide et la phase aqueuse du sol [-] ;
- θ_{cc} , la teneur en eau du sol à la capacité au champ [-] ;
- a , la fraction volumétrique d'air dans le sol à la capacité au champ [-]
- K_H , la constante de Henry [-].

Si l'équation (70) calcule la profondeur moyenne d'infiltration, toutes les molécules ne migrent pas à la même vitesse. En effet, la migration des molécules est soumise à des variations de vitesse qui entraînent une dispersion de la s.a. dans le profil de sol. Pour représenter ce phénomène, l'équation de convection-dispersion [62] est utilisée. Elle repose sur l'hypothèse d'un transport du soluté combinant advection¹⁷ et dispersion. Dans ce modèle, la répartition d'une substance est modélisée comme une distribution gaussienne de la concentration en fonction de la profondeur. En connaissant la profondeur moyenne de la molécule (z) et l'écart type de sa dispersion dans le sol (σ), il est possible de calculer la probabilité qu'une molécule se situe sous une certaine profondeur après l'infiltration d'une quantité d'eau donnée. Pour ce faire, l'écart type est calculé en appliquant la solution analytique de l'équation de convection-dispersion proposée par Freijer et al. en 1998 [63] pour différentes profondeurs de migration. Pour le modèle de transfert du Phytorisque, une relation mathématique a été établie entre l'écart-type de la distribution de la substance active dans le sol et sa profondeur moyenne de migration, celle-ci est donnée par l'équation suivante :

¹⁷ L'advection se définit comme le transport d'une partie d'un élément donné par le milieu environnant. Dans ce cas-ci, le transport d'une partie des molécules de s.a. par l'infiltration de l'eau dans laquelle elles sont dissoutes.

$$\sigma = 0,1095 \cdot z^{0,4942} \quad (72)$$

Où

- σ , l'écart type de la distribution normale de la molécule dans le profil de sol [m] ;
- z , la profondeur moyenne atteinte par la molécule [m].

La probabilité qu'une molécule soit encore dans la couche de mélange est calculée en utilisant la fonction de distribution cumulative associée à cette distribution normale :

$$S^{II} = P(z^1 \leq z_m) = \frac{1}{2} \cdot \left(1 + \operatorname{erf} \left[\frac{z_m - z^1}{(0,1095 \cdot z^{0,4942}) \cdot \sqrt{2}} \right] \right) \quad (73)$$

Où

- z^1 correspond à la profondeur moyenne atteinte par la molécule après un épisode pluvieux [m] ;
- z_m est l'épaisseur de la couche de mélange, fixée à 0.0075 m dans le modèle uniforme.

Transport par ruissellement dans la phase dissoute lors des deux premiers épisodes pluvieux succédant l'application

Les probabilités de transfert F^I et F^{II} sont déterminées de manière à être indépendantes l'une de l'autre. Étant donné qu'une molécule ne peut être transportée qu'une seule fois, la probabilité qu'elle soit emportée lors de l'un des deux premiers épisodes pluvieux qui suivent l'application correspond à l'union de deux événements indépendants. Cette probabilité ($F_{esu,pd}^{\leq II}$) est donnée par l'équation suivante :

$$F_{esu,pd}^{\leq II} = F_{esu,pd}^I + F_{esu,pd}^{II} - F_{esu,pd}^I \cdot F_{esu,pd}^{II} \quad (74)$$

Où

- $F_{esu,pd}^I$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute lors du premier épisode pluvieux ;
- $F_{esu,pd}^{II}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute lors du second épisode pluvieux.

1.2.3. Transport par ruissellement dans la phase dissoute lors de l'ensemble des événements pluvieux succédant l'application

Si la majeure partie du transport des pesticides sous forme dissoute se produit lors des deux premiers épisodes pluvieux, une fraction non négligeable peut encore être transférée par après. C'est principalement le cas pour des s.a. persistantes dans l'environnement.

Pour estimer la fraction totale transportée, il est d'abord nécessaire de déterminer la probabilité qu'une molécule soit emportée uniquement après le second épisode pluvieux, sans tenir compte du fait qu'elle ait pu être transportée au cours des deux premiers événements. Afin de généraliser cette approche à une succession d'épisodes pluvieux postérieurs aux deux premières précipitations, le modèle est simplifié. Plutôt que d'évaluer directement la probabilité qu'une molécule soit entraînée par un événement

pluvieux donné, la probabilité que la molécule soit transportée par ruissellement sous forme dissoute durant un jour i est calculée de façon indépendante. Ensuite, pour estimer la fraction totale transférée au cours de la période étudiée, la probabilité d'union d'événements indépendants est appliquée.

Si l'on considère que le jour $i=0$ correspond à la date d'application de la molécule, la période d'analyse s'étend du lendemain du second épisode pluvieux jusqu'à une année après l'application. Le schéma suivant illustre cette période.

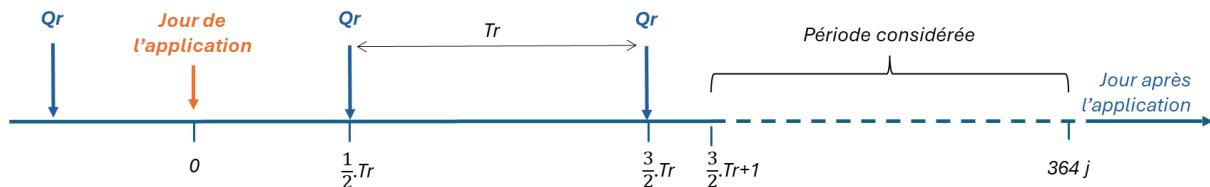


Figure 27 : période considérée pour la contribution du transport de pesticides lors de l'ensemble des événements pluvieux succédant le second épisode pluvieux générant du ruissellement T_r est le temps de retour d'une pluie générant du ruissellement et Q_r représente un événement pluvieux générant du ruissellement.

La probabilité qu'une molécule soit emportée au jour i dépend des conditions suivantes :

1) Condition P : persistance de la molécule

Cette probabilité est définie par une équation de décroissance exponentielle basée sur une cinétique de premier ordre, qui évalue la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée le jour i :

$$P(i) = e^{-i \cdot (k_d + k_{v,s})} \quad \forall i \in [1,5 \cdot T_r + 1; 365] \quad (75)$$

Où

- $P(i)$ correspond à la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée le jour « i » ;
- i est le nombre de jours écoulés depuis l'application ;
- T_r est le temps de retour d'un épisode pluvieux générant du ruissellement [jj] ;
- k_d est la constante de dégradation biochimique de la substance dans le sol [j-1] ;
- $k_{v,s}$ est la constante de volatilisation de la substance depuis la surface du sol [j⁻¹].

L'intervalle $i \in [1,5 \cdot T_r + 1; 365]$ indique que l'on considère les jours après les deux premiers épisodes pluvieux.

2) Condition F_w : probabilité que la molécule soit dans la phase aqueuse du sol

La probabilité que la molécule soit sous forme dissoute dans la phase aqueuse du sol est définie par l'équation (64) appliquée au jour i :

$$F_w(i) = \frac{1}{1 + K_d} \quad (76)$$

Où K_d est le coefficient de distribution de la molécule entre la phase solide et la phase aqueuse du sol.

3) Condition R : Probabilité que la molécule mobilisée soit emportée par ruissellement plutôt que par infiltration

La probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement plutôt que par infiltration est calculée à partir des équations (66) et (67), appliquées au jour i . Cette probabilité est estimée via la moyenne des probabilités journalières de ruissellement sur la période étudiée :

$$R(i) = \frac{\sum_{i \in R_i > 0} R_i}{n} \quad \forall i \in [1, 5 \cdot T_r + 1; 365] \quad (77)$$

Où

- R_i est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface plutôt que par infiltration sur une période donnée [-] ;
- R_i est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface plutôt que par infiltration lors du jour de pluie [-] ;
- n est le nombre de jours où le ruissellement est strictement positif sur la période étudiée.

4) Condition S : présence de la molécule dans la couche de mélange

La probabilité que la molécule se trouve encore dans la couche de mélange au jour i (et donc accessible au ruissellement) est déterminé par les équations (70) et (73) définies plus haut :

$$S(i) = (P_{zi} \leq z_m) \quad (78)$$

Où

- z_i correspond à la profondeur moyenne atteinte par la molécule le jour « i » [m] ;
- z_m est l'épaisseur de la couche de mélange, fixée à 0.0075 m dans le modèle uniforme.

La profondeur moyenne atteinte par la molécule au jour i est estimée à partir du flux d'infiltration cumulé depuis le jour d'application [64] :

$$z(i) = \frac{i \cdot I_m}{\theta_{cc} \cdot RF} \quad \forall i \in [1,5 \cdot T_r + 1; 365] \quad (79)$$

Où

- i , le nombre de jours après l'application [j]
- I_m correspond à la quantité moyenne journalière d'eau infiltrée [$m \cdot j^{-1}$] ;
- RF correspond au facteur de retardation [-] ;
- θ_{cc} est la teneur en eau du sol à la capacité au champ [-].

5) Condition Q : présence de précipitations au jour considéré

La probabilité qu'il pleuve le jour i et que cette pluie génère du ruissellement égale à l'inverse du temps de retour d'une pluie générant du ruissellement :

$$Q(i) = \frac{1}{T_r} \quad (80)$$

Où T_r est le temps de retour d'une pluie générant du ruissellement [j].

Probabilité que la molécule soit emportée après les deux premiers épisodes pluvieux :

Étant donné qu'une molécule ne peut être transportée qu'une seule fois, la probabilité qu'elle soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute après les deux premiers épisodes pluvieux est obtenue comme suit :

$$F_{esu,pd}^+ = 1 - \prod_{i=1+1,5 \cdot T_r}^{365} (1 - P(i) \cdot F_w(i) \cdot R(i) \cdot S(i) \cdot Q(i)) \quad \forall i \in]1,5 \cdot T_r; 365] \quad (81)$$

Où

- P_i est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée le jour « i » ;
- F_{wi} est la probabilité que la molécule soit sous forme dissoute dans la phase aqueuse du sol le jour « i » ;
- R_i est la probabilité que la molécule soit emportée par le ruissellement de surface plutôt que par infiltration le jour « i » ;
- S_i est la probabilité que la molécule soit encore présente dans la couche de mélange le jour « i » ;
- Q_i est la probabilité qu'il pleuve le jour « i » et que cette pluie génère du ruissellement.

1.2.4. Le potentiel de transfert de la molécule par ruissellement dans la phase dissoute lors de l'ensemble des événements pluvieux.

La probabilité que la molécule soit transportée par ruissellement dans la phase dissoute au cours de la totalité des épisodes pluvieux est obtenue par l'équation suivante :

$$F_{esu,pd} = F_{esu,pd}^{\leq II} + F_{esu,pd}^{+} - F_{esu,pd}^{\leq II} \cdot F_{esu,pd}^{+} \quad (82)$$

Où

- $F_{esu,pd}^{\leq II}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute durant les deux premiers épisodes pluvieux ;
- $F_{esu,pd}^{+}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase dissoute après ces deux premiers épisodes pluvieux, sans tenir compte du fait qu'elle ait déjà pu être emportée lors de ces événements.

Cette approche permet de quantifier la fraction d'une substance active atteignant le sol qui est susceptible d'être emportée par ruissellement sous forme dissoute sur une période prolongée. Elle intègre la migration de la substance par infiltration et les processus de dissipation de la substance (dégradation, volatilisation).

1.2.5. Prise en compte de la saison d'application

La saison d'application a une influence sur la quantité de ruissellement, l'infiltration et le temps de retour entre deux événements pluvieux. De plus, la saison impacte également la dissipation des s.a, celle-ci étant régulée par la température moyenne saisonnière. Pour intégrer ces variations saisonnières, il est d'abord essentiel d'identifier les périodes de l'année durant lesquelles chaque substance est appliquée.

Sur base du réseau météorologique PAMESEB, des statistiques climatiques saisonnières ont été établies pour le temps de retour des précipitations, la quantité moyenne de ruissellement, l'infiltration moyenne journalière et la température moyenne. Ainsi, en supposant que le transport de la substance par ruissellement en phase dissoute vers les eaux de surface survient essentiellement durant la saison d'application¹⁸, les paramètres climatiques saisonniers associés à cette période sont intégrés dans l'équation de transfert des substances par ruissellement en phase dissoute. En parallèle, les constantes de dissipation des s.a. (par dégradation biochimique et volatilisation) sont adaptées à la température moyenne saisonnière suivant l'équation d'Arrhenius-Walker équation (43) et d'Arrhenius (114), respectivement.

I.1.3. Transfert de pesticide par ruissellement dans la phase particulaire (PP)

Selon plusieurs auteurs, pour la majorité des composés et dans des situations générales d'érosion, le transport par ruissellement des pesticides s'effectue principalement via la phase aqueuse du sol (Haider, 1996 ; Agassi et al., 1995 ; Burgoa et Wauchope, 1995). Toutefois, une étude réalisée en 2022 dans le Limbourg [46] a mis en évidence que la phase particulaire jouait un rôle significatif dans ce transport, constituant même un mécanisme dominant dans le transfert à long terme. L'érosion constitue donc une voie de transfert importante, susceptible d'entraîner des rejets élevés de s.a. par ruissellement.

¹⁸ Cette supposition est liée au fait que le transport en phase dissoute se fait essentiellement lors des premiers épisodes pluvieux succédant l'application [46].

Une approche similaire au transfert par la phase dissoute est utilisée pour caractériser le transfert par la phase particulaire du ruissellement. La probabilité de transfert d'une molécule de s.a. lors du premier et du second événement pluvieux est évaluée séparément dans un premier temps. Cette probabilité est ensuite déterminée pour l'ensemble du reste des événements pluvieux. Pour finir, la probabilité totale de transfert est calculée en considérant la probabilité conjointe du premier, du second et du reste des événements pluvieux.

1.3.1. Transport par ruissellement dans la phase particulaire lors du premier événement pluvieux

Tout comme le transport par la phase dissoute, pour qu'une molécule soit transportée par ruissellement dans la phase particulaire, elle doit satisfaire aux trois conditions suivantes :

- 1) **Être présente lors du premier épisode pluvieux** : la molécule ne doit n'avoir été ni volatilisée ni dégradée avant cet épisode ;
- 2) **Être dans la phase solide du sol** : la molécule doit être adsorbée aux particules de sol ;
- 3) **Être transportée par érosion jusqu'aux eaux de surface** : la particule sur laquelle la molécule est adsorbée doit être mobilisée par le ruissellement et atteindre les eaux de surface.

La probabilité qu'une molécule soit emportée par ruissellement dans la phase particulaire lors du premier épisode pluvieux est calculée via l'équation suivante :

$$F_{esu,pp}^I = P^I \cdot F_s \cdot E \quad (83)$$

Où

- P^I est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux ;
- F_s est la probabilité que la molécule soit présente dans la phase particulaire du sol ;
- E est la probabilité que la particule de sol sur laquelle la molécule est adsorbée soit emportée par érosion.

1) Condition P^I : Probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du premier épisode pluvieux

Cette probabilité est déterminée suivant l'équation (60).

2) Condition F_s : Probabilité que la molécule soit présente dans la phase particulaire du sol

La probabilité qu'une molécule se trouve dans la phase particulaire du sol peut être estimée à l'aide de l'isotherme d'adsorption linéaire¹⁹ [53]. Ainsi, la fraction du pesticide adsorbée aux particules de sol s'exprime par l'équation suivante :

¹⁹ L'isotherme d'adsorption linéaire suppose que l'adsorption est proportionnelle à la concentration en solution (pas de saturation du sol), que le sol est homogène et que le processus est réversible et atteint l'équilibre instantanément.

$$F_s = \frac{1}{1 + \frac{1}{K_d}} \quad (84)$$

Où K_d est le coefficient de distribution de la s.a. entre la phase solide et la phase aqueuse défini à l'équation (65).

3) Condition E : Probabilité que la particule de sol sur laquelle la molécule est adsorbée soit emportée par érosion et atteigne les eaux de surface

Lors d'un épisode pluvieux érosif, une particule de sol sur laquelle une substance est adsorbée peut suivre l'une des deux trajectoires suivantes : soit la force du ruissellement est insuffisante pour la détacher du sol, celle-ci reste alors dans la couche de mélange, soit elle est arrachée et exportée hors de la parcelle agricole.

Le modèle suppose que, lors du premier épisode pluvieux, la totalité de la substance présente à la surface du sol est uniformément mélangée dans la couche de mélange. La probabilité qu'une particule de sol soit emportée dépend alors du rapport entre la quantité de sédiments produits lors d'un épisode pluvieux et la quantité de sol située dans la couche de mélange.

La quantité de sols érodés par hectare lors d'un épisode pluvieux (X_{e_i}) est estimée par l'équation universelle modifiée de perte de sol modifié (MUSS) modèle d'érosion proposé par Strassemeyer et al. (2007) et utilisé dans FOCUS et PRZM [31] :

$$X_{e_i} = a \cdot (Q_i \cdot q_p)^b \cdot K \cdot LS \cdot C \cdot P \quad (85)$$

Où

- Q_i , la quantité de ruissellement journalière lors de l'épisode pluvieux « i » exprimée en hauteur d'eau) [$mm \cdot j^{-1}$] ;
- q_p est le débit de pointe de l'averse [$mm \cdot h^{-1}$] ;
- K , le facteur d'érodibilité du sol [-] ;
- LS , le facteur topographique qui combine la longueur et la pente du versant [-];
- C , le facteur de culture tenant compte de l'effet protecteur de la couverture végétale contre l'érosion ;
- P , le facteur de pratiques de conservation évaluant l'efficacité des pratiques culturales ou d'aménagement du terrain destinées à réduire l'érosion [-] ;
- a et b , des valeurs empiriques fixées à 0,79 et 0,65 respectivement.

La quantité de ruissellement journalière est calculée à partir du modèle de Lutz (1984) [57] et décrite à l'équation (62) tandis que la valeur du débit de pointe a été estimé en supposant une répartition uniforme du volume total de ruissellement (Q) sur une durée de 12 heures, selon l'approche simplifiée proposée par Strassemeyer et al. (2007) [31].

Par ailleurs, l'érosion est un processus sélectif. Les matériaux érodés sont souvent enrichis en particules plus fines et en matière organique, qui constituent les principaux adsorbants des s.a.. Le taux d'enrichissement ou facteur d'enrichissement) en matière organique, noté r_{om} , est calculé empiriquement par l'équation de Menzel (1972) [55]. Cette équation fait intervenir une valeur moyenne de perte de sol par hectare (X_e) pour estimer l'enrichissement :

$$\ln(r_{om}) = 2 - 0.2 \ln(Xe) \quad (86)$$

Où Xe est la quantité moyenne de sols érodés par hectare lors d'un épisode pluvieux [$t.ha^{-1}$].

Par ailleurs, seulement 11,5 % des sols érodés parviennent effectivement aux eaux de surface ; il est donc indispensable d'appliquer un coefficient de transport afin d'estimer la fraction réelle de sédiments atteignant ces milieux [36]. La probabilité qu'une s.a. soit emportée par érosion lors d'un épisode pluvieux (E_i) correspond au rapport entre la quantité de sols érodés et la quantité de sols contenue dans la couche de mélange, multiplié par le facteur d'enrichissement et le coefficient de transport :

$$E_i = C_t \cdot \frac{r_{om} \cdot Xe_i}{10000 \cdot \rho \cdot z_m} \quad (87)$$

Où

- C_t est le coefficient de transport des sédiments depuis l'exutoire de la parcelle aux eaux de surface, fixée à 0,115 [-].
- r_{om} est le facteur d'enrichissement en matière organique [-] ;
- ρ est la densité apparente du sol sec [$g.cm^{-3}$] ;
- z_m est l'épaisseur de la couche de mélange [m] ;
- Xe_i représente la quantité moyenne de sols érodés par hectare lors d'un épisode pluvieux « i » [t/ha].

Enfin, la valeur moyenne de cette probabilité est calculée sur une période donnée afin de la généraliser à une échelle temporelle plus large :

$$E = \frac{\sum_{i \in R_1 > 0} E_i}{n} \quad (88)$$

Où

- E est la probabilité moyenne que la molécule soit emportée par érosion [-] ;
- E_i est la probabilité que la molécule soit emportée par érosion lors d'un événement pluvieux « i » [-] ;
- n est le nombre de jours de la période considérée pour lesquels le ruissellement est supérieur à 2.10^{-3} mm par jour.

1.3.2. Transport par ruissellement dans la phase particulaire lors du second événement pluvieux succédant l'application :

Lors du deuxième événement pluvieux, seules les molécules restées dans la couche de mélange peuvent être remobilisées, à condition qu'elles n'aient pas été dissipées. La fraction de pesticide transférée lors du second épisode pluvieux est donc évaluée en prenant en compte les trois mêmes conditions que pour le premier événement pluvieux, auxquelles s'ajoute la probabilité de présence dans la couche de mélange. Celle-ci s'obtient donc en multipliant les probabilités associées à ces quatre conditions. La probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase particulaire lors du second épisode pluvieux s'obtient donc :

$$F_{\text{esu,pp}}^{\text{II}} = P^{\text{II}} \cdot F_s \cdot E \cdot S^{\text{I}} \quad (89)$$

Où

- P^{II} est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée lors du second épisode pluvieux équation (69) ;
- F_s est la probabilité que la molécule soit dans la phase particulaire du sol équation (84) ;
- E est la probabilité que la particule de sol sur laquelle la molécule est adsorbée soit emportée par érosion équation (88) ;
- S^{I} est la probabilité que la molécule soit encore présente dans la couche de mélange équation (73).

Les probabilités de transfert F^{I} et F^{II} sont déterminées indépendamment l'une de l'autre. Étant donné qu'une molécule ne peut être transportée qu'une seule fois, la probabilité qu'elle soit emportée lors de l'un des deux premiers épisodes pluvieux correspond à la probabilité conjointe de deux événements indépendants :

$$F_{\text{esu,pp}}^{\leq \text{II}} = F_{\text{esu,pp}}^{\text{I}} + F_{\text{esu,pp}}^{\text{II}} - F_{\text{esu,pp}}^{\text{I}} \cdot F_{\text{esu,pp}}^{\text{II}} \quad (90)$$

Où

- $F_{\text{esu,pp}}^{\text{I}}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase particulaire lors du premier épisode pluvieux ;
- $F_{\text{esu,pp}}^{\text{II}}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase particulaire lors du second épisode pluvieux.

1.3.3. Transport par ruissellement dans la phase particulaire lors de l'ensemble des événements pluvieux succédant l'application

Le transport des s.a. par érosion peut se prolonger bien au-delà des premières pluies. Dans certains cas, le transport total par érosion peut dépasser celui observé dans la phase dissoute, particulièrement pour les s.a. persistantes et peu mobiles. Pour estimer la fraction totale transportée par érosion, il faut d'abord évaluer la probabilité qu'une molécule soit mobilisée uniquement après le second épisode pluvieux, sans tenir compte de son éventuel transport lors des deux premières pluies. Afin d'étendre cette approche à une série d'épisodes pluvieux ultérieurs, la même méthodologie que celle utilisée pour modéliser le transport des s.a. en phase aqueuse est appliquée, mais en considérant les s.a. adsorbées aux particules du sol. Pour qu'une molécule soit transportée un jour donné i , les conditions suivantes doivent être réunies :

1) Condition P

La probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée le jour i est donnée à l'équation (75).

2) Condition F_s :

La probabilité que la molécule soit sous forme adsorbée dans la phase particulaire du sol le jour i est définie par l'équation (84).

3) Condition E

Cette condition correspond à la probabilité que la molécule soit emportée par érosion lors d'un épisode pluvieux et est reprise par l'équation (87)

4) Condition S

Cette condition évalue la probabilité que la molécule se trouve encore dans la couche de mélange du sol, ce qui est déterminée par l'équation (70) et (73)

5) Condition Q

La probabilité qu'il pleuve le jour i et que cette pluie génère du ruissellement est calculée suivant l'équation (80).

Étant donné qu'une molécule ne peut être transportée qu'une seule fois, la probabilité qu'une molécule soit emportée par ruissellement dans la phase particulaire après les deux premiers épisodes pluvieux se calcule donc ainsi :

$$F_{esu,pp}^+ = 1 - \prod_{i=1+1,5.T_r}^{365} (1 - P(i) \cdot F_s(i) \cdot E(i) \cdot S(i) \cdot Q(i)) \quad \forall i \in]1,5.T_r; 365] \quad (91)$$

Où

- P_i est la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée le jour « i » ;
- F_s est la probabilité que la molécule soit dans la phase particulaire du sol ;
- E est la probabilité que la molécule soit emportée par érosion ;
- S est la probabilité que la molécule soit encore présente dans la couche de mélange ;
- Q est la probabilité qu'il pleuve le jour « i » et que cette pluie génère du ruissellement.

1.3.4. Le potentiel de transfert de la molécule par ruissellement sous la phase particulaire lors de tous les événements pluvieux :

La probabilité que la molécule soit transportée par ruissellement dans la phase particulaire au cours de la totalité des épisodes pluvieux est obtenue par l'équation suivante :

$$F_{esu,pp} = F_{esu,pp}^{\leq II} + F_{esu,pp}^+ - F_{esu,pp}^{\leq II} \cdot F_{esu,pp}^+ \quad (92)$$

Où

- $F_{esu,pp}^{\leq II}$ est la probabilité que la molécule soit emportée par ruissellement dans la phase particulaire durant les deux premiers épisodes pluvieux par érosion ;
- $F_{esu,pp}^+$ est la probabilité que la molécule soit transportée par ruissellement dans la phase particulaire après les deux premiers épisodes pluvieux par érosion.

Cette approche permet de quantifier la fraction d'une s.a. atteignant le sol qui est susceptible d'être emportée par ruissellement sous forme particulaire sur une période prolongée, en intégrant la migration de la molécule sous l'effet de l'infiltration et en tenant compte des processus de dissipation de la molécule dans le sol (dégradation, volatilisation).

1.3.5. Prise en compte de la saison d'application

La saison d'application a une influence directe sur la quantité de s.a. transportée par érosion, le temps de retour d'un événement pluvieux, ainsi que sur la cinétique de dissipation des s.a., celle-ci étant

impactée par la moyenne saisonnière de la température et la teneur en eau du sol. Pour intégrer ces variations saisonnières, le facteur de transfert par érosion dans la phase particulaire est calculé séparément pour les quatre saisons.

Étant donné que l'intervalle moyen entre deux épisodes pluvieux successifs est largement inférieur à la durée d'une saison, le transport de la substance vers les eaux de surface par ruissellement lors des deux premiers événements pluvieux survient essentiellement durant la saison d'application. Les paramètres climatiques associés à cette période sont intégrés dans l'équation de transfert des pesticides par ruissellement en phase particulaire, garantissant une évaluation plus précise du transport des s.a. vers les eaux de surface en fonction des conditions climatiques.

Cependant, contrairement au transport par ruissellement dans la phase dissoute qui intervient principalement durant la saison d'application, le transport par la phase particulaire peut se prolonger bien au-delà de cette période. Les paramètres climatiques et les quantités moyennes d'érosion sont donc adaptés afin de mieux refléter les conditions réelles observées au cours du temps.

En effet, la contribution d'un pesticide au transport décroît au fil des saisons en fonction de la fraction de substance encore présente dans la couche de mélange. Celle-ci est plus importante durant la saison d'application que dans les saisons suivantes. Le modèle Phytorisque intègre un système de pondération des paramètres saisonniers en fonction de la quantité résiduelle de s.a. disponible pour le transport.

Ainsi, les variables utilisées dans le calcul du transport, lorsqu'elles dépendent de la saison, sont pondérées en fonction de coefficients de contribution saisonnière selon l'équation ci-dessous. Celle-ci calcule une moyenne pondérée des valeurs saisonnières de la variable X :

$$X_{rep} = \frac{\sum_{s=0}^3 D_s X_s}{\sum_{s=0}^3 D_s} \quad (93)$$

Où

- X_{rep} est une variable moyenne représentative pondérée d'une variable saisonnière,
- X_s correspond à une variable calculée pour chaque période saisonnière,
- D_s correspond aux poids associés à cette variable pour chaque saison

Les périodes saisonnières sont définies comme suit. Par simplification, chaque saison est supposée durer 91 jours, et une demi-saison 45 jours :

- $s = 0$: Saison d'application
- $s = 1$: Première saison après l'application
- $s = 2$: Seconde saison après l'application
- $s = 3$: Troisième saison après l'application

Les coefficients de pondération D_s sont définis comme la fraction de substance encore présente dans la couche de mélange au milieu de chaque saison suivant l'application. Cette fraction est déterminée par :

$$D_s = P_s \cdot S_s \quad (94)$$

Où

- P_s représente la probabilité que la substance ne soit pas encore dissipée au milieu de la saison s ;
- S_s correspond à la probabilité que la substance soit encore présente dans la couche de mélange au milieu de la saison s , indépendamment de sa dissipation.

La figure 4 illustre l'évolution de la fraction de s.a. disponible pour le transport par érosion en fonction du temps.

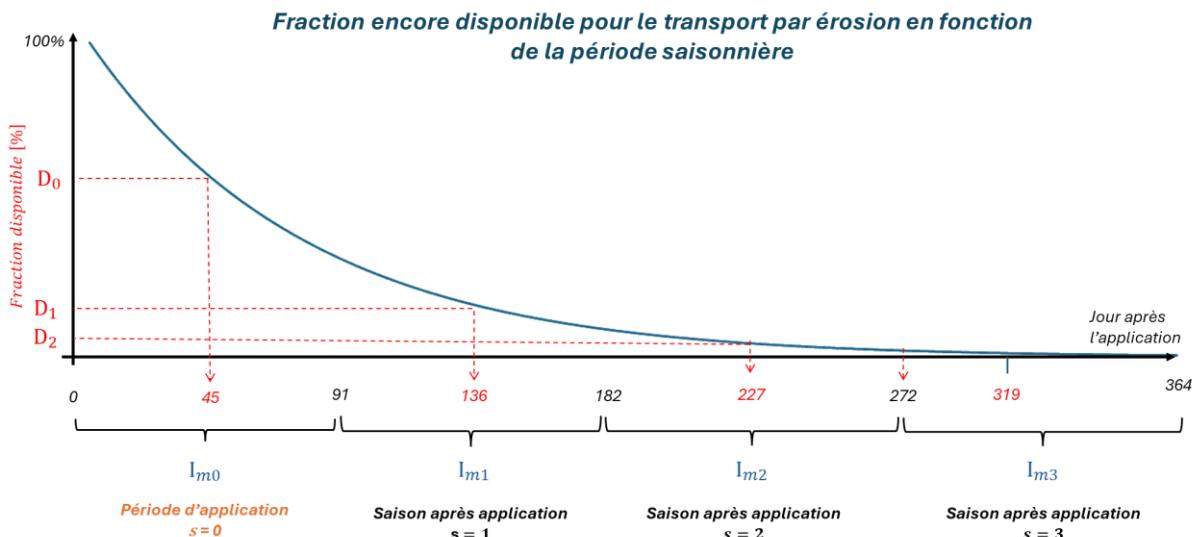


Figure 28 : fraction d'une substance disponible pour le ruissellement en fonction de la période saisonnière suivant l'application

Les deux probabilités P_s et S_s sont calculées pour déterminer les coefficients de pondération des variables saisonnières :

1) Probabilité que la molécule se situe encore dans la couche de mélange (S_s)

La probabilité que la molécule se situe encore dans la couche de mélange au milieu de la saison s , est définie par l'équation (73). Celle-ci dépend de la profondeur moyenne à laquelle se trouve la substance au milieu de la saison s :

$$z(s) = \frac{I_s}{\theta_{cc} \cdot RF} \quad (95)$$

Où

- I_s correspond à la quantité cumulée d'eau infiltrée depuis la période d'application jusqu'au milieu de la saison s , exprimée en hauteur d'eau [m];
- RF correspond au facteur de retardation [-];
- θ_{cc} est la teneur en eau du sol à la capacité au champ [-].

L'infiltration cumulée depuis le début de la saison d'application jusqu'au milieu d'une saison donnée s est estimée en multipliant l'infiltration journalière moyenne de chaque saison par le nombre de jours écoulés jusqu'au milieu de la période considérée. Les équations correspondantes sont les suivantes :

$$I_s = \begin{cases} I_0 = 22 \cdot I_{m0} \\ I_1 = 45 \cdot I_{m0} + 45 \cdot I_{m1} \\ I_2 = 45 \cdot I_{m0} + 91 \cdot I_{m1} + 45 \cdot I_{m2} \\ I_3 = 45 \cdot I_{m0} + 91 \cdot I_{m1} + 45 \cdot I_{m3} \end{cases} \quad (96)$$

Où I_{ms} représente l'infiltration journalière moyenne de la période saisonnière « s »

La probabilité que la molécule soit encore présente dans la couche de mélange est alors calculée pour les différentes périodes saisonnières :

$$S_s = \begin{cases} S_0 = S(I_s = I_0) \\ S_1 = S(I_s = I_1) \\ S_2 = S(I_s = I_2) \\ S_3 = S(I_s = I_3) \end{cases} \quad (97)$$

2) Probabilité que la substance ne soit pas dissipée (P_s)

La probabilité que la molécule ne soit pas dissipée par volatilisation ou dégradée au milieu de la saison « s » est donnée par le modèle de décroissance exponentielle de cinétique d'ordre 1, adapté pour les taux de dissipation k_d et $k_{v,s}$, qui sont fonction des moyennes de la température et de la teneur en eau du sol pour période saisonnière « s » :

$$P_s = \begin{cases} P_0 = e^{-22,5 \cdot (k_d(T_0) + k_{v,s}(T_0))} \\ P_1 = e^{-45 \cdot (k_d(T_0) + k_{v,s}(T_0))} \cdot e^{-45 \cdot (k_d(T_1) + k_{v,s}(T_1))} \\ P_2 = e^{-45 \cdot (k_d(T_0) + k_{v,s}(T_0))} \cdot e^{-91 \cdot (k_d(T_1) + k_{v,s}(T_1))} \cdot e^{-45 \cdot (k_d(T_2) + k_{v,s}(T_2))} \\ P_3 = e^{-45 \cdot (k_d(T_0) + k_{v,s}(T_0))} \cdot e^{-91 \cdot (k_d(T_1) + k_{v,s}(T_1))} \cdot e^{-91 \cdot (k_d(T_2) + k_{v,s}(T_2))} \cdot e^{-45 \cdot (k_d(T_3) + k_{v,s}(T_3))} \end{cases} \quad (98)$$

Où

- k_d et $k_{v,s}$ correspondent respectivement à la constante de dégradation biochimique et à la constante de volatilisation de la substance depuis la surface du sol, tous deux fonctions de la température de l'air [J^{-1}] ;
- T_s est la température moyenne saisonnière de la saison « s ».

La constante de dégradation biochimique et la constante de volatilisation sont calculées pour chaque saison de l'année en remplaçant la valeur de référence de 20°C par la température moyenne saisonnière dans l'équation d'Arrhenius-Walker équation (43) et dans l'équation d'Arrhenius équation (31) respectivement.

I.2. Potentiel de transfert des pesticides dans les eaux souterraines

La lixiviation désigne le processus par lequel des s.a. dissoutes dans l'eau peuvent migrer dans le sol, parfois jusqu'aux nappes phréatiques. Il repose sur deux mécanismes principaux : la convection, soit le transport des molécules par le flux d'eau sous l'effet de la gravité, et la diffusion, qui correspond au déplacement net des molécules d'une zone à forte concentration en soluté vers une zone à moindre concentration. Ce dernier mécanisme est quant à lui indépendant du mouvement de l'eau et repose sur un gradient de concentration.

Après une pluie, l'eau non ruisselée s'infiltra dans le sol par gravité et entraîne avec elle les s.a. présentes dans la phase aqueuse. La vitesse d'infiltration dépend de la texture, de la porosité, de la structure du sol et de sa teneur en eau. Avant d'atteindre les eaux souterraines, l'eau traverse une zone superficielle de quelques dizaines de centimètres, soumise à l'évaporation et à l'absorption par les racines. L'infiltration peut être ralentie ou stoppée par l'évapotranspiration ou la rétention des couches supérieures. Si elle continue, l'eau atteint une zone saturée en eau située juste au-dessus de la nappe phréatique.

La lixiviation d'une s.a. est influencée par de nombreux facteurs. Parmi ceux liés aux propriétés du sol, on retient :

- La teneur en matière organique, qui accroît la rétention des molécules via l'adsorption ;
- L'activité biologique du sol, responsable de la dissipation des s.a. ;
- La texture, qui influence la dynamique de l'infiltration ;
- La profondeur de la nappe phréatique, qui impacte la probabilité qu'une molécule soit dégradée avant d'atteindre la zone saturée en eau.

Par ailleurs, les propriétés physico-chimiques des s.a. influencent leur propension à se retrouver dans les nappes phréatiques, notamment leur adsorption à la matière organique et leur persistance. De même, les conditions climatiques affectent la vitesse de migration des s.a., qui dépend du flux d'eau traversant les différentes couches.

I.2.1. Modèle de transfert par lixiviation du Phytorisque

Le modèle de transfert par lixiviation utilisé dans le Phytorisque repose sur le concept du facteur d'atténuation (AF) développé par Rao et al. en 1985 [65]. Dans ce modèle, on considère le déplacement vertical d'une s.a. jusqu'à la zone saturée en eau. Au cours de cette migration, une fraction des molécules de s.a. est dégradée sous l'effet de divers processus de dissipation. Le facteur d'atténuation quantifie la proportion de s.a. non dissipée à la sortie de la zone vadose (zone non saturée du sol).

2.1.1. Caractéristiques du système sol du modèle de transfert

Le temps de parcours et la dissipation d'une substance dépendent des propriétés pédologiques telles que la teneur en matière organique, la température du sol et l'activité biologique. Or, ces caractéristiques varient en fonction de la profondeur et ne sont pas homogènes sur l'ensemble du profil du sol. À partir de leur premier modèle, Hornsby et Rao ont donc adapté le facteur d'atténuation, initialement conçu pour un sol homogène, à un sol multicouche. Dans cette nouvelle approche, chaque couche est considérée comme homogène, avec ses propres propriétés pédologiques spécifiques [66].

Le Phytorisque s'inspire de ce modèle et le profil du sol est ainsi divisé en quatre couches distinctes dont chacune est considérée comme homogène :

- **La couche de surface « a »** correspond aux 10 premiers centimètres de sol. Cette couche est caractérisée par une teneur riche en matière organique et un flux d'eau journalier correspondant à l'infiltration moyenne journalière. La température présente une variabilité saisonnière, approximée par la température saisonnière à 20 cm de profondeur. Les molécules de s.a. y sont essentiellement dégradées par des processus biochimiques.
- **La couche de transition superficielle « b »** s'étend de 10 à 50 centimètres de profondeur. Similairement à la couche « a », le flux d'eau journalier correspond à l'infiltration journalière moyenne en surface et la température est approximée par la température moyenne saisonnière à 20 cm de profondeur. Comme la teneur en matière organique décroît avec la profondeur et pour éviter une intégration continue de cette variation dans les calculs, une *teneur représentative en matière organique* est adoptée comme valeur de référence. Elle correspond à la teneur en matière organique à 25 cm, estimée à 67% de la teneur de la couche de surface en appliquant l'extrapolation de Wilson et al. [43]. Les molécules de s.a. y sont également dégradées par des processus biochimiques, bien que leur cinétique soit ralentie par la diminution de matière organique.
- **La couche de transition profonde « c »** s'étend de 50 cm à 1 m de profondeur. Dans cette zone, la teneur représentative en matière organique est estimée à 18% de celle de la couche de surface, qui correspond à la teneur observée à 75 cm de profondeur en appliquant le modèle de Wilson et al. [43]. La température à cette profondeur est assimilée à la température moyenne annuelle²⁰. Le flux net d'eau correspond à la recharge de la nappe, soit l'infiltration journalière moyenne diminuée de l'évapotranspiration. Dans cette couche, la molécule reste principalement dégradée par des processus biochimiques, quoique davantage ralenties.
- **La couche profonde « d »** s'étend d'un à deux mètres de profondeur. La matière organique y est très faible (estimée à environ 10 % de celle en surface). Comme pour la couche « c », la température est assimilée à la moyenne annuelle de la température et le flux net d'eau correspond à la recharge de la nappe. Par ailleurs, la faible activité biologique à cette profondeur rend la biodégradation quasiment inexistante, et la dégradation de la molécule se fait principalement par hydrolyse.

Le Tableau 18 reprend les caractéristiques des quatre couches de sol du modèle de transfert :

²⁰ Sur la période annuelle, la température moyenne du sol correspond à la température moyenne de l'air.

Tableau 18 : caractéristiques des quatre couches de sol modélisées dans le modèle du Phytorisque

Couche		Profondeur [m]	Teneur en MO	Température représentative	Flux hydrique moyen journalier	Processus de dégradation
Surface	a	0 – 0,1	Teneur en MO située en surface	Température saisonnière à 20 cm	Infiltration moyenne journalière	Biochimique
Transition superficielle	b	0,1 – 0,5	67% de la teneur en surface	Température saisonnière à 20 cm	Infiltration moyenne journalière	Biochimique, mais atténué
Transition profonde	c	0,5 – 1	18% de la teneur en surface	Température annuelle à 20 cm	Recharge moyenne journalière de la nappe	Biochimique, mais atténué
Profonde	d	1 – 2	10% de la teneur en surface	Température annuelle à 20 cm	Recharge moyenne journalière de la nappe	Uniquement par Hydrolyse

Dans des conditions réelles, la profondeur de la couche inférieure (couche d) peut largement dépasser 2 mètres, en raison d'une profondeur de nappe phréatique souvent bien plus importante. Toutefois, prendre en compte la profondeur totale jusqu'à la nappe dans le calcul du facteur d'atténuation risquerait de surestimer l'effet protecteur du sol, en particulier dans le contexte de la Wallonie. Certains substrats, comme les sables bruxelliens ou les calcaires fissurés, présentent une très forte conductivité hydraulique. À l'inverse, certains matériaux géologiques peuvent former des barrières quasi imperméables, ce qui allonge considérablement le temps de transfert vers la nappe. La variabilité géologique marquée en Wallonie complique la généralisation de l'estimation du temps de parcours d'une molécule à travers les différentes couches du sol jusqu'à la nappe phréatique. Une profondeur de deux mètres a néanmoins été retenue, car elle constitue une profondeur de référence couramment utilisée pour l'évaluation du risque de transfert vers les eaux souterraines [66].

2.1.2. Calcul du temps de parcours

Le temps de parcours d'une molécule le long du profil de sol (T_p) est déterminé en tenant compte à la fois de l'écoulement de l'eau dans un sol, tel que décrit par la loi de Darcy, et de l'adsorption des molécules sur la matière organique du sol. Ce dernier processus est quantifié par le facteur de retardation (RF), introduit par Hashimoto et al. en 1964 [60] (voir équation (71)), qui exprime la part de molécules temporairement fixées par adsorption par rapport à celles qui se déplacent avec le front d'infiltration. Ainsi, le temps de parcours d'une molécule à travers un profil de sol est calculé avec l'équation suivante [65] :

$$t_p = \frac{L \cdot \theta_{cc} \cdot RF}{J_w} \quad (99)$$

Où

- L est l'épaisseur de sol parcouru [m] ;
- θ_{cc} est la teneur en eau à la capacité au champ [-] ;
- J_w le flux hydrique moyen journalier traversant la couche de sol [$m \cdot j^{-1}$] ;
- RF est le facteur de retardation [-].

Selon cette formule, plus le flux d'eau est grand, plus le temps de parcours est court ; à l'inverse, plus le facteur de retardation est élevé, plus le temps de parcours est long.

Le flux hydrique moyen journalier (J_w) est déterminé en fonction de la profondeur de migration de la substance et de sa mobilité dans le sol.

Le temps nécessaire pour qu'une molécule traverse une couche de sol est donc obtenu via l'équation (99) appliquée avec les paramètres spécifiques à chaque couche.

2.1.3. Calcul du facteur d'atténuation

Facteur d'atténuation calculé par couche de sol

Le facteur d'atténuation (AF) d'une couche de sol correspond à la fraction de s.a. dégradée durant son transfert à travers cette couche. Il est calculé à l'aide des équations suivantes, selon la couche de sol considérée :

$$\text{Couche a} \quad AF_a = e^{-t_{Pa} \cdot (k_d(T))} \quad 100)$$

$$\text{Couche b} \quad AF_b = e^{-t_{Pb} \cdot \alpha(k_d(T))} \quad 101)$$

$$\text{Couche c} \quad AF_c = e^{-t_{Pc} \cdot \beta(k_d(T))} \quad 102)$$

$$\text{Couche d} \quad AF_d = e^{-t_{Pd} \cdot (F_w \cdot k_h(T))} \quad 103)$$

Où

- $k_d(T)$ correspond à la constante de biodégradation de la substance ajustée en fonction de la température moyenne du sol [J^{-1}];
- $k_h(T)$ correspond à la constante de dégradation de la substance via le processus d'hydrolyse ajustée en fonction de la température moyenne du sol [J^{-1}];
- t_{Pa} , t_{Pb} , t_{Pc} et t_{Pd} sont les temps de parcours moyens de la substance à travers les couches a, b, c et d, respectivement [J];
- F_w est fraction de la substance présente en phase aqueuse [-];
- α et β sont deux coefficients d'ajustement du taux de biodégradation avec la profondeur.

Pour rappel, la biodégradation d'une substance dans le sol est influencée par la profondeur à laquelle elle se trouve. En se basant sur les paramètres d'atténuation par défaut utilisés dans les modèles de référence PRZM et MACRO [34], Phytorisque adopte un modèle cinétique de premier ordre pour décrire la variation de la constante de biodégradation en fonction de la profondeur. Les coefficients α et β sont des coefficients d'ajustement de la constante de biodégradation k_d pour les couches de sol plus profondes b et c.

Par ailleurs, pour l'horizon de surface, les constantes de biodégradation et d'hydrolyse sont adaptées à la température moyenne et à l'humidité moyenne du sol selon l'équation d'Arrhenius-Walker équation (43) et pour les horizons plus profonds, ces constantes sont ajustées en fonction de la température à l'aide de l'équation d'Arrhenius (31). Pour les couches a et b, la moyenne saisonnière de la température mesurée à 20 cm de profondeur est utilisée. En revanche, pour les couches c et d, c'est la température moyenne annuelle qui est considérée comme représentative des horizons plus profonds²¹.

Au-delà d'une profondeur d'un mètre, la biodégradation est supposée négligeable en raison de la faible activité microbienne dans les couches profondes du sol [32]. La dissipation des molécules résulte

²¹ Une moyenne pluriannuelle est utilisée dans ce cas, d'une part en raison de l'incertitude importante quant à la période exacte au cours de laquelle la molécule traversera ces couches, et d'autre part parce qu'à cette profondeur, la dispersion est tel que le passage de l'ensemble des molécules s'étale sur une très longue période.

essentiellement de l'hydrolyse, qui n'affecte que la fraction de la substance présente en phase aqueuse. En supposant que l'équilibre entre les formes adsorbées et désorbées est atteint, la fraction susceptible d'être hydrolysée est estimée via l'équation (76).

Facteur d'atténuation du sol

Conformément à la méthode de Hornby et Rao [66], le facteur d'atténuation du sol (AF_s) est défini comme le produit des facteurs d'atténuation propres à chaque couche pédologique du profil considéré. Il représente ainsi la probabilité qu'une molécule traverse successivement les quatre couches sans être dégradée :

$$AF_s = AF_a \cdot AF_b \cdot AF_c \cdot AF_d \quad (104)$$

Facteur d'atténuation régional

Pour estimer le facteur d'atténuation à l'échelle régionale (AF_r), la variabilité des contextes hydrogéologiques doit être prise en compte. Certaines parcelles agricoles sont situées au-dessus de nappes superficielles ou peu profondes, généralement à moins d'un mètre de profondeur (absence de couche d). Dans de telles configurations, la probabilité qu'une molécule atteigne la nappe phréatique est sensiblement plus élevée que pour des nappes situées à plusieurs dizaines de mètres sous la surface.

Pour prendre en compte cette hétérogénéité spatiale, le facteur d'atténuation est ajusté à partir de la distribution de profondeur des nappes au sein des surfaces agricoles en grandes cultures et des prairies permanentes. Ainsi, pour chaque région agricole, les profondeurs de nappe sont catégorisées selon trois classes de profondeur de la zone saturée :

- 1) *Nappe superficielle* : zone saturée entre 0 et 50 cm de profondeur (couches a et b),
- 2) *Nappe peu profonde* : zone saturée entre 50 cm et 1 m (couches a, b et c),
- 3) *Nappe profonde* : zone saturée à plus de 1 m de profondeur (couches a, b, c et d).

Le facteur d'atténuation régional (AF_r) est ensuite calculé comme une moyenne pondérée des facteurs d'atténuation associés à chaque classe, en fonction de leur fréquence d'occurrence en grande culture (ce même calcul est appliqué en prairies permanentes) :

$$AF_r = f_1 \cdot AF_a \cdot AF_b + f_2 \cdot AF_a \cdot AF_b \cdot AF_c + f_3 \cdot AF_a \cdot AF_b \cdot AF_c \cdot AF_d \quad (105)$$

Où

- f_1, f_2 et f_3 correspondent aux fréquences d'occurrence des trois classes de profondeur des nappes : *superficie, peu profonde et profonde, respectivement* ;
- AF_a, AF_b, AF_c, AF_d correspondent aux facteurs d'atténuation associés aux couches de sol a, b, c et d.

Dans cette équation, chaque terme représente le facteur d'atténuation total pour une configuration de profondeur donnée, pondérée par sa fréquence d'occurrence.

2.1.4. Intégration de la saison d'application

Les conditions climatiques influencent la probabilité pour une substance atteigne les nappes phréatiques. D'une part, la vitesse de migration d'une substance dans le sol dépend du flux d'eau traversant les

différentes couches du sol. D'autre part, les températures saisonnières impactent la cinétique de dissipation des molécules.

Pour intégrer ces effets saisonniers dans le modèle, le flux d'infiltration et la température moyenne saisonnière sont ajustés à l'aide de *coefficients de contribution saisonnière* notés (S_s). Cette méthode est appliquée uniquement aux s.a. sensibles à la lixiviation, c'est-à-dire celles dont le temps de migration à travers la première couche de sol (couche a) est inférieur à un an. Pour les s.a. qui migrent plus lentement, une moyenne des paramètres climatiques sur deux années est utilisée : l'année d'application et l'année suivante.

Ainsi, le flux hydrique moyen journalier (J_w) utilisé pour résoudre l'équation (99) et la température utilisée pour ajuster les constantes de dégradation dans les couches *a* et *b*, sont calculés en appliquant les équations suivantes :

$$J_w = \begin{cases} \frac{0,5 \cdot I_{m0} + S_1 \cdot I_{m1} + S_2 \cdot I_{m2} + S_3 \cdot I_{m3}}{0,5 + S_1 + S_2 + S_3} & \text{si } I_0 + I_1 + I_2 + I_3 > FNa \\ I_{m.ba} & \text{sinon} \end{cases} \quad (106)$$

$$T^\circ = \begin{cases} \frac{0,5 \cdot T_0 + S_1 \cdot T_1 + S_2 \cdot T_2 + S_3 \cdot T_3}{0,5 + S_1 + S_2 + S_3} & \text{si } I_0 + I_1 + I_2 + I_3 > FNa \\ T^\circ m & \text{sinon} \end{cases} \quad (107)$$

Où

- J_w , le flux hydrique moyen journalier traversant la couche de sol [$m \cdot j^{-1}$] ;
- T° , la température utilisée pour ajuster les constantes de dégradation dans les couches « *a* » et « *b* » ;
- I_{m0} , I_{m1} , I_{m2} et I_{m3} , l'infiltration journalière moyenne de chaque période saisonnière, I_{m0} étant l'infiltration journalière moyenne pendant la saison d'application et I_{m1} , I_{m2} et I_{m3} les infiltrations journalières pendant les trois saisons suivantes [$m \cdot j^{-1}$] ;
- $I_{m.ba}$, l'infiltration moyenne journalière sur deux ans (année de l'application et année suivante) [$m \cdot j^{-1}$] ;
- I_0 , I_1 , I_2 , I_3 , l'infiltration cumulée de chaque période saisonnière [m] ;
- FNa , flux hydrique cumulé nécessaire pour que la molécule traverse la couche de sol *a* [m] ;
- S_1 , S_2 et S_3 , les coefficients de contribution saisonnière ;
- T_0 , T_1 , T_2 et T_3 , les températures moyennes saisonnières mesurées à 20 cm de profondeur ;
- $T^\circ m$, la température moyenne annuelle.

Le coefficient de contribution est fixé à 0.5 pour la saison d'application de la s.a.²². Pour les saisons suivantes, les coefficients de contribution saisonnière (S_s) sont déterminés selon une logique conditionnelle, déclinée en trois cas de figure :

1. *Migration déjà achevée : si l'infiltration cumulée jusqu'à la saison précédente (c'est-à-dire la saison d'application) suffit à faire traverser la couche de sol à la substance, alors la saison considérée (et les saisons ultérieures) ne contribue pas au transport. Le coefficient de contribution saisonnière est donc nul ($S_s = 0$).*

²² Cette valeur repose sur l'hypothèse selon laquelle l'application a lieu au milieu de la saison, et que, par conséquent, seule la moitié de l'infiltration cumulée sur la saison contribue au transport de la molécule.

2. *Migration achevée pendant la saison considérée : si la substance termine sa migration au cours de la saison considérée, la contribution saisonnière est déterminée comme le rapport entre l'infiltration de la saison et le déficit d'infiltration restant à la fin de la saison précédente.*
3. *Migration toujours en cours : si l'infiltration cumulée depuis l'application jusqu'à la fin de la saison considérée ne permet pas à la s.a. de traverser la couche de sol, alors la saison contribue pleinement au processus de migration et le coefficient de contribution saisonnière est égal à 1.*

L'équation générale pour calculer les coefficients de contribution saisonnière (S_s) est dès lors la suivante :

$$S_s = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum_{k=0}^{s-1} I_k \geq FN \\ \frac{FN - I_{s-1}}{I_s} & \text{si } \sum_{k=0}^{s-1} I_k \leq FN < \sum_{k=0}^s I_k \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (108)$$

Où

- *FN est le flux hydrique cumulé nécessaire pour que la molécule puisse traverser la couche de sol [m] ;*
- *I_k correspond à l'infiltration cumulée pendant la saison « k » [m] ;*
- *I_s correspond à l'infiltration cumulée pendant la saison « s » c'est-à-dire la saison pour laquelle on calcule le coefficient de contribution saisonnière (S_s) [m].*

Dans cette équation, I_k représente la quantité d'eau infiltrée pendant les saisons précédentes jusqu'à la saison « s », alors que I_s correspond à l'infiltration de la saison « s » elle-même.

Les flux hydriques cumulés nécessaires à la migration de la molécule (FN) à travers les couches a et b, en tenant compte des facteurs de retardation propres à chaque couche, sont calculés à l'aide des équations suivantes :

$$FNa = 0,1 \cdot \theta_{cc} \cdot RF_a \quad (109)$$

$$FNb = FNa + 0,4 \cdot \theta_{cc} \cdot RF_b \quad (110)$$

Où

- *FNa représente le flux hydrique cumulé nécessaire pour franchir la couche a [m] ;*
- *FNb représente le flux hydrique cumulé nécessaire pour franchir les couches a et b [m] ;*
- *RF_a, RF_b correspondent aux facteurs de retardation propre aux couches a, b respectivement [-] ;*
- *θ_{cc} correspond à la teneur en eau du sol à la capacité au champ [-].*

2.1.5. Calcul du potentiel de transfert par lixiviation

La fraction transférée vers les eaux souterraines est déterminée en prenant en compte les processus de ruissellement, de volatilisation dans l'atmosphère et de dégradation (via le facteur d'atténuation). Ainsi, la probabilité qu'une molécule arrivant au sol atteigne finalement la zone saturée en eau (F_{eso}) intègre l'ensemble de ces processus et peut être exprimée comme suit :

$$F_{eso} = AF_r \cdot (1 - (F_{esu} + F_{vol,sol})) \quad (11)$$

Où

- F_{esu} est la fraction de substance emportée par ruissellement ;
- F_{vol} est la fraction de substance volatilisée dans l'atmosphère depuis le sol ;
- AF_r correspond au facteur d'atténuation à l'échelle régionale.

Dans cette équation, le facteur d'atténuation régional est calculé à l'aide de l'équation (105), la fraction de substance emportée par ruissellement par l'équation (58) et la fraction de substance volatilisée dans l'atmosphère depuis le sol par l'équation (116).

I.3. Potentiel de transfert des pesticides par volatilisation

La volatilisation est un processus majeur de dispersion des s.a. dans l'environnement, potentiellement plus important que les autres mécanismes de transfert telles que la lixiviation, la dérive ou le ruissellement. Ce processus est impacté par les propriétés physico-chimiques des s.a., comme la pression de vapeur, la solubilité, la persistance et le coefficient d'adsorption au carbone organique. La formulation des produits commerciaux peut considérablement modifier la volatilisation, mais ce facteur est difficile à prendre en compte. Par ailleurs, les conditions climatiques ont un impact important sur les phénomènes de volatilisation.

Le processus de volatilisation depuis le sol repose sur un équilibre entre les différentes phases du sol et implique un transfert en phase gazeuse, suivi d'une diffusion vers l'atmosphère. Ce flux est ralenti si la molécule a migré plus en profondeur sous l'effet de l'infiltration ou si l'humidité du sol est élevée, car l'eau réduit la fraction gazeuse du sol. De plus, la « couche limite atmosphérique », fine couche d'air immobile au contact du sol, agit comme une résistance supplémentaire, modulant la vitesse de diffusion selon les propriétés de la substance et les conditions météorologiques.

Dans ce cadre, le Phytorisque intègre un modèle de volatilisation qui permet d'estimer la fraction totale de la dose appliquée susceptible d'être transférée vers l'atmosphère après application, en dehors des phénomènes de dérive. Ce modèle prend en compte la nature des surfaces interceptantes (sol ou végétation), les caractéristiques de la substance, et les conditions météorologiques et environnementales. Deux voies principales de volatilisation post-application sont distinguées :

- 1) **Depuis le couvert végétal** : La volatilisation à partir des surfaces foliaires se produit généralement rapidement, en raison de l'exposition directe aux flux atmosphériques et de l'absence d'adsorption significative. Toutefois, ce processus est de courte durée, car d'autres mécanismes de dissipation (photodégradation, lessivage, absorption par la plante...) réduisent rapidement la quantité de résidus disponible pour la volatilisation. Ainsi, la quasi-totalité de la fraction volatilisée depuis le couvert végétal est supposée se produire dans les premiers jours suivant l'application.
- 2) **Depuis le sol** : Ce mécanisme est en général moins intense, mais plus prolongé dans le temps, notamment pour les s.a. persistantes et modérément volatiles. L'humidité du sol et l'adsorption de la molécule sur les particules organiques conditionnent ici la volatilisation.

I.3.1. Volatilisation des pesticides depuis le couvert végétal et le sol

La fraction de la quantité appliquée sur la culture transférée dans l'atmosphère par volatilisation depuis le couvert végétal et depuis le sol (F_{vol}) est obtenue en sommant les contributions de ces deux formes de transport équations (115) et (116).

$$F_{vol} = F_{vol,cv} + F_{vol,sol} \quad (112)$$

Où

- $F_{vol,cv}$ est la probabilité que la molécule soit volatilisée depuis le couvert végétal, si elle a été interceptée par celui-ci ;
- $F_{vol,sol}$ est la probabilité que la molécule soit volatilisée depuis le sol si elle n'a pas été interceptée par le couvert végétal de la culture.

Les sections I.3.2 et I.3.3 décrivent respectivement les potentiels de transfert développés dans le cadre du Phytorisque pour la volatilisation depuis le couvert végétal et depuis le sol respectivement.

I.3.2. Volatilisation des pesticides depuis le couvert végétal

3.2.1. Estimation de la fraction volatilisée depuis le couvert végétal après 7 jours

La volatilisation d'une s.a. depuis le couvert végétal est estimée à l'aide de la régression logarithmique empirique proposée par Smit et al. (1998) [67] et adaptée par Smidt et al. (2001) [68], qui permet de calculer la fraction cumulée volatilisée au bout de 7 jours suivant l'application en fonction de la pression de vapeur :

$$\text{LOG}(\text{CV}_{\text{crop}}) = 1,661 + 0,316 \cdot \text{LOG}(P_v) \quad (113)$$

Où

- P_v est la pression de vapeur [mPa] ;
- CV_{crop} est la fraction cumulée de substance volatilisée après 7 jours [%].

3.2.2. Prise en compte de la saison d'application

La pression de vapeur (P_v) est ajustée en fonction de la température moyenne saisonnière grâce à l'équation d'Arrhenius, selon la relation suivante :

$$P_v = P_{v,\text{ref}} \cdot e^{-\frac{E_{\text{vol}}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T_m} \right)} \quad (114)$$

Où

- $P_{v,\text{ref}}$ est la pression de vapeur à la température de référence [Pa] ;
- E_{vol} est l'enthalpie molaire de vaporisation [J.mol^{-1}] ;
- R est la constante des gaz parfaits ;
- T_m température moyenne de la saison d'application [K] ;
- T°_{ref} température de référence [K].

Le modèle présenté ci-dessus (Smidt et al.) est un modèle empirique, développé sur base de conditions expérimentales. Ce faisant, la formule peut générer une valeur de CV_{crop} supérieure à 100% (ce qui signifierait une volatilisation plus grande que ce qui a été appliqué). Par conséquent, la fraction totale volatilisée depuis le couvert végétal ($F_{\text{vol,cv}}$) est estimée à partir de la fraction cumulée volatilisée, en appliquant une valeur maximale de 100% :

$$F_{\text{vol,cv}} = \min(0,01 \cdot \text{CV}_{\text{crop}}; 1) \quad (115)$$

I.3.3. Volatilisation depuis le sol

3.3.1. Estimation de la fraction volatilisée depuis le sol

La volatilisation des s.a. depuis le sol tel que modélisée dans le Phytorisque considère les phénomènes de migration des s.a. dans le sol emportées par l'infiltration de l'eau de pluie, leur dégradation par voie biochimique et leur passage en phase vapeur, qui permet leur diffusion vers la surface à travers les pores du sol. À l'inverse, le processus de ruissellement n'est pas pris en compte, étant donné sa faible ampleur par rapport aux autres phénomènes en jeu.

La prise en compte de la diffusion des s.a. à travers le sol implique que le taux de volatilisation n'est pas constant dans le temps. Il s'agit d'une fonction dynamique, dépendante de la profondeur à laquelle se situe la molécule à chaque instant, ce qui écarte l'hypothèse d'une cinétique de premier ordre. Dans ce contexte, l'intégration analytique de la volatilisation n'est pas envisageable, aussi est-elle réalisée numériquement en discrétilisant le temps en pas journaliers. La fraction volatilisée depuis le sol au temps t , ($F_{vol,sol}(t)$) peut être modélisée par l'équation suivante :

$$F_{vol,sol}(t) = \sum_{i=1}^t \left(k_v(i) \cdot \prod_{j=1}^i e^{-(k_d + k_{vj})} \right) \quad (116)$$

Où

- $k_{v,i}$ est le taux de volatilisation de la molécule au jour j ; pour le calcul au jour i , on considère l'ensemble des taux journaliers (k_{vj}) avec $j \leq i$, qui contribuent à la perte cumulative depuis l'application $[j^{-1}]$;
- k_d est la constante de dégradation biochimique de la molécule $[j^{-1}]$.

Dans cette équation, on additionne les contributions journalières de volatilisation à partir du jour 1 jusqu'au temps t . Chaque terme de la somme représente la quantité volatilisée au jour « i », pondérée par la fraction encore disponible dans le sol ce jour-là.

Le taux de volatilisation d'une substance ($k_v(t)$) dépend de la profondeur à laquelle se situe la molécule à un instant donné. Dans le modèle Phytorisque, ce taux est calculé à l'aide de l'équation (117), développée spécifiquement pour ce modèle. Cette formulation prend en compte deux éléments : d'une part, le temps nécessaire à la volatilisation d'une substance depuis la surface du sol, et d'autre part, le temps de diffusion de la molécule jusqu'à la surface. Ce second aspect repose sur le modèle de diffusion proposé par Carslaw & Jaeger (1959), et repris par Jury et al. (1983) [69].

$$k_v(t) = \begin{cases} k_{v,s} & \text{si } z(t) < z_m \\ \frac{\ln(2)}{\frac{z(t)^2}{D_e} + \frac{\ln(2)}{k_{v,s}}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (117)$$

Où

- $z(t)$ correspond à la profondeur moyenne à laquelle se situe la molécule à l'instant t [m];
- z_m est l'épaisseur de la couche de mélange [m];
- $k_{v,s}$ est la constante de volatilisation de la molécule à la surface du sol $[j^{-1}]$;
- D_e est le coefficient de diffusion effectif de la molécule dans le sol $[m^2 \cdot j^{-1}]$.

Selon cette équation, lorsque la molécule se situe dans la couche de mélange (à une profondeur $< z_m$), le taux de volatilisation théorique à la surface du sol est utilisé ($k_{v,s}$). Lorsque la molécule a dépassé la couche de mélange, la volatilisation est freinée par l'épaisseur de sol qui la sépare de la surface. Le taux est alors ajusté en fonction de cette profondeur (z_t) et de son coefficient de diffusion effectif dans le sol (D_e). Ce dernier quantifie la capacité de la molécule à migrer au sein de la matrice poreuse du sol par diffusion. Il dépend des propriétés physico-chimiques de la molécule, notamment sa constante de Henry et des caractéristiques du sol porosité, teneur en eau et teneur en matière organique).

La profondeur moyenne à laquelle se situe la molécule (z_t) est estimée en fonction du nombre de jours écoulés depuis l'application du pesticide, à l'aide de l'équation (79). Toutefois, la migration de la molécule vers les couches plus profondes ne commence pas immédiatement après l'application. En effet, en l'absence de précipitations, la molécule reste en surface. Le modèle émet donc l'hypothèse que tant que la molécule n'a pas dépassé la couche de mélange, la diffusion verticale dans le sol est négligeable voir modèle uniforme (décrit en section I.1.2). Cette hypothèse implique l'existence d'une période initiale, juste après l'application, durant laquelle la molécule peut être volatilisée sans être freinée par la profondeur.

La constante de volatilisation à la surface du sol ($k_{v,s}$) repose sur la régression empirique de Smit et al. (1997) [70], qui estime la fraction volatilisée d'une substance après 21 jours, à partir de données issues d'essais en conditions réelles. Cependant, dans l'établissement de cette régression, la volatilisation s'effectue en présence d'autre processus de dissipation telle que la biodégradation. Or, la constante de volatilisation utilisée dans l'équation (117) nécessite de déterminer une constante de volatilisation « théorique », c'est-à-dire exempte de l'influence de ces mécanismes de dissipation compétitifs, afin de modéliser uniquement le processus de volatilisation.

La régression de Smit reflète donc une volatilisation “réelle”, influencée de manière indirecte par la dégradation biochimique, sans que celle-ci soit intégrée explicitement dans la formule. Autrement dit, la régression ne modélise pas la biodégradation, mais elle en subit l'effet : si une molécule est biodégradée, elle ne peut plus se volatiliser, et la volatilisation réelle est plus faible. Par conséquent, cette méthode tend à surestimer la fraction volatilisée pour les s.a. peu persistantes, et à la sous-estimer pour les s.a. très persistantes [70]. Pour estimer le taux de volatilisation théorique, le modèle Phytorisque ajuste donc la régression de Smit en tenant compte de la persistance des substances via la DT₅₀. Cet ajustement considère les fractions volatilisées observées dans le modèle d'origine et les valeurs de DT₅₀ des 14 s.a. utilisées pour établir la régression initiale de Smit. Ainsi, par un processus d'itérations successives, une version ajustée de la régression a été obtenue. Celle-ci reflète uniquement la volatilisation, sans l'influence des autres processus :

$$\alpha = 0,782 + 0,125 \cdot \log(100 \cdot FP_{gaz}) \quad (118)$$

Où

- α est la fraction volatilisée ajustée en l'absence d'autres voies de dissipation [-] ;
- FP_{gaz} est la fraction de pesticide présente dans la phase gazeuse du sol [%].

La méthode utilisée pour calculer la fraction de pesticide présente dans la phase gazeuse du sol est décrite dans l'étude de Smit et al. (1997) [70].

Enfin, en considérant que la volatilisation suit une cinétique de premier ordre, la constante de volatilisation théorique ($k_{v,s}$) peut être calculée à partir de cette fraction selon la relation :

$$k_{v,s} = -\frac{\ln(1-\alpha)}{21} \quad (119)$$

Où α est la fraction de pesticide qui serait volatilisée dans l'atmosphère après 21 jours, en l'absence d'autres voies de dissipation [-].

Cette approche permet d'estimer une constante de volatilisation qui reflète uniquement le processus de volatilisation, sans être influencée par d'autres mécanismes de dissipation.

3.3.2. Prise en compte de la saison d'application

La volatilisation d'un pesticide se produit essentiellement dans les semaines qui suivent son application, au cours de la saison d'application. Toutefois, des s.a. modérément volatiles, mais très persistantes peuvent se volatiliser sur de longues périodes, à condition que la pluviométrie n'entraîne pas une infiltration trop importante.

Les conditions environnementales qui influencent la volatilisation (infiltration journalière, température et humidité du sol) évoluent au cours du temps, entraînant des variations dans les taux de dissipation. Pour tenir compte de ces variations saisonnières, des valeurs moyennes représentatives sont calculées en pondérant les valeurs saisonnières des variables à la contribution de la saison au processus de dissipation (voir équation (93)).

Le coefficient de contribution saisonnière (D_s) est calculé sur base de la fraction de pesticide encore disponible pour la volatilisation au cours d'une saison. Il correspond à la probabilité que la molécule ne soit pas encore dissipée au milieu de la période saisonnière :

$$D_s = P_s \quad (120)$$

Où P_s représente la probabilité que la substance ne soit pas encore dissipée au milieu de la saison s [-].

La fraction de pesticide disponible pour la volatilisation au milieu de la saison « s » (P_s) est déterminée par l'équation suivante :

$$P_s = \begin{cases} P_0 = \prod_{i=1}^{45} e^{-(k_d + k_{vi})} \\ P_1 = \prod_{i=1}^{91} e^{-(k_d + k_{vi})} \\ P_2 = \prod_{i=1}^{181} e^{-(k_d + k_{vi})} \\ P_3 = \prod_{i=1}^{272} e^{-(k_d + k_{vi})} \end{cases} \quad (121)$$

Où

- k_d correspond à la constante de dégradation biochimique ajustée à la température moyenne annuelle [J^{-1}] ;
- k_{vi} correspond au taux de volatilisation depuis le sol pour le jour « i », adapté à l'infiltration, la température du sol et la teneur en eau du sol moyennes annuelles [J^{-1}].

I.4. Potentiel de transfert des pesticides par dérive durant l'application

La dérive est un phénomène par lequel une fraction du traitement phytosanitaire ne parvient pas à atteindre sa cible et est transportée hors de la zone de traitement durant l'application. Cette perte non intentionnelle vers l'environnement proche peut impacter les parcelles voisines, et les milieux non cultivés.

Ce processus comprend deux composantes distinctes :

- 1) **La dérive aérienne de gouttelettes**, qui résulte du transport par le vent de fines gouttelettes émises par les buses avant qu'elles n'atteignent leur cible. Cette forme de dérive est fortement influencée par des paramètres techniques et météorologiques, comme la taille des gouttelettes, la hauteur de la rampe de pulvérisation, la vitesse du vent, l'orientation du jet ou le type de buse utilisé.
- 2) **La dérive gazeuse**, qui désigne la fraction du produit qui se volatilise au cours de son trajet entre la buse et la surface cible sous forme de vapeur. Ces vapeurs peuvent être transportées par les mouvements atmosphériques et contribuer à la contamination de zones plus éloignées. En fonction des conditions climatiques, notamment la température et l'humidité de l'air, la dérive gazeuse peut représenter une part équivalente, voire supérieure, à celle des gouttelettes.

Dans le cadre du modèle Phytorisque, la modélisation du transfert par dérive s'appuie sur les résultats du modèle IDEFICS (*IMAG Drift Evaluation For Field Sprayers by Computer Simulation*), développé par Holterman et al. (1998) [71] aux Pays-Bas. Ce modèle mécaniste simule la dérive des produits phytosanitaires appliqués par rampes conventionnelles sur cultures basses. Il repose sur une modélisation physique des trajectoires de gouttelettes émises par une buse unique, en tenant compte des forces dominantes telles que la gravité et la traînée aérodynamique. Contrairement aux tables de dérive empiriques, IDEFICS intègre à la fois la dérive de gouttelettes et la dérive gazeuse.

Dans leurs travaux, Holterman et al. ont exploré la sensibilité du modèle à plusieurs paramètres techniques et climatiques en modifiant un paramètre à la fois, à partir d'une configuration de référence. Une partie de ces résultats est reprise dans le document (FOCUS 2008) [72], notamment pour l'évaluation des émissions atmosphériques dans différents scénarios de pulvérisation. Parmi les facteurs climatiques, la température et l'humidité relative se révèlent déterminantes dans la dérive gazeuse. Le tableau suivant présente l'estimation de la fraction de la dose appliquée qui subit la dérive pour différentes combinaisons de ces deux variables, les autres conditions étant maintenues constantes.

Tableau 19 : Simulation de la fraction qui subit la dérive lors de la pulvérisation [72].

Température (°C)	Humidité relative (%)	Fraction qui subit la dérive (% dose appliquée)
10	40	4,8
10	80	1,9
15*	60*	3,9
20	40	5,8
20	80	2,3

*Valeur de référence

Ces valeurs ont été obtenues à partir de la configuration suivante :

Tableau 20 : Paramètres de référence utilisés dans les simulations de Holterman

Paramètre	Référence
Hauteur de la culture	0,5 m
Type de buse et orientation	Buse produisant des gouttelettes de taille fine à moyenne et orientation de la buse vers le bas verticalement
Vitesse du vent	3 m/s
Hauteur de la rampe	0,5 m
Angle au sommet	110°
Température	15°
Humidité relative	60%
Stabilité de l'atmosphère	Neutre

Le modèle IDEFICS a donc été utilisé pour simuler l'importance de la dérive dans quatre scénarios correspondant aux différentes saisons, en se basant sur les températures et humidités relatives moyennes saisonnières (voir Tableau 19). À partir des résultats de ces simulations, une régression polynomiale multivariée de second ordre a été établie afin de modéliser la fraction qui subit la dérive (F_{der}) en fonction de ces deux variables climatiques dans le modèle Phytorisque :

$$F_{der} = 4,5 + 0,0102 * T^o_{sa} + 0,0400 * HR_{sa} + 0,0050 \cdot T^o_{sa}^2 - 0,0015 \cdot T^o_{sa} \cdot HR_{sa} - 0,00081 \cdot HR_{sa}^2 \quad (122)$$

Où

- *HR_{sa} désigne l'humidité relative moyenne de l'air pendant la saison d'application [%] ;*
- *T^o_{sa} désigne la température moyenne de l'air pendant la saison d'application [°C].*

Cette équation évalue l'influence combinée de la température et de l'humidité relative sur la fraction de produit perdu par dérive. La figure suivante illustre la sensibilité du modèle à ces deux paramètres climatiques selon les résultats issus de la régression polynomiale du Phytorisque.

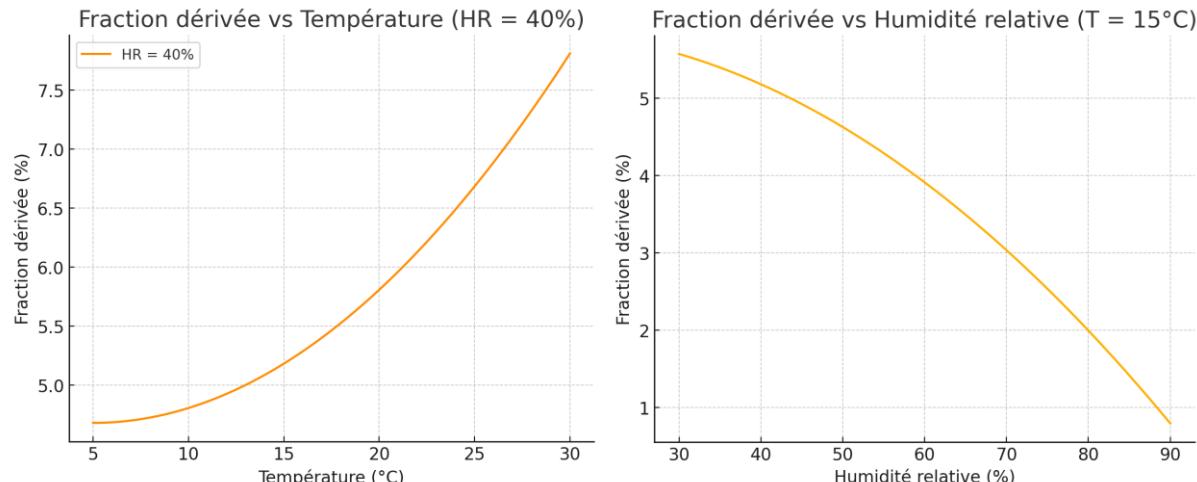


Figure 29 : Sensibilité de la dérive aux conditions météorologiques selon la régression polynomiale issue des simulations.

